



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

INSTITUTO DE FÍSICA

**DESORDEN EN SISTEMAS CON INTERACCIONES DE
LARGO Y CORTO ALCANCE**

TESIS

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

PRESENTA:

M. en C. Gustavo Alexis Domínguez Castro

TUTOR PRINCIPAL:

Dra. Rosario Paredes Gutiérrez, Instituto de Física, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:

Dra. Rocío Jáuregui Renaud, Instituto de Física, UNAM
Dr. Alejandro Reyes Coronado, Facultad de Ciencias, UNAM

Ciudad de México, Marzo 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Datos del Jurado

- Dra. Rosario Paredes Gutiérrrez
Instituto de Física,
Universidad Nacional Autónoma de México.
- Dr. Gerardo García Naumis
Instituto de Física,
Universidad Nacional Autónoma de México.
- Dr. Freddy Jackson Poveda Cuevas
Instituto de Física,
Universidad Nacional Autónoma de México
- Dra. Laura Elena Casandra Rosales Zárate
Centro de Investigaciones en Óptica, A. C.,
León Guanajuato.
- Dr. Ricardo Méndez Fragoso
Facultad de Ciencias,
Universidad Nacional Autónoma de México.

Índice general

1. Introducción	8
1.1. Antecedentes	8
1.2. Modelo de Anderson	12
1.2.1. Orden vs desorden	13
1.2.2. Localización de Anderson	14
1.2.3. Localización espacial	14
1.2.4. Bordos de movilidad	15
1.2.5. Conductores, aislante de bandas y aislante de Anderson	16
1.3. Simuladores cuánticos	18
1.3.1. Átomos ultrafríos	20
1.3.2. Moléculas polares ultrafrías	21
1.3.3. Iones atrapados	22
1.3.4. Átomos de Rydberg	22
1.4. Localización en simuladores cuánticos	24
1.4.1. Átomos ultrafríos I	24
1.4.2. Átomos ultrafríos II	25
1.4.3. Ondas electromagnéticas	26
1.4.4. Átomos ultrafríos III	27
1.4.5. Átomos ultrafríos IV	28
1.5. Conclusiones	29
2. Localización de una partícula	30
2.1. Modelo de Aubry-André	31
2.1.1. Aleatoriedad vs cuasiperiodicidad	32
2.1.2. Diagonalización numérica del modelo de Aubry-André	35
2.1.3. Razón de participación inversa	36
2.1.4. Rol del parámetro β	38
2.1.5. Rol de la fase aleatoria ϕ	39
2.1.6. Ausencia de borde de movilidad	40
2.1.7. Localización exponencial	41
2.1.8. Dimensión fractal	42
2.1.9. Espectro de energía	44
2.1.10. Desviación cuadrática media	45

2.1.11. Probabilidad de detección	47
2.1.12. Desbalance	48
2.2. Generalizando el modelo de Aubry-André	50
2.2.1. Tunelaje a segundos vecinos	50
2.2.2. Saltos de ley de potencia	52
2.3. Conclusiones	54
3. Localización de pares de partículas	56
3.1. Bosones de núcleo duro en una red cuasiperiódica con tunelaje de ley de potencia	56
3.1.1. Formación y localización del par repulsivo	57
3.1.2. Disociación del dímero como mecanismo de delocalización	64
3.1.3. Probabilidad de supervivencia del estado inicial	69
3.1.4. Dímeros de núcleo duro	73
3.1.5. Conclusiones	75
3.2. Localización de pares en cuasicristales unidimensionales con tunelaje de ley de potencia	76
3.2.1. Formalismo de función de Green	76
3.2.2. Transición extendido-localizado	79
3.2.3. Brecha de energía del par	82
3.2.4. Conclusiones	83
4. Localización en el esquema de campo medio	85
4.1. Modelo	86
4.2. Preparación del dominio ferromagnético	88
4.3. Dinámica del dominio ferromagnético	90
4.4. Correlación de la magnetización	94
4.4.1. Conclusiones	96
5. Conclusiones generales	98
A. Rumbo a la degeneración cuántica	100
A.1. Técnicas de enfriamiento	100
A.1.1. Enfriamiento Doppler	100
A.1.2. Enfriamiento evaporativo	102
A.2. Confinamiento	103
A.2.1. Potenciales ópticos	103
A.2.2. Redes ópticas	104
A.2.3. Trampa de Penning	105
A.2.4. Trampa de Paul	105
A.3. Potencial speckle	106
A.4. Resonancias de Feshbach	107
B. Deducción del Hamiltoniano de Aubry-André	109

Índice de figuras

1.1.	Philip Warren Anderson (1923-2020) físico de origen estadounidense, galardonado con el premio Nobel en 1977 por sus contribuciones en la teoría de localización, antiferromagnetismo y el rompimiento espontáneo de la simetría. Anderson es considerado como una de las mentes más influyentes del siglo XX.	13
1.2.	Ilustración de la densidad de probabilidad de un estado extendido (azul) y un estado localizado (naranja).	15
1.3.	Representación de la densidad de estados $\rho(\varepsilon)$ como función de la energía ε para el modelo de Anderson en tres dimensiones cuando $(W/J) > (W/J)_c$.	16
1.4.	Esquema de la estructura de bandas en un conductor, un aislante de bandas y un aislante de Anderson. Los círculos azules denotan estados electrónicos ocupados mientras que los grises representan huecos o vacancias. La línea negra discontinua simboliza la energía de Fermi E_F .	17
1.5.	(a) Eigenestados en el modelo de Anderson unidimensional, el recuadro enfoca a dos energías propias alejadas del espectro. (b) densidad de probabilidad asociada a las eigenenergías (a) identificadas de acuerdo al color.	18
1.6.	(a) Eigenestados en el modelo de Anderson unidimensional, el recuadro enfoca a dos energías propias asociadas a eigenestados espacialmente adyacentes. (b) densidad de probabilidad de dos eigenestados alejados espacialmente cada uno se identifica con (a) de acuerdo al color.	18
1.7.	Caricatura de un simulador cuántico, alrededor se muestra los nombres de diferentes plataformas de simulación cuántica. Figura extraída de la referencia [9].	19
1.8.	Caricatura de un átomo de Rydberg, la esfera de color rojo sólido representa el núcleo atómico, el área sombreada de color rojo transparente ilustra la nube electrónica interna y la esfera externa de color azul es el electrón de Rydberg.	23
1.9.	(a) Condensado de Bose-Einstein en una trampa híbrida, que es la combinación de una guía de ondas horizontal que garantiza un fuerte confinamiento transversal y una trampa longitudinal magnética débil. (b) A $t = 0$ se apaga el confinamiento longitudinal y se activa el potencial tipo speckle, el cual produce el arresto de la difusión del BEC. (c-d) Perfil de densidad de un condensado localizado a $t = 1s$ en escala lineal y semi-logarítmica. El recuadro en (d) es el RMSD vs tiempo en presencia y ausencia de desorden. La figura fue extraída de la referencia [19]	25

1.10. Imágenes de absorción de la dinámica a lo largo de la red cuasiperiódica del condensado de Bose-Einstein para diferentes valores de la modulación cuasiperiódica (ver apéndice B). La difusión del BEC se ve suprimida para $\Delta/J > 2$. La figura fue extraída de la referencia [20].	26
1.11. (a) Esquema del dispositivo experimental usado en [75], un haz de prueba ingresa a una red desordenada en las direcciones transversales (y y x) pero invariante en la dirección de propagación (z). (b) Propagación transversal del haz en ausencia de desorden. (c) Ausencia de difusión transversal del pulso electromagnético en presencia de desorden. La figura fue extraída de la referencia [75].	27
1.12. (a) Configuración de onda de densidad inicial en donde los átomos ocupan únicamente los sitios pares. Figura extraída de la referencia [17]	28
1.13. (a) Un potencial desordenado controlado por un dispositivo de espejo digital se enfoca en una red óptica que confina átomos bosónicos. (b) Imágenes de fluorescencia que muestran la evolución del estado inicial en ausencia de desorden. La columna izquierda muestra imágenes individuales de la distribución atómica, la columna de la derecha corresponde a la densidad promediada sobre 50 realizaciones de desorden. (c) Igual que el panel (b) pero en presencia de desorden. La figura fue extraída de la referencia [18].	29
2.1. (a) Función de correlación de ϵ_i para el modelo de Anderson. (b) Función de correlación de ϵ_i para el modelo de Aubry-André. En ambos casos los resultados numéricos corresponden a $L = 144$ y un promedio sobre 20 realizaciones de desorden.	33
2.2. Valores de ϵ_i en escala de grises para el modelo de Anderson y el modelo de Aubry-André, se consideró una red de $L = 900$ sitios y una realización del potencial inhomogéneo para ambos modelos.	34
2.3. Histograma de los valores de ϵ_i en una red de tamaño $L = 987$, se consideró una realización del potencial inhomogéneo para ambos modelos.	34
2.4. (a) Red unidimensional con condiciones periódicas a la frontera. (b) Red unidimensional con condiciones rígidas a la frontera. En ambos casos los círculos rojos representan los sitios de la red.	35
2.5. Densidad de probabilidad de una partícula en el estado base del Hamiltoniano de Aubry-André versus el índice de sitio. La amplitud del cuasidesorden es $\Delta/J = 1$ (azul) y $\Delta/J = 3$ (naranja).	36
2.6. (a) Razón de participación inversa del estado de mínima energía del modelo de Aubry-André como función de Δ/J . (b) Derivada de IPR_0 como función Δ/J , el máximo se localiza en $\Delta_c/J = 2.01 \pm 0.005$. Los calculos corresponden a $L = 987$, $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ y $\phi = \pi/5$	37
2.7. Desorden crítico de la transición extendido localizado para diferentes tamaños de red. Los cálculos corresponden a $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ y $\phi = \pi/5$	38

2.8. Potencial en la red V_R normalizado a su valor máximo V_{max} como función de la posición para dos valores de la fase ϕ . Puede observarse como la profundidad en energía de los mínimos del potencial se altera cuando ϕ se modifica. Se fijó una magnitud de la cuasiperiodicidad de $\Delta/J = 1$	39
2.9. Densidad de probabilidad del estado base del modelo de Aubry-André para dos diferentes ángulos ϕ . Se fijó una magnitud de la cuasiperiodicidad de $\Delta/J = 2.5$ y un tamaño de red $L = 987$	40
2.10. Razón de participación inversa de todos los eigenestados del modelo de Aubry-André como función de Δ/J . El número de sitios de la red es $L = 987$. Se promedió sobre 20 realizaciones de la fase ϕ . La línea roja discontinua indica el desorden crítico de la transición extendido-localizado.	41
2.11. Densidad de probabilidad del estado de mínima energía del modelo de AA. El valor del cuasidesorden es $\Delta/J = 2.5$ mientras que la fase aleatoria se fijó a $\phi = \pi/17$. La línea discontinua de color negro muestra el decaimiento exponencial del perfil.	42
2.12. Longitud de localización ξ como función de Δ/J . La curva azul corresponde al resultado analítico en la Ec. (2.13) mientras la curva roja está asociada al cálculo numérico. La región de rojo claro que rodea a la curva numérica corresponde al error asociado a 20 realizaciones aleatorias de ϕ	43
2.13. Dimensión fractal D_2 como función de la magnitud de la modulación cuasiperiódica Δ/J . Se promedió sobre 20 realizaciones del desorden, el error asociado a las realizaciones es despreciable.	44
2.14. Espectro de energía del modelo de Aubry-André como función de β para dos diferentes magnitudes de la modulación cuasiperiódica. En el valor del cuasidesorden crítico $\Delta_c/J = 2$, el espectro da lugar a la muy popular mariposa de Hofstadter [97].	45
2.15. Raíz cuadrada del desplazamiento medio como función del tiempo para diferentes magnitudes del cuasidesorden. Las curvas mostradas son el resultado de promediar 20 fases aleatorias ϕ , la región sombreada alrededor de cada curva corresponde al error asociado a las diferentes realizaciones del cuasidesorden.	46
2.16. Valores del exponente γ de la dependencia en el tiempo del $\sigma \propto t^\gamma$ como función del cuasidesorden Δ/J	46
2.17. Probabilidad de detección como función del tiempo. El estado inicial corresponde a una partícula inicialmente localizada en el centro de la red. El tamaño del sistema es $L = 987$, al área sombreada alrededor de cada curva corresponde al error asociado a 20 realizaciones del ángulo ϕ	47
2.18. Valor asintótico de la probabilidad de detección como función de Δ/J . El tamaño del sistema es $L = 987$, se promedió sobre 20 realizaciones del ángulo ϕ	48
2.19. Evolución en el tiempo del desbalance para una red de tamaño $L = 1000$ y $\Delta/J = 4$	49
2.20. Valor asintótico del imbalance como función de Δ/J . El tamaño del sistema es $L = 1000$, se promedió sobre 20 realizaciones del ángulo ϕ	50

2.21. Razón de participación inversa del estado de mínima energía del Hamiltoniano en la Ec. (2.21) para $J_2/J = 0, 0.1$ y 0.2 . El tamaño del sistema es $L = 987$, las curvas corresponden al promedio de 20 realizaciones del ángulo ϕ	51
2.22. Desorden crítico de la transición extendido-localizado del estado de mínima energía del modelo de EAA como función de J_2/J . Se consideró $L = 987$ y 20 realizaciones de ϕ	51
2.23. Razón de participación inversa de todos los eigenvectores del modelo de EAA, la magnitud del tunelaje a segundos vecinos se fijó a $J_2/J = 0.1$ (a), $J_2/J = 0.2$ (b), $J_2/J = 0.3$ (c) y $J_2/J = 0.4$ (d). Se promedió sobre 20 realizaciones de la fase aleatoria ϕ	52
2.24. Probabilidad de detección asintótica en la región $(-L/4, L/4)$ como función de α y Δ/J . Se consideró un tamaño de red $L = 987$ y 100 realizaciones de la fase ϕ	53
2.25. Decaimiento algebraico del estado de mínima energía del modelo de GAA para diferentes potencias de tunelaje. Se consideró $L = 987$ y una magnitud de la modulación cuasiperiódica de $\Delta/J = 4$	54
3.1. Representación esquemática de la condición inicial. Las esferas de color rojo indican la presencia de partículas, mientras que las azules son sitios de la red. La lámpara representa el láser que induce las excitaciones.	57
3.2. Evolución temporal de la distribución de densidad $n_i(t)$ de dos caminantes inicialmente en sitios adyacentes en el centro de la red. Cuasiperiodicidad y potencia del tunelaje se indica en cada panel. La interacción entre partículas es $U/J = 8$	58
3.3. Espectro de energía del Hamiltoniano en Ec. (3.1) para $\Delta/J = 0$ y $U/J = 8$. Las figuras (a), (b) y (c) corresponden a una ley de potencia de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente.	59
3.4. Evolución temporal del valor de esperado del operador de proyección $\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$. Panel (a) corresponde a $\Delta/J = 0$ y $U/J = 8$ mientras que panel (b) considera $\Delta/J = 2$ y $U/J = 8$. Los valores de α se indican en colores.	60
3.5. Representación esquemática de la movilidad del dímero de acuerdo al Hamiltoniano efectivo de la Ec. (3.6).	62
3.6. Razón de participación inversa de los eigenestados pertenecientes a ambos, \hat{H} y \hat{H}_{eff} (inset) para $(\Delta/J, U/J) = (2, 8)$. Figuras (a), (b) y (c) corresponde a una ley de potencial de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente.	63
3.7. Función de correlación de dos partículas $\Gamma_{ij}(t)$ a un tiempo de $Jt/\hbar = 20$. El par de bosones de núcleo duro están inicialmente localizados en sitios adyacentes. El cuasidesorden y el valor de la ley de potencia del tunelaje se indican en cada panel. La interacción entre partículas es $U/J = 8$	64

3.8. Evolución temporal de la distribución de densidad de una partícula $n_i(t)$ de dos bosones de núcleo duro que inicialmente ocupaban sitios adyacentes en el centro de la red. El cuasidesorden y el valor de la ley de potencia del tunelaje se indican en cada panel. La interacción entre partículas para todos los paneles es de $U/J = 8$	65
3.9. Evolución temporal del valor esperado del operador $\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$. Panel (a) corresponde a $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$, mientras que el panel (b) considera $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$. El valor de la potencia del tunelaje es $\alpha = 3$ (rojo), $\alpha = 1$ (naranja) y $\alpha = 1/2$ (morado).	66
3.10. Espectro de energía del Hamiltoniano en la Ec. (3.1) para $U/J = 8$. Los valores del cuasidesorden y la ley de potencia del tunelaje se indica en cada panel.	67
3.11. Razón de participación inversa asociado con los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (2.1) para $U/J = 8$. El valor de la cuasiperiodicidad y la ley de potencia del tunelaje se indican en cada panel.	68
3.12. Función de correlación de dos cuerpos a $Jt\hbar = 20$ para una interacción entre partículas de $U/J = 8$. Cuasiperiodicidad y valor de la ley de potencia del tunelaje se indica en cada panel.	69
3.13. Probabilidad de supervivencia $f(t)$ para $U/J = 8$. Paneles (a), (b) y (c) corresponden a una ley de potencial del tunelaje de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente. Las magnitudes del cuasidesorden son $\Delta/J = 0$ (red), $\Delta/J = 2$ (café), $\Delta/J = 4$ (naranja) y $\Delta/J = 8$ (morado).	70
3.14. Valor asintótico de la probabilidad de supervivencia $F(t \rightarrow \infty)$ Ec. (3.12) como función de Δ/J y U/J . Paneles (a), (b) y (c) corresponden a un valor de la ley de potencia del tunelaje de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente.	71
3.15. Valor asintótico de la probabilidad de supervivencia $F(t \rightarrow \infty)$ como función de la ley de potencia del tunelaje α . El valor del cuasidesorden es $\Delta/J = 0$ (rojo), $\Delta/J = 4$ (naranja), $\Delta/J = 8$ (morado). Paneles (a) y (b) corresponden a una interacción de $U/J = 1$ y $U/J = 4$, respectivamente.	72
3.16. Valor asintótico de la probabilidad de supervivencia $F(t \rightarrow \infty)$ como función de la ley de potencia del tunelaje α . El valor del cuasidesorden es $\Delta/J = 0$ (rojo), $\Delta/J = 4$ (naranja), $\Delta/J = 8$ (morado). Paneles (a) y (b) corresponden a una interacción de $U/J = 6$ y $U/J = 8$, respectivamente.	73
3.17. Razón de participación inversa de todos los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (3.14) como función de la magnitud de la cuasiperiodicidad. Paneles (a), (b) y (c) corresponden a una potencia del tunelaje de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$. La línea roja discontinua corresponde al cuasidesorden crítico en la Ec. (3.15)	74
3.18. Promedio de la razón de participación inversa como función de el valor de la ley de potencia del tunelaje α y el cuasidesorden Δ/J . La línea roja discontinua corresponde al cuasidesorden crítico en la Ec. (3.15)	75

3.19. Elementos diagonales del perfil de dos cuerpos $\psi(j) = \Psi(j, j) $ como función del índice de la red j . Las funciones ψ_{att} y ψ_{rep} corresponden a pares atractivos y repulsivos, respectivamente. La magnitud de la modulación cuasiperiódica es $\Delta/J = 2$ para todos los paneles.	79
3.20. Razón de participación inversa en función de la potencia del tunelaje α y la magnitud de la modulación cuasiperiódica Δ/J para diferentes valores de la interacción. Los casos no interactuantes en los paneles (a) y (d) están asociados con los estados de dispersión de mínima y máxima energía, respectivamente. Los resultados corresponden a 30 realizaciones de la fase ϕ	80
3.21. Desorden crítico de la transición extendido-localizado del par como función de U/J para diferentes valores de la cuasiperiodicidad. Los resultados corresponden a 30 realizaciones de la fase ϕ	81
3.22. Desorden crítico de la transición extendido-localizado del par como función de la potencia de tunelaje α para diferentes magnitudes de la interacción. Los resultados corresponden a 30 realizaciones de la fase ϕ	82
3.23. Brecha de energía de las moléculas como función de la interacción U/J para diferentes valores de la potencia del tunelaje α . E_G^A y E_G^R están asociadas a las ramas atractivas y repulsivas. Paneles (a), (b), (c) y (d) corresponden a un valor de la cuasiperiodicidad de $\Delta/J = 0, 1, 2$ y 3 , respectivamente.	83
4.1. Representación esquemática de dos dominios ferromagnéticos con polarización opuesta $ \uparrow\rangle$ (amarillo) y $ \downarrow\rangle$ (verde) separados espacialmente.	86
4.2. Representación esquemática de una red óptica cuadrada cuando el desorden toma el valor: (a) $\delta = 0$, (b) $\delta = 0.01$ y (c) $\delta = 0.1$	87
4.3. Estados estacionarios obtenidos al resolver numéricamente las ecuaciones estacionarias de Gross-Pitaevskii (ver Ec. (4.4)). Los parámetros físicos utilizados se encuentran en la tabla (4.1). La función de onda se especifica en cada panel.	89
4.4. Magnetización local transversal $M_z = \phi_\uparrow ^2 - \phi_\downarrow ^2$ posterior al protocolo de eliminación de partículas. En letras blancas se indica la componente hiperfina que ocupa la región izquierda Ω_I o región derecha Ω_D del sistema en cuestión	90
4.5. Gráficos de la magnetización local instantánea $m(x, y; t)$ para tres valores diferentes de la amplitud del desorden δ y tres tiempos distintos. Las distancias a lo largo de los ejes y y x están escaladas en términos de la constante de red a . El cociente entre los acoplamientos de interacción es de $g_{\uparrow\uparrow}/g_{\uparrow\downarrow} = 0.9$	91
4.6. Magnetización en los lados derechos m_D e izquierdo m_I en función del tiempo para diferentes valores de amplitud del desorden δ . La razón de la interacción intra e interespecie $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ se indica en los panel izquierdos. Cada punto de las curvas es el resultado de promediar 200 realizaciones de desorden. El área sombreada alrededor de cada curva corresponde a la desviación estándar de las distintas realizaciones.	93
4.7. Ajuste de ley de potencia $m_R(\tau) \approx b(\delta)\tau^{\gamma(\delta)}$ para la magnetización derecha en función de δ , para tres valores diferentes de la relación de la interacción intra e interespecie. El recuadro muestra el error σ del ajuste.	94

4.8.	Función de correlación $G(\Delta\vec{r} = 0, t)$ como función del tiempo para diferentes valores de la amplitud del desorden δ y un cociente de interacción fijo $g_{\downarrow,\downarrow}/g_{\uparrow,\uparrow} = 0.9$. Cada curva es el resultado de promediar 200 realizaciones de desorden.	95
4.9.	Función de correlación $G(\Delta\vec{x}, \tau = 0)$ previo a iniciar la dinámica. El recuadro muestra el perfil de la magnetización inicial y el eje, en color rojo, a lo largo del cual se determinó la variación espacial del correlador.	95
4.10.	Función de correlación $G(\Delta\vec{x}, \tau)$ para $\tau = 180$ (panel superior) y $\tau = 360$ (panel inferior) como función de $\Delta\vec{x}$. El cociente de la interacción inter- e intraespecies se fijo al valor $g_{\downarrow,\downarrow}/g_{\uparrow,\uparrow} = 0.9$	96
A.1.	Esquema de un átomo (circulo azul) en presencia de dos láseres contrapropagantes (líneas rojas).	101
A.2.	Figura representativa de la fuerza en la Ec. (A.2) como función de la velocidad del átomo v	102
A.3.	Representación esquemática del enfriamiento evaporativo. (a) la trampa armónica tiene una profundidad inicial V_i . (b) se reduce la profundidad de la trampa dejando escapar a los átomos.	102
A.4.	(a) Potencial silla de montar creado por un campo eléctrico estable, este confina a una partícula cargada en una dirección pero deconfina en las dos ortogonales. (b) Potencial efectivo en el tiempo cuando el potencial de silla de montar en (a) oscila con una frecuencia ω más grande que el inverso del tiempo característico del movimiento de la partícula cargada. Figura extrada de [44].	106
A.5.	(a) Configuración óptica de cómo se genera un potencial desordenado mediante la técnica de speckle. (b) Representación en dos dimensiones de un potencial speckle o desordenado. Figura extraida de [170].	107
A.6.	Potenciales asociados al singlete V_s y el triplete V_T en ausencia y presencia de campo magnético.	108
C.1.	Representación esquemática de un condensado de Bose-Einstein cuando: (a) la tripleta de frecuencias son iguales y (b) cuando la frecuencia transversal es mucho más grande que las frecuencias en el plano.	115
C.2.	Adivinanza de la matriz $\Psi_{i,j}^0$ utilizada para la propagación en tiempo imaginario.	119

Agradecimientos

Quiero agradecer a mis padres María Herlinda y René Bladimir como también a mi hermano René Rodrigo por su apoyo y amor incondicionable durante mi formación académica. Ustedes son la razón por la cual hoy concluyo mis estudios de doctorado, estoy eternamente agradecido con ustedes, los amo. Agradecimientos especiales a Dianita por haberme brindado su compañía y cariño en la etapa final de mi doctorado.

Agradezco a mi tutora principal, la Dra. Rosario Paredes Gutiérrez por su gran compromiso con mi formación académica y por su siempre presente calidez humana. Estoy en gran deuda contigo por todos estos años de gran aprendizaje. Gracias totales por ser una maravillosa persona y tutora.

Estoy agradecido con el Dr. Víctor Romero Rochín por transmitirme el entusiasmo por la ciencia desde mis estudios de licenciatura. Sin duda alguna toda la experiencia y conocimiento que imprimes en las charlas o pláticas nutrieron mi manera de pensar.

Doy las gracias al Dr. Arturo Camacho Guardian por ser un gran mentor y amigo. Agradezco todo tu apoyo desde la licenciatura hasta el doctorado, admiro tu gran carrera académica y te deseo continúes sorprendiéndonos con tus investigaciones.

Agradezco al Dr. Roberto Zamora Zamora por compartirme con toda la paciencia y claridad del mundo sus conocimientos en los métodos numéricos en GPU.

Estoy agradecido por el constante apoyo que recibí de mi comité tutor, la Dra. Rocío Jáuregui Renaud y al Dr. Alejandro Reyes Coronado.

Doy las gracias a todos mis compañeros del posgrado Rodolfo, Juan Carlos, Manuel, León, Gabriel, Yadira, Brenda, Cristian, Gustavo, Luis, Eleazar, gracias por compartir múltiples charlas de ciencia y entretenimiento. Sin duda alguna su amistad es algo por lo que me siento en gratitud con ustedes.

Agradezco el apoyo otorgado por el consejo nacional de ciencia y tecnología (CONACYT) por el programa de becas nacionales del cual me beneficié para realizar mis estudios de maestría y doctorado. De igual forma, quiero agradecer a los proyectos IN107014, IN105217,

IN108620 DGAPA UNAM por el soporte para el desarrollo de investigación y para asistir a eventos de ciencia dentro y fuera del país. Por último agradezco al programa de apoyo a los estudios de posgrado (PAEP) por la ayuda recibida para comprar equipo de cómputo el cual fue crucial para mi trabajo de doctorado.

Agradezco a todo el personal del Instituto de Física de la UNAM por su gran compromiso en sus labores.

Abstract

Since the discovery of the quantum localization phenomenon due to disorder by P. W. Anderson, the study of disordered systems has become a very active field of research in condensed matter physics. The understanding of the effects of disorder is of paramount importance for the description of several phenomena, for instance, quantum transport, the existence of spin glasses and topological phases, the presence of quantum chaos in both few- or many-body systems, and the peculiar behavior of certain thermodynamic properties among others. More than 60 years have passed since the discovery of quantum localization and although much progress has been made, yet, there are open questions and phenomena not fully understood. In fact, these phenomena date back to the birth of localization, and until now are the subject of research and intense debate. A main example of these topics, which in part motivated the investigation of this thesis, is the understanding of the effects of both, interparticle interactions and medium interactions in the localization properties. In particular, in this thesis two main subjects are addressed. The first is related to the study of the effects of a quasiperiodic medium with power-law hopping on the quantum transport of pairs, while the second is associated with the persistence of magnetic order in a weakly interacting Bose mixture confined in a disordered lattice. For the first problem, the exact diagonalization method was used in order to determine the propagation of two initially localized hard core bosons. The main result of this analysis was the discovery of a delocalization transition stimulated by quasiperiodicity. This result is in stark contrast with the general notion of previous works, where quasiperiodicity always tends to inhibit transport. The time independent analysis of a pair of bosons in a quasiperiodic lattice with power-law tunneling exhibited the asymmetric effect of attractive and repulsive interactions on the localization transition. In particular, the numerical calculations showed that repulsively interacting pairs are more likely to localize than pairs bounded by attractive interactions. This result highlights the importance of the sign of the interactions in the pair localization transition, something that is not discernible in quasicrystals with short-range hops. The second and last problem was addressed using the mean field approximation, specifically, both the time independent and time dependent Gross-Pitaevskii equations. Through the numerical solution of these equations, the persistence in time of a double ferromagnetic domain was tracked. The results of this investigation characterized how the disorder and the interactions between particles contribute to the persistence of the magnetic order. The investigation developed of this thesis shows that the joint effect between interactions and disorder or quasiperiodicity in the transport properties of quantum systems is highly energy dependent. When the interactions

are weak and the dominant energy scale is kinetic, disorder and quasiperiodicity tend to suppress the diffusion of the system under consideration. However, as the interaction between particles becomes the dominant scale, the formation of bound states together with the tunneling properties of the medium can give rise to clearly counterintuitive transport regimes. The results shown are of interest for various quantum simulation platforms, for instance, ultracold atoms, polar molecules, Rydberg atoms, and trapped ions. Like all research work, the findings give rise to new and ambitious questions. In particular, to deepen the study of the effects of bound state formation in the quantum transport of disordered systems with few bodies, trimer formation, collision of pairs with individual particles in quasicrystals, among others.

Resumen

Desde el descubrimiento del fenómeno de localización cuántica debido al desorden por P. W. Anderson, el estudio de los sistemas desordenados se ha convertido en un campo de investigación muy activo en la física de la materia condensada. La comprensión de los efectos del desorden es de suma importancia para la descripción de varios fenómenos, por ejemplo, el transporte cuántico, la existencia de los vidrios de espín y las fases topológicas, la presencia de caos cuántico en sistemas de pocos o muchos cuerpos, y el comportamiento peculiar de ciertas propiedades termodinámicas, entre otros. Han pasado más de 60 años desde el descubrimiento de la localización cuántica y aunque mucho se ha avanzado, existen tópicos que datan desde el nacimiento de este fenómeno que, sin embargo, continúan siendo objeto de investigación y debate. Un ejemplo de estos tópicos, el cual en parte motivó la investigación de esta tesis, es el efecto de las interacciones, tanto entre partículas como entre el medio, en las propiedades de localización. En particular, en esta tesis se presenta dos temas principales. El primero concierne al estudio de los efectos de un medio cuasiperiódico con tunelaje de ley de potencia en el transporte cuántico de pares, mientras que el segundo, está asociado a la persistencia de orden magnético en una mezcla de Bose débilmente interactuante confinada en una red óptica desordenada. Para el primer problema, se empleó el método de diagonalización exacta con el propósito de determinar la propagación de dos bosones de núcleo duro inicialmente localizados. El principal hallazgo de este trabajo fue encontrar una transición de delocalización estimulada por la cuasiperiodicidad, este resultado contrasta con la noción general de la gran mayoría de trabajos previos, en donde la cuasiperiodicidad siempre tiende a inhibir el transporte. El análisis estacionario de un par de bosones en una red cuasiperiódica con tunelaje de ley de potencia, exhibió el efecto asimétrico de las interacciones atractivas y repulsivas en la transición de localización. En particular, los cálculos numéricos mostraron que los pares que interactúan repulsivamente son más proclives a localizarse que los pares ligados por una interacción atractiva. Este resultado pone de manifiesto la importancia del signo de las interacciones en la localización de pares, algo que no es discernible en cuasicristales con tunelaje de corto alcance. El segundo y último problema fue abordado usando la aproximación de campo medio, específicamente, las ecuaciones tanto estacionaria como dinámica de Gross-Pitaevskii. Mediante la solución numérica de estas ecuaciones se monitoreó la persistencia en el tiempo de un doble dominio ferromagnético. Los resultados de esta investigación caracterizan como el desorden y las interacciones entre partículas coadyuvan en la perduración del orden magnético. Ambos trabajos de esta tesis ponen de manifiesto que, el efecto en conjunto entre las interacciones y el desorden o la cuasiperiodicidad en las

propiedades de transporte de sistemas cuánticos es altamente dependiente de la energía del sistema. Cuando las interacciones son débiles y la escala dominante de energía es la cinética, el desorden y la cuasiperiodicidad tienden a suprimir la difusión del sistema en cuestión. Sin embargo, a medida que la interacción entre partículas se convierte en la escala dominante, la formación de estados ligados junto con las propiedades del medio pueden dar lugar a regímenes de transporte claramente contraintuitivos. Los resultados mostrados son de interés para diversas plataformas de simulación cuántica, por ejemplo, los átomos ultrafríos, moléculas polares, átomos de Rydberg y los iones atrapados. Como todo trabajo de investigación, los hallazgos dan lugar a nuevas y ambiciosas cuestiones. En particular, profundizar el estudio de los efectos de estados ligados en el transporte cuántico de sistemas desordenados con pocos cuerpos, formación de trímeros, colisión de pares con partículas individuales en cuasicristales, entre otros.

Lista de publicaciones

Artículos publicados

- **G. A. Domínguez-Castro** and R. Paredes, P-wave superfluid phases of Fermi molecules in a bilayer lattice array, *Annalen der Physik*, 531 (2), 1800316 (2019).
- **G. A. Domínguez-Castro** and R. Paredes, The Aubry-André model as a hobbyhorse for understanding the localization phenomenon, *European Journal of Physics* 40 (4), 045403 (2019).
- R. Zamora-Zamora, **G. A. Domínguez-Castro**, C. Trallero-Giner, R. Paredes, and V. Romero-Rochín, Validity of Gross-Pitaevskii solutions of harmonically confined BEC gases in reduced dimensions, *Journal of Physics Communications* 4 (8), 085003 (2019).
- C. Madroñero, **G. A. Domínguez-Castro**, L. A. González-García and R. Paredes, Persistence of ferromagnetic domains in a disordered two-dimensional lattice, *Physical Review A* 102 (3), 033304 (2020).
- **G. A. Domínguez-Castro** and R. Paredes, Unconventional superfluidity in ultracold dipolar gases, *Journal of Physics: Conference series* 1540 (1), 012002 (2020).
- **G. A. Domínguez-Castro** and R. Paredes, Enhanced transport of two interacting quantum walkers in a one-dimensional quasicrystal with power-law hopping, *Physical Review A* 104 (3), 033306 (2021).

Artículos por publicarse

- **G. A. Domínguez-Castro** and R. Paredes, Localization of pairs in one-dimensional quasicrystals with power-law hopping (En refereo).
- **G. A. Domínguez-Castro** and R. Paredes, Artificial neural network for the single-particle localization problem in quasiperiodic one-dimensional lattices (En refereo).
- C. Madroñero, **G. A. Domínguez-Castro**, and R. Paredes, Weakly interacting bosons in Moire lattices (En preparación).

Los artículos publicados pueden encontrarse al final de este documento.

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo, se presenta de forma condensada los conceptos y fundamentos teóricos del fenómeno de localización de Anderson. En particular, se hace especial énfasis en la manifestación de la localización como consecuencia de la naturaleza ondulatoria de las partículas y el desorden espacial. Enseguida, se exhibe los principales resultados y característica de la transición metal-aislante de Anderson. En vista de que los sistemas físicos analizados en los siguientes capítulos están inspirados en las plataformas de simulación cuántica, posterior a discutir la localización de Anderson, se presenta de forma concisa las nociones esenciales de los simuladores cuánticos. A continuación se proporciona una descripción general de las observaciones experimentales asociadas al fenómeno de localización en diferentes plataformas de simulación cuántica.

1.1. Antecedentes

Uno de los primeros problemas que abordó la comunidad científica, posterior al establecimiento de la mecánica cuántica, fue el transporte electrónico en los sólidos [1]. En particular, la dinámica de electrones en sólidos reales, es decir, en presencia de desorden o impurezas. Con el objetivo de conocer todas las propiedades de un material sólido, el formalismo de la mecánica cuántica prescribe en calcular todos los eigenvalores y eigenvectores del Hamiltoniano que describe al material en cuestión. En términos simples, el Hamiltoniano fundamental \hat{H} de un sólido se compone de la suma de tres Hamiltonianos H_e , H_n y H_{e-n} . El primero de ellos integra únicamente los grados de libertad de los electrones que componen al sólido, H_n involucra los grados de libertad de los núcleos atómicos y por último H_{e-n} contiene la interacción Coulombiana entre los electrones y los núcleos atómicos. Cada uno de estos

tres elementos está dado de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{H}_e + \hat{H}_n + \hat{H}_{e-n}, \\
\hat{H}_e &= - \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j \neq i}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \\
\hat{H}_n &= - \sum_{i=1}^{N_n} \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j \neq i}^{N_n} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}, \\
\hat{H}_{e-n} &= - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|},
\end{aligned} \tag{1.1}$$

donde m y e son la masa y carga eléctrica de los electrones, M y Ze^2 son la masa y carga eléctrica de los núcleos atómicos, r_i y R_j denotan la posición del i -ésimo electrón y el j -ésimo núcleo, respectivamente. El número de electrones y de núcleos son indicados por N_e y N_n , respectivamente. Desafortunadamente, el cálculo de todos los eigenvectores y eigenvalores del Hamiltoniano en la Ec. (1.1) es, hasta hoy en día, imposible debido a la alta complejidad de la ecuación de Schrödinger resultante. Por lo tanto, no hay más opción que hacer algunas aproximaciones para poder comprender las propiedades de transporte en los sólidos. Debido a que los electrones y los núcleos están acoplados, la separación de los movimientos electrónicos y nucleares sería de gran ayuda para entender el transporte electrónico. Este desacoplamiento es proporcionado por la aproximación de Born-Oppenheimer o también conocida como aproximación adiabática [2]. Los electrones son mucho más ligeros que los núcleos atómicos, $m \sim 10^{-3}M$, en consecuencia, los electrones en un sólido se mueven mucho más rápido que los núcleos, por consiguiente, cuando la configuración de los núcleos cambia, los electrones pueden responder a este cambio casi instantáneamente y, por lo tanto, permanecer esencialmente en el estado base electrónico con respecto a la nueva configuración nuclear. Es decir, la dinámica electrónica ocurre a escalas de tiempo mucho más pequeñas en comparación a la de los núcleos atómicos. Esta discrepancia en las escalas de tiempo características de la dinámica electrónica y nuclear motivan a suponer que los núcleos permanecen esencialmente en sus posiciones estacionarias cuando ocurre la dinámica de los electrones. A esta suposición se le conoce como aproximación de Born-Oppenheimer, la cual se describe a continuación. Sea $r = \{\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_{N_e}\}$ y $R = \{\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_{N_n}\}$ la coordenada colectiva de los N_e electrones y los N_n núcleos atómicos, respectivamente. El desacoplamiento del movimiento electrónico y nuclear de la aproximación adiabática se traduce en que la función de onda del sólido $\Psi(r, R)$ es el producto de la función de onda de los núcleos $\phi(R)$ y de los electrones $\psi(r; R)$, es decir, $\Psi(r, R) = \psi(r; R)\phi(R)$. Nótese que la función de onda electrónica $\psi(r; R)$ depende de las posiciones de los núcleos de forma paramétrica. Dado que $\Psi(r, R)$ es la función de onda del sólido, satisface la ecuación estacionaria de Schrödinger:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\Psi(r, R) &= E\Psi(r, R), \\
(\hat{H}_e + \hat{H}_n + \hat{H}_{e-n})\psi(r; R)\phi(R) &= E\psi(r; R)\phi(R),
\end{aligned} \tag{1.2}$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano en la Ec. (1.1). La expresión anterior se puede reorganizar de la siguiente forma:

$$\frac{1}{\psi(r; R)}[\hat{H}_e + \hat{H}_{e-n}]\psi(r; R) = \frac{1}{\phi(R)}[E - \hat{H}_n]\phi(R). \quad (1.3)$$

Dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer se considera que los núcleos atómicos permanecen en sus posiciones estacionarias, por lo tanto, se puede separar la Ec. (1.3) obteniéndose la siguiente ecuación de Schrödinger para los electrones:

$$[\hat{H}_e + \hat{H}_{e-n}]\psi(r; R) = \mathcal{E}(R)\psi(r; R), \quad (1.4)$$

donde $\mathcal{E}(R)$ es la eigenenergía de los electrones cuando los núcleos atómicos se encuentran en la configuración R . Al insertar la Ec. (1.4) en la Ec. (1.3) se obtiene lo siguiente:

$$[\hat{H}_n + \mathcal{E}(R)]\phi(R) = E\phi(R). \quad (1.5)$$

Por lo tanto, el movimiento de los núcleos y los electrones se ha separado. Este es un paso crucial ya que ahora se ha simplificado el problema de resolver la ecuación de Schrödinger del sólido, en la cual los grados de libertad de los electrones y núcleos están acoplados, en dos ecuaciones de Schrödinger desacopladas. Aún después de la aproximación adiabática, resolver el problema electrónico de la Ec. (1.4) continúa siendo impracticable. Por este motivo, se introduce la aproximación de electrón libre [1], en la cual se descarta la interacción electrón-electrón, en este escenario la Ec. (1.4) se reduce a la siguiente expresión:

$$\sum_{i=1}^{N_e} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^{N_n} \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} \right] \psi(r) = \mathcal{E}\psi(r), \quad (1.6)$$

donde se ha omitido la dependencia paramétrica de la función de onda. La Ec. (1.6) corresponde a N_e problemas de un sólo cuerpo, en estas circunstancias, únicamente es necesario resolver el problema de un electrón:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{j=1}^{N_n} U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \right] \psi(r) = E\psi(r), \quad (1.7)$$

siendo $\psi_1(\mathbf{r})$ la función de onda de un electrón, $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ el potencial de interacción electrón-ion y E la energía de una partícula, la cual obedece la relación $\mathcal{E} = N_e E$. Con el objetivo de estudiar el transporte de los electrones en un sólido dentro de la aproximación adiabática y de electrón libre, se procederá a estudiar la Ec. (1.7), por simplicidad se omitirá los subíndices n y e . Una manera de buscar soluciones aproximadas al Hamiltoniano en la Ec. (1.7) es haciendo uso del esquema de amarre fuerte [1], en el cual la función de onda de una sola partícula se expresa en términos de los orbitales alrededor de cada centro dispersor, los cuales por el momento se han considerado como iones o núcleos del medio. La ecuación estacionaria de Schrödinger de una partícula aledaña a un centro dispersor es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) + \Delta U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

donde $\Delta U(\mathbf{r})$ denota la corrección al potencial del centro dispersor situado en \mathbf{R}_j debido a la presencia de los $N - 1$ restantes. La función de onda $\psi(\mathbf{r})$ puede desarrollarse como:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell} a_{k,\ell} \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k), \quad (1.9)$$

siendo ϕ_{ℓ} los orbitales que obedecen la siguiente ecuación:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) \right] \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) = \varepsilon_{k,\ell} \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k), \quad (1.10)$$

al sustituir la expansión en la Ec. (1.9) en Ec. (1.8) se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^N \sum_{\ell} [\varepsilon_{k,\ell} a_{k,\ell} \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) + \Delta U(\mathbf{r}) a_{k,\ell} \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k)] = \\ & E \sum_{k=1}^N \sum_{\ell} a_{k,\ell} \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k), \end{aligned} \quad (1.11)$$

multiplicando por la derecha la ecuación anterior por el factor $\phi_{\nu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ e integrando en el espacio de coordenadas se obtiene lo siguiente:

$$\varepsilon_{j,\nu} a_{j,\nu} + \sum_{k=1}^N \sum_{\ell} \int \phi_{\nu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \Delta U(\mathbf{r}) a_{k,\ell} \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) = E a_{j,\nu}, \quad (1.12)$$

donde se ha hecho uso de la ortogonalidad de los orbitales:

$$\int d\mathbf{r} \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}) \phi_{\ell}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu\ell} \quad (1.13)$$

y se ha despreciado las integrales con la forma:

$$\int d\mathbf{r} \phi_{\nu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k), \quad (1.14)$$

con $k \neq j$, es decir, aquellas integrales que involucran orbitales centrados en diferentes posiciones. Esta aproximación subyace en la suposición de que cada orbital está fuertemente localizado alrededor de su respectivo centro dispersor y por ende el traslape entre orbitales centrados en diferentes centros dispersores es diminuto. Haciendo la definición:

$$J_{jk\ell\nu} = - \int d\mathbf{r} \phi_{\nu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \Delta U(\mathbf{r}) \phi_{\ell}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k), \quad (1.15)$$

se consigue reescribir la Ec. (1.12) de la siguiente manera:

$$\varepsilon_{j,\nu} a_{j,\nu} - \sum_{k=1}^N \sum_{\ell} J_{jk\ell\nu} a_{k,\ell} = E a_{j,\nu}. \quad (1.16)$$

Bajo la suposición de que solamente el primer orbital de cada centro dispersor es ocupado, la Ec. (1.16) toma la forma simplificada:

$$\varepsilon_j a_j - \sum_{k=1}^N J_{jk} a_k = E a_j. \quad (1.17)$$

Por último, en la aproximación de amarre fuerte, los coeficientes J_{jk} decaen exponencialmente con la distancia que existe entre los centros dispersiones. Por ende, la suma en la Ec. (1.17) se restringe a los primeros vecinos del centro dispersor situado en \mathbf{R}_j . Al recopilar todas las aproximaciones realizadas, se obtiene el Hamiltoniano que es de interés para los próximos capítulos:

$$\hat{H} = \sum_j \varepsilon_j |j\rangle\langle j| + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad (1.18)$$

donde $\langle i, j \rangle$ indica suma restringida a los primeros vecinos de un centro dispersor.

1.2. Modelo de Anderson

En 1958 P. W. Anderson (ver Fig. (1.1)) estaba inicialmente interesado en entender el transporte electrónico en medios con impurezas [3], un problema cuya característica principal es la presencia de aleatoriedad. Por ejemplo, espaciamientos aleatorios entre impurezas, interacciones aleatorias con el entorno de otras impurezas, energía por sitio aleatorias, entre otros. Para este propósito, Anderson estableció el modelo más simple que describe los efectos de un medio aleatorio o desordenado en la difusión de partículas no interactuantes. Debido a su importancia en la física de la materia condensada, este modelo se le conoce como modelo de Anderson y es descrito por el Hamiltoniano de Anderson:

$$\hat{H}_{AL} = -J \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} |\mathbf{i}\rangle\langle \mathbf{j}| + \sum_{\mathbf{i}} \varepsilon_{\mathbf{i}} |\mathbf{i}\rangle\langle \mathbf{i}|, \quad (1.19)$$

donde J es la amplitud de tunelaje a primeros vecinos, $\varepsilon_{\mathbf{i}}$ una energía por sitio y $|\mathbf{i}\rangle$ es el ket que corresponde al estado donde la partícula está localizada en el sitio \mathbf{i} . En comparación con el Hamiltoniano de la Ec. (1.18), el modelo de Anderson toma en cuenta que la amplitud de tunelaje es idéntica para cada centro dispersor. Cuando $\varepsilon_{\mathbf{i}}$ toma el mismo valor en cada sitio de la red, el Hamiltoniano en la Ec. (1.19) corresponde a un cristal perfecto. En este caso el teorema de Bloch [1] es válido y las eigenfunciones son ondas planas:

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} |\mathbf{j}\rangle, \quad (1.20)$$

las cuales están etiquetadas por el momento de cristal \mathbf{k} y se extienden en toda la red de L sitios. Por ende, los estados en la Ec. (1.20) representan a la fase metálica o conductora. El desorden en la red es introducido al hacer que las energías $\varepsilon_{\mathbf{i}}$ tomen valores aleatorios de sitio

a sitio, este caso es usualmente conocido como desorden diagonal [4]. De manera específica, Anderson consideró a las energías $\{\epsilon_i\}$ como un conjunto de variables aleatorias extraídas de una distribución de probabilidad ρ homogénea sobre el rango $-W/2 < \epsilon_i < W/2$, es decir:

$$\rho(\epsilon_i) = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon_i \in [-W/2, W/2], \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (1.21)$$

donde W es la magnitud del desorden. Debido a la forma en la cual se distribuyen los valores ϵ_i , se cumple lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_i \rangle &= 0 \\ \langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle &= \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ denota el promedio sobre diferentes realizaciones aleatorias de los valores de ϵ_i . Las expresiones anteriores indican que el promedio sobre diferentes realizaciones de las energías por sitio es nulo y además, que de sitio a sitio los valores de ϵ_i no están correlacionados. La física que describe el Hamiltoniano en la Ec. (1.19) está determinada por la cantidad adimensional W/J , este parámetro corresponde a la magnitud del desorden con respecto al tunelaje o movilidad en la red. Como a continuación se describirá, W/J sintoniza la naturaleza espacial de las eigenfunciones del Hamiltoniano en la Ec. (1.19).



Figura 1.1: Philip Warren Anderson (1923-2020) físico de origen estadounidense, galardonado con el premio Nobel en 1977 por sus contribuciones en la teoría de localización, antiferromagnetismo y el rompimiento espontáneo de la simetría. Anderson es considerado como una de las mentes más influyentes del siglo XX.

1.2.1. Orden vs desorden

Previo a continuar con el modelo de Anderson, es importante aclarar a que se refiere los conceptos de red ordenada y desordenada en este trabajo de tesis. Una red ordenada se entiende como un arreglo de unidades periódicamente distribuidos en el espacio. Es decir, un

conjunto de puntos discretos cuya disposición y orientación se ve exactamente igual desde donde se vea. Este último enunciado implica que todas las unidades de la red son idénticas entre sí. Las unidades pueden ser átomos simples, grupos de átomos, iones, trampas ópticas, entre otros. Un ejemplo de red ordenada es la configuración de las unidades de un sólido cristalino. Por otro lado, se entiende como red desordenada a una con las siguientes dos características: la primera corresponde a que la simetría de equivalencia entre sitios se rompe, ya sea por que su disposición espacial dejó de ser periódica o por que alguna propiedad de las unidades cambió de una a otra. La segunda característica se refiere al modo o mecanismo que rompió la equivalencia entre unidades. Se considera una red desordenada cuando este mecanismo es de tipo aleatorio, es decir no guarda una correlación entre las diferentes unidades.

1.2.2. Localización de Anderson

Los resultados de Anderson [3] concluyen que para dimensiones espaciales $d = 1$ o 2 y una magnitud W/J distinta de cero pero arbitraria, se tiene que todos los eigenestados del Hamiltoniano de la Ec. (1.19), están exponencialmente localizados. En consecuencia, la difusión electrónica en la red se inhibe por completo. Para el caso $d = 3$ los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (1.19) son extendidos hasta que la magnitud del desorden W/J supera cierto valor llamado desorden crítico $(W/J)_c$, donde la localización de los eigenestados ubicados en el centro del espectro de energía emerge. A los materiales cuya conducción eléctrica se suprime por el efecto del desorden se les conoce como aislantes de Anderson [4]. Por consiguiente, se dice que el Hamiltoniano en la Ec. (1.19) exhibe la transición metal-aislante de Anderson.

1.2.3. Localización espacial

La función de onda que representa un estado cuántico localizado está concentrada en una región del espacio alrededor de algún sitio de la red en cuestión. Formalmente se dice que un estado cuántico normalizado $|\psi\rangle$ está localizado si dada una $c < 1$, existe un sitio en la red con índice j y una longitud $l < \infty$, tal que se cumple la siguiente desigualdad:

$$\sum_{i=j-l}^{j+l} |\langle \psi | i \rangle|^2 > c, \quad (1.23)$$

donde $|i\rangle$ representa al estado en el cual la partícula está localizada en el sitio i . Si un estado cuántico no satisface la Ec. (1.23) se dice que es extendido. En la Fig. (1.2) se muestra una ilustración de la densidad de probabilidad perteneciente a un estado extendido (azul) y un estado localizado (naranja). Como puede notarse, un estado extendido cubre o se extiende en todos los sitios de la red, mientras que un estado localizado se concentra en una vecindad alrededor de un sitio de la red.

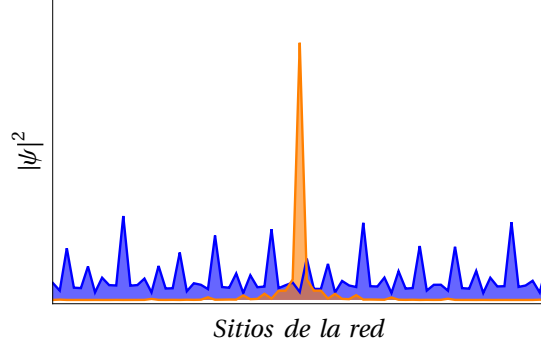


Figura 1.2: Ilustración de la densidad de probabilidad de un estado extendido (azul) y un estado localizado (naranja).

En la fase aislante de Anderson, la localización espacial de los eigenestados es exponencial. Esto significa que la envolvente a distancias grandes del eigenestado decae exponencialmente con respecto al sitio j_0 , donde se localiza, es decir, $\psi \sim e^{-|x-j_0|/\xi}$, para $|x - j_0| \gg 1$, donde ξ se le conoce como longitud de localización. En la vecindad de la transición Aislante de Anderson, esta cantidad se comporta como:

$$\xi \propto [(W/J) - (W/J)_c]^{-\nu} \quad (1.24)$$

con ν el exponente crítico asociado a la longitud de localización. Como es razonable, ν depende de la dimensionalidad del sistema, trabajos numéricos [5, 6] estiman que en el caso tridimensional se tiene $\nu \approx 1.58$. Aún cuando el criterio en la Ec. (1.23) es intuitivo, presenta múltiples inconvenientes. El principal de ellos está asociado a la evaluación de l para cada valor de c , esto representa una tarea compleja tanto numéricamente como experimentalmente. Una alternativa es hallar otra cantidad que de cuenta de la naturaleza espacial de los eigenestados. La razón de participación inversa, también conocido como IPR por su nombre en inglés, ofrece la posibilidad de discernir entre un estado localizado y uno extendido. Matemáticamente, el IPR se define como:

$$\text{IPR} = \frac{\sum_i |\langle \psi | i \rangle|^4}{\sum_i |\langle \psi | i \rangle|^2}, \quad (1.25)$$

esta cantidad toma valores nulos para un estado extendido mientras que es finito para estados localizados. En esta tesis se utilizó de manera extensiva la razón de participación inversa para distinguir la naturaleza espacial de los estados.

1.2.4. Bordes de movilidad

Como se había mencionado previamente, el modelo de Anderson en tres dimensiones exhibe estados localizados a partir de una magnitud del desorden $(W/J)_c$. En contraste con los casos unidimensionales y bidimensionales, en donde todos los eigenestados son localizados o extendidos, en tres dimensiones existe coexistencia entre estados extendidos y localizados

en un mismo espectro de eigenfunciones. Sin embargo, los estados se agrupan de acuerdo a su naturaleza espacial, el valor de la energía que separa los estados extendidos de los localizados se le conoce como borde de movilidad [4]. En la Fig. (1.3) se muestra una caricatura de la densidad de estados como función de la energía del modelo tridimensional de Anderson para $(W/J) > (W/J)_c$. En esta representación esquemática de $\rho(\varepsilon)$ existe dos bordes de movilidad que separan los estados extendidos, ubicados en el centro energía, de los estados localizados situados a los extremos de la banda.

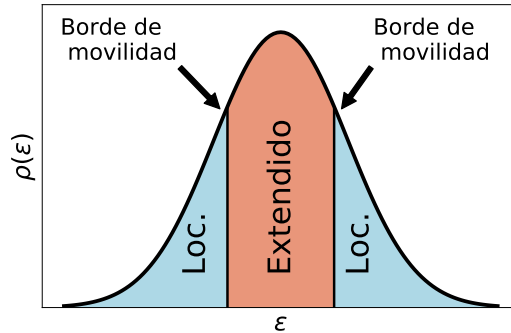


Figura 1.3: Representación de la densidad de estados $\rho(\varepsilon)$ como función de la energía ε para el modelo de Anderson en tres dimensiones cuando $(W/J) > (W/J)_c$.

1.2.5. Conductores, aislante de bandas y aislante de Anderson

La supresión del transporte de las partículas en un medio desordenado trae como consecuencia que el material se comporte como un aislante, el cual formalmente se le denota como aislante de Anderson para distinguirlo de un aislante de bandas o un aislante de Mott. Debido a que un aislante de Mott emerge como consecuencia de la fracción de llenado de partículas en la red y las interacciones, solamente se discutirá las diferencias entre un aislante de Anderson y un aislante de bandas, los cuales son fenómenos que se manifiestan en ausencia de interacciones. Para enriquecer la exposición, es instructivo comentar brevemente los conceptos de conductor y aislante de bandas. Un metal o conductor tiene la característica de tener una conductividad σ distinta de cero a temperatura nula. En contraste, un aislante de bandas tiene una conductividad nula a la misma temperatura, es decir:

$$\sigma(T = 0) = \begin{cases} 0 & \text{Aislante} \\ > 0 & \text{Conductor.} \end{cases} \quad (1.26)$$

De acuerdo a la relación de Einstein para la conductividad [7]:

$$\sigma = e^2 \frac{dn}{d\mu} D, \quad (1.27)$$

donde D es la constante de difusión y $\frac{dn}{d\mu}$ es la densidad de estados por unidad de volumen al nivel de Fermi, un aislante $\sigma = 0$ requiere $\frac{dn}{d\mu} = 0$ o $D = 0$. Como puede verse en la Fig. (1.4-b), en un aislante de bandas la energía de Fermi E_F yace entre la banda de valencia y la banda de conducción, dentro de esta brecha de energía se tiene $\frac{dn}{d\mu} = 0$. En contraste, en un metal Fig. (1.4-a), la energía de Fermi E_F se ubica dentro de la banda de valencia, lo que trae como consecuencia que esté parcialmente llena $\frac{dn}{d\mu} \neq 0$ y por ende, que cualquier estímulo eléctrico resulte en una corriente eléctrica. Sorprendentemente, en un aislante de Anderson Fig. (1.4-c) la energía de Fermi yace dentro de la banda de valencia, al igual que en un conductor, por ende $\frac{dn}{d\mu} \neq 0$. Sin embargo, como el transporte está suprimido se tiene $\sigma = 0$, lo cual debe implicar que $D = 0$.

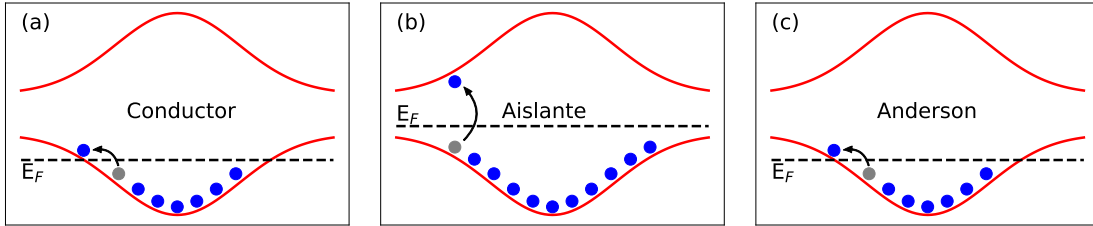


Figura 1.4: Esquema de la estructura de bandas en un conductor, un aislante de bandas y un aislante de Anderson. Los círculos azules denotan estados electrónicos ocupados mientras que los grises representan huecos o vacancias. La línea negra discontinua simboliza la energía de Fermi E_F .

En otras palabras, en un aislante de bandas la densidad de estados es nula mientras que en un aislante de Anderson es la constante de difusión la que se vuelve cero [8]. Una forma gráfica de advertir este comportamiento es a través de examinar el espectro resultante del Hamiltoniano de Anderson Ec. (1.19). Mediante diagonalización exacta se obtuvo el espectro de energía para una red unidimensional con $L = 400$ sitios, como puede verse de la Fig. (1.5-a) existen estados energéticamente cercanos. Sin embargo, como se advierte de la Fig. (1.5-b) los eigenestados asociados a dichas energías propias están espacialmente lejanos, por está razón toda integral que involucre el traslape de estos eigenestados está fuertemente suprimida. Esto no quiere decir que no existan estados propios que se encuentren cercanos espacialmente, en la Fig. (1.6-b) se muestra el perfil de densidad de dos eigenestados que se encuentran localizados en sitios aledaños. El traslape significativo de estos estados podría llevar a pensar que una partícula puede delocalizarse mediante transiciones de eigenestados localizados en sitios colindantes. Sin embargo, esto no es cierto ya que de acuerdo a la Fig. (1.6-a) las eigenenergías correspondientes a los estados propios cercanos están energéticamente alejados, debido a lo cual, la transición de los eigenestados mostrados en la Fig. (1.6-b) está fuera de resonancia y por ende no tienen lugar. Es importante mencionar que esta característica no es particular de los estados propios mostrados en la Fig. (1.6-b), sino de cualquier par de eigenestados cercanos espacialmente.

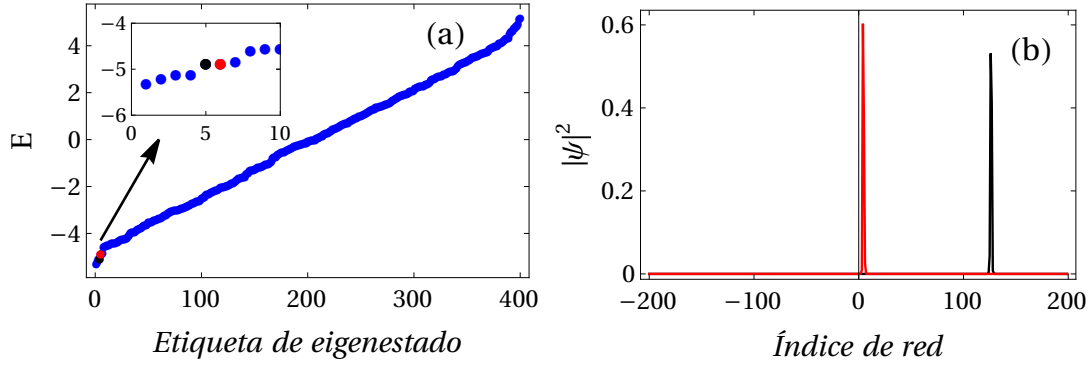


Figura 1.5: (a) Eigenestados en el modelo de Anderson unidimensional, el recuadro enfoca a dos energías propias aledañas del espectro. (b) densidad de probabilidad asociada a las eigenenergías (a) identificadas de acuerdo al color.

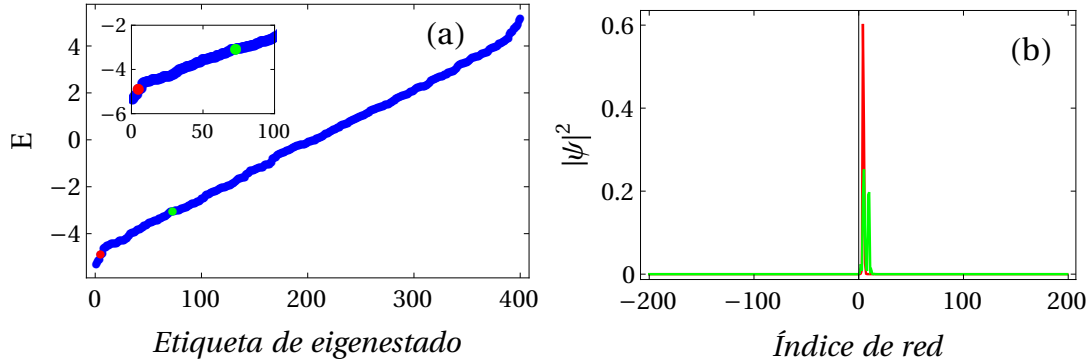


Figura 1.6: (a) Eigenestados en el modelo de Anderson unidimensional, el recuadro enfoca a dos energías propias asociadas a eigenestados espacialmente adyacentes. (b) densidad de probabilidad de dos eigenestados aledaños espacialmente cada uno se identifica con (a) de acuerdo al color.

Recapitulando, estados propios cercanos energéticamente están espacialmente lejanos y eigenestados cercanos espacialmente se encuentran energéticamente distantes.

1.3. Simuladores cuánticos

Muchos problemas importantes en la física, especialmente los que tienen lugar a bajas temperaturas o involucran muchos cuerpos continúan siendo poco entendidos porque la mecánica cuántica subyacente es enormemente compleja. Basta con tomarse el problema de N espines con valor $1/2$ interactuantes para percatarse del rápido crecimiento de $Dim(\mathcal{H})$, la dimensión del espacio de Hilbert, aún cuando se emplea leyes de conservación, $Dim(\mathcal{H})$

continúa creciendo exponencialmente con el número de partículas. Usando toda clase de simetrías, las computadoras convencionales no son capaces de simular sistemas cuánticos con más de 30 espines. Dejando así fuera de cuestión a la simulación numérica exacta de sistemas cuánticos con muchos cuerpos.

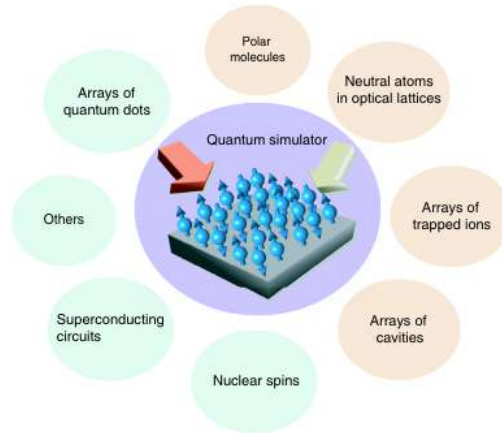


Figura 1.7: Caricatura de un simulador cuántico, alrededor se muestra los nombres de diferentes plataformas de simulación cuántica. Figura extraída de la referencia [9].

Otro obstáculo que se presenta en el estudio de los sistemas cuánticos tiene lugar en los dispositivos experimentales. Por ejemplo, en la materia condensada, un sólido real presenta vibraciones iónicas, desorden, movimiento de electrones, acoplamiento espín-órbita, entre otros factores que dificultan el entendimiento aislado de ciertos fenómenos (superconductividad, magnetismo, transporte). Además, existe poca o nula posibilidad de modificar los factores internos de un sólido real, como por ejemplo, la interacción entre partículas, la geometría subyacente, el acoplamiento materia-luz, entre otros. Debido a la complejidad computacional y experimental mencionadas anteriormente, es necesario el desarrollo de nuevas y mejores herramientas que permitan comprender el comportamiento de los sistemas cuánticos. Una alternativa para eludir estos inconvenientes es mediante el uso de los llamados simuladores cuánticos. De acuerdo a lo propuesto por Richard Feynman [10], un simulador cuántico es un dispositivo diseñado con el propósito particular de proporcionar información relevante de un sistema cuántico, el cual es difícil o imposible de estudiar en el laboratorio o de modelar en una computadora. El control preciso de las partículas y la capacidad amplia de sintonizar los parámetros de un simulador cuántico (interacción, geometría) permite desenredar limpiamente la influencia de varios factores físicos en el comportamiento de un sistema cuántico específico. Los avances recientes en la manipulación de partículas cuánticas y del entorno en el que se mueven han permitido demostraciones de simuladores cuánticos de física exótica y de muchos cuerpos. Por ejemplo, la realización de la transición Mott-Superfluido [11], el cruce BEC-BCS [12–14], la implementación de campos magnéticos artificiales [15, 16] y el estudio del transporte en sistemas con desorden espacial [17–20]. Las principales plataformas experimentales de simulación cuántica (ver Fig. (1.7)) son: átomos ultrafríos [21, 22], moléculas polares [23, 24], iones atrapados [25, 26], átomos de Rydberg [27, 28], fotones en guías de

onda [29, 30], circuitos superconductores [31, 32], puntos cuánticos [33, 34], cavidades de alta reflectancia [35, 36], entre otros. La gran cantidad de experimentos que se han producido usando las plataformas mencionadas sugieren, que la simulación cuántica ha pasado de una ilusión teórica a una realidad creíble. Este contexto ha desencadenado la emergencia de nuevas preguntas y modelos físicos que estén al alcance de alguno de los simuladores cuánticos. Por ejemplo, en el marco de los sistemas desordenados, ha surgido un gran interés en las propiedades de localización de uno y muchos cuerpos en presencia de interacciones de largo y corto alcance [11, 17, 18, 37–39]. Las principales plataformas de simulación cuántica que son de interés para el estudio de los sistemas desordenados son: átomos ultrafríos, moléculas polares y iones atrapados. En lo subsecuente, se expondrá de manera breve algunas de las plataformas de simulación cuántica que son de interés particular de este trabajo.

1.3.1. Átomos ultrafríos

Probablemente uno de los simuladores cuánticos más conocidos, los átomos ultrafríos captaron la atención de la comunidad científica desde la primera realización de un condensado de Bose-Einstein en 1995 [40]. Los gases ultrafríos se han situado como una plataforma de simulación idónea de diferentes sistemas físicos de la materia condensada [21, 22, 41, 42]. Usando técnicas de enfriamiento láser, sísifo y evaporativo [43, 44] se logra alcanzar las temperaturas de degeneración cuántica de gases bosónicos y fermiónicos ($10^2 - 10^1$ nK). Con la ayuda de trampas dipolares y potenciales ópticos [42, 45] es posible confinar a los átomos en potenciales armónicos o periódicos, los cuales imitan el ambiente experimentado por los electrones en un sólido cristalino. Con respecto a este último caso, usando átomos bosónicos se ha logrado materializar el célebre modelo de Bose-Hubbard [46]:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) + \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i, \quad (1.28)$$

donde J es la amplitud de tunelaje, U la interacción entre partículas, ϵ_i un potencial en el sitio (confinamiento, desorden cuasiperiodicidad) y $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ el operador de número. En el contexto de átomos fermiónicos, es posible confinar tanto gases de Fermi polarizados como mezcla de dos o más componentes hiperfinas. En una red óptica las propiedades físicas de estos gases están descritas por el modelo de Fermi-Hubbard [47]:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}, \quad (1.29)$$

donde por simplicidad se ha tomado el caso de un gas fermiónico con dos componentes hiperfinas y una interacción en el sitio. La magnitud y signo de la interacción entre los átomos, que usualmente es de corto alcance, se logra sintonizar mediante campo magnético a través de las resonancias de Feshbach [41]. Los átomos que usualmente se llevan a la degeneración cuántica son ^{87}Rb , ^7Li , ^{23}Na , ^6Li , ^{39}K , ^{40}K , entre otros. Dependiendo del experimento en cuestión se logra tener entre 10^4 y 10^2 átomos. Existe una gran variedad de experimentos que se han realizado con átomos ultrafríos, por lo que nombrar todos es una labor compleja.

Sin embargo, destaca la observación de aislantes de Mott [11], el cruce BEC-BCS [12–14], la localización de una y muchas partículas [17–20], las fases topológicas [48–50], el orden magnético [51] y la física de impurezas [52, 53], entre otros.

1.3.2. Moléculas polares ultrafrías

El campo de las moléculas polares ultrafrías está principalmente motivado por el éxito de los átomos ultrafríos. La capacidad de control a nivel cuántico tanto de los grados de libertad internos (proyección hiperfina) como externos (geometría subyacente, interacciones) en sistemas atómicos impulsó a extender este tipo de control a los gases de moléculas polares. Sin embargo, debido a que las moléculas presentan estructura hiperfina, rotacional y vibracional representan sistemas con un grado de complejidad superior a los gases atómicos [23, 54, 55]. Por esta razón, la técnicas de creación y control de moléculas polares continúan estando en constante desarrollo. Entrar en detalle sobre los procedimientos empleados en la producción de moléculas polares ultrafrías escapa del objetivo de esta sección, por consiguiente solo se proporcionará un resumen rápido. El proceso comienza con un gas ultrafrío de los átomos que formarán las moléculas, por ejemplo, un gas cuántico degenerado de átomos de ^{40}K y ^{87}Rb . Los átomos están confinados en una trampa dipolar óptica la cual confinará también a las moléculas ^{40}K - ^{87}Rb resultantes. Posteriormente, mediante resonancias magnéticas de Feshbach se consigue que al colisionar un átomo de ^{40}K y uno de ^{87}Rb el producto sea una molécula ^{40}K - ^{87}Rb débilmente unida [55, 56]. La molécula se transfiere ópticamente a su estado fundamental rovibracional mediante un proceso Raman adiabático de dos fotones [56]. En comparación con las moléculas inicialmente formadas, las obtenidas después del proceso Raman están fuertemente ligadas. A través del proceso mencionado es posible obtener un gas con un número de moléculas del orden de $N \sim 10^3$ y tiempos de unos cuantos segundos $\tau \sim 2.5$ s [56]. Además, mediante el uso de campos eléctricos es posible sintonizar el momento dipolar de las moléculas hasta unos cuantos pocos Debyes $0.8 - 2.75$ D ($1 \text{ D} = 3.336 \times 10^{-30}$ Cm) [56]. Los gases polares han sido empleados para estudiar química ultrafría [57, 58], información cuántica [59–61] y para realizar nuevas fases cuánticas de la materia [24, 62]. En particular, con respecto a esta última aplicación resulta la materialización de sistemas de espín $1/2$, por ejemplo en [24] se logró la simulación del siguiente Hamiltoniano:

$$H = \frac{J}{2} \sum_{i>j} V_{dd}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+), \quad (1.30)$$

donde J es la amplitud de la interacción, $V_{dd}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = (1 - 3 \cos(\Theta_{ij})) / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3$ es la interacción dipolar, Θ_{ij} el ángulo entre el eje de cuantización y el vector $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, S_j^+ y S_j^- son los usuales operadores de ascenso y descenso con proyección de espín $1/2$, respectivamente. Es importante mencionar que las dos componentes de espín son en realidad dos estados rotacionales distintos en las moléculas [24]. El Hamiltoniano en la Ec. (1.30) puede mapearse al de una partícula con un tunelaje que decae como $J \approx 1 / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3$, nótese que son las excitaciones rotacionales las que se propagan de sitio a sitio y no las moléculas. La posibilidad de tener un tunelaje de ley de potencia con exponente 3 será de relevancia para los modelos de los próximos capítulos.

1.3.3. Iones atrapados

Los iones atómicos confinados en una trampa electrodinámica (Penning, Paul [44]) proporcionan sistemas cuánticos individuales cuyos grados de libertad internos y externos pueden ser controlados en gran medida por los experimentales. Una fuerte motivación para los experimentos con iones atrapados es la amplia gama de investigaciones sobre cuestiones fundamentales de la física que se puede realizar. Por ejemplo, en el campo de la información cuántica [26, 63] y la simulación cuántica [25, 64–66]. Con respecto a este último, destaca la realización de modelos de espín con acoplamientos que decaen como una ley de potencia $1/r^\alpha$, y cuyo exponente puede sintonizarse en el rango $0 < \alpha < 3$ [64]. Como se mostró en [64], donde se confinaron iones de $^{40}\text{Ca}^+$ en una trampa de Paul lineal [44], como cada ion puede estar en uno de los dos estados $|\text{S}_{1/2}, m = +1/2\rangle$ o $|\text{D}_{5/2}, m = +5/2\rangle$, el sistema se puede mapear a uno de espín 1/2, es decir, $|\text{S}_{1/2}, m = +1/2\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle$ y $|\text{D}_{5/2}, m = +5/2\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$. En presencia de interacciones estimuladas por láser [44, 64], el sistema de iones puede ser descrito por un modelo unidimensional de espines que interactúan de acuerdo al siguiente Hamiltoniano:

$$H = \hbar \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x + \hbar B \sum_i \sigma_i^z, \quad (1.31)$$

donde σ_i^β ($\beta = x, y, z$) son las matrices de Pauli de espín 1/2 en el sitio i y B es un campo magnético externo. Los acoplamientos entre espines tienen una dependencia de ley de potencia $J \propto 1/|i - j|^\alpha$ cuyo exponente α puede sintonizarse. Usando un láser bien enfocado y imágenes con resolución de sitio [64], se inyectó una excitación localizada $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$ y se le dio seguimiento a la dinámica de la excitación como función de la potencia del tunelaje α . Los resultados muestran los distintos regímenes de propagación de la excitación como función del rango de la interacción. El Hamiltoniano de la Ec. (1.31) puede mapearse a uno de una partícula moviéndose con un tunelaje de ley de potencia, es decir, los experimentos con iones atrapados permiten diseñar modelos de una o más partículas con saltos de corto o largo alcance. Además de modelos de espín los experimentos de iones atrapados han sido utilizados para crear compuertas lógicas con aplicaciones en la computación cuántica [63] y realizar modelos relativistas [67].

1.3.4. Átomos de Rydberg

Un átomo de Rydberg no se refiere a un elemento de la tabla periódica sino a un átomo, en principio de cualquier elemento, que posee un electrón con número principal n grande ($n \gtrsim 40$) [68]. Los electrones con número principal pequeño ($n = 1, 2 \dots$) apantallan la carga total del núcleo, de tal manera que las interacciones eléctricas entre electrón externo-núcleo atómico y electrón externo-electrones internos pueden verse, de forma aproximada, como una interacción efectiva entre un electrón externo y un núcleo con carga $+e$, en reminiscencia a la experimentada por un electrón en un átomo de hidrógeno [68]. Cuanto más grande sea el valor de n , la probabilidad de encontrar al electrón lejos del núcleo es mayor, es decir, el radio promedio de la nuble electrónica incrementa (~ 500 nm), en la Fig. (1.8) se muestra una caricatura de un átomo de Rydberg. Cuando el electrón de un átomo es excitado a un estado

de Rydberg, se presentan tres propiedades individuales importantes. Primero, el tiempo de vida escala como $\tau \sim n^{-3} \sim 200 \mu\text{s}$, segundo el radio de la nube electrónica escala como $\langle r \rangle \sim n^2 \sim 500 \text{ nm}$ y tercero, se genera un momento dipolar que da lugar a una interacción con otros átomos de Rydberg con magnitudes en la escala de los MHz [27].

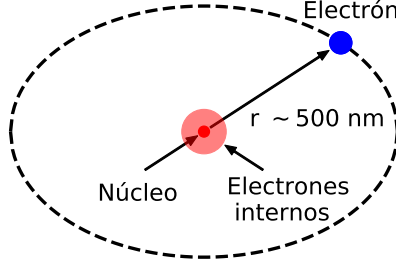


Figura 1.8: Caricatura de un átomo de Rydberg, la esfera de color rojo sólido representa el núcleo atómico, el área sombreada de color rojo transparente ilustra la nube electrónica interna y la esfera externa de color azul es el electrón de Rydberg.

En los experimentos actuales, conjuntos de átomos individuales son atrapados en redes ópticas o en arreglos de trampas dipolares microscópicas separadas por unos pocos micrómetros [27]. Para hacer que los átomos interactúen a distancias mayores que su separación, se ilumina a los átomos con luz láser resonante a un estado de Rydberg, el momento dipolar eléctrico de los átomos excitados conduce a fuertes interacciones dipolo-dipolo entre ellos. Nótese que, a estas escalas de distancia $\sim \mu\text{m}$, solo aquellos átomos en un estado excitado interactúan. En los experimentos actuales [27], existen dos principales configuraciones en donde los átomos de Rydberg se utilizan para simular modelos de espín. El primer caso corresponde a un par de átomos en el mismo estado de Rydberg. En este escenario, la interacción dipolo-dipolo conduce a la interacción de van der Waals C_6/r^6 , con r la separación entre los átomos y C_6 el coeficiente de van der Waals. Mapeando el estado base $|g\rangle$ y el estado excitado $|r\rangle$ a un sistema de espín 1/2, es decir, $|\uparrow\rangle \rightarrow |r\rangle$ y $|\downarrow\rangle \rightarrow |g\rangle$, el Hamiltoniano de un conjunto de átomos confinados en una red óptica o un arreglo de trampas dipolares y que es iluminado por un láser, el cual induce la transición al estado de Rydberg, con frecuencia de Rabi Ω y desintonización δ es el siguiente:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\Omega}{2} \sum_i \sigma_x^i - \hbar\delta \sum_i \hat{n}_i + \sum_{i<j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (1.32)$$

donde \hat{n}_i es el operador que cuenta el número de átomos de Rydberg en el sitio i , σ_x es la matriz de Pauli en x y $V_{ij} = C_6/r^6$ es la interacción entre átomos de Rydberg. El segundo caso ocurre cuando los átomos pueden ser excitados a dos estados de Rydberg diferentes, por ejemplo, $|1\rangle$ y $|2\rangle$. En este escenario la interacción que se induce decae como C_3/r^3 con C_3 el coeficiente dipolar [27]. Al mapear los estados de Rydberg a uno de espín 1/2, es decir,

$|\uparrow\rangle \rightarrow |1\rangle$ y $|\downarrow\rangle \rightarrow |2\rangle$, el Hamiltoniano que se puede simular con este arreglo es el siguiente:

$$H = \sum_{i \neq j} \frac{C_3}{R_{ij}^3} (\sigma_+^i \sigma_-^j + \sigma_-^i \sigma_+^j), \quad (1.33)$$

que no es más que el modelo de espín XY [2]. Hoy en día, los átomos de Rydberg se han utilizado para observar experimentalmente fases topológicas [69], modelos de espín [70], ondas de densidad [71], entre otras fases de relevancia actual. Análogamente a los modelos de espín para iones atrapados y moléculas polares, los implementados usando átomos de Rydberg pueden mapearse a Hamiltonianos de partículas con tunelaje de ley de potencia $1/r^\alpha$. Usando los dos esquemas discutidos en esta subsección es posible elegir $\alpha = 3$ o $\alpha = 6$.

1.4. Localización en simuladores cuánticos

La importancia del fenómeno de localización en la física de la materia condensada ha motivado no solo trabajos teóricos sino también el diseño de configuraciones experimentales, en donde, se pueda discernir las características esenciales de la localización (arresto de transporte, localización exponencial, dinámica de enredamiento, emergencia de integrales de movimiento, etc.). Dado que es un fenómeno ondulatorio, la localización de una o muchas partículas se ha observado en plataformas experimentales que involucran tanto ondas de materia [19, 20, 72, 73], electromagnéticas [74, 75], sonido [76], entre otras. En esta sección, se expondrá de forma breve los principales experimentos de localización en plataformas de simulación cuántica. Es importante mencionar que no se pretende hacer una revisión exhaustiva de todos los experimentos sino hacer mención de los más relevantes para este trabajo de tesis.

1.4.1. Átomos ultrafríos I

La primera evidencia experimental de localización de Anderson usando átomos ultrafríos fue realizada en 2008 por el grupo de Alain Aspect en el Laboratorio Charles Fabry ubicado en Francia [19]. En este experimento se empleó un gas de Bose de ^{87}Rb con $N \approx 1.7 \times 10^4$ partículas, el gas estaba lo suficientemente diluido como para que los efectos de interacción sean despreciables [19]. El condensado se confinó en una trampa armónica con frecuencias $\omega_x = \omega_y = 2\pi \times 70$ Hz y $\omega_z = 2\pi \times 5.4$ Hz. Debido al fuerte confinamiento transversal, la dinámica en las direcciones y y x están para todo propósito práctico congeladas, por ende, el gas atómico se encuentra dentro del régimen cuasi-unidimensional (ver Apéndice C). El protocolo del experimento consistió en apagar el confinamiento longitudinal y activar el potencial tipo speckle (ver Apéndice A) a $t = 0$, después de un tiempo de propagación, el gas se fotografió mediante imágenes de fluorescencia. Los hallazgos de este experimento ponen en manifiesto que en presencia de desorden, la expansión del condensado se ve abruptamente frenada, en contraste con la expansión libre en ausencia del potencial speckle.

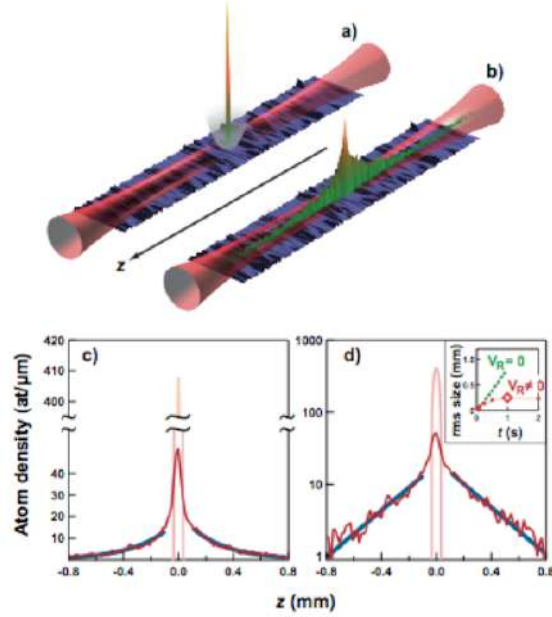


Figura 1.9: (a) Condensado de Bose-Einstein en una trampa híbrida, que es la combinación de una guía de ondas horizontal que garantiza un fuerte confinamiento transversal y una trampa longitudinal magnética débil. (b) A $t = 0$ se apaga el confinamiento longitudinal y se activa el potencial tipo speckle, el cual produce el arresto de la difusión del BEC. (c-d) Perfil de densidad de un condensado localizado a $t = 1$ s en escala lineal y semi-logarítmica. El recuadro en (d) es el RMSD vs tiempo en presencia y ausencia de desorden. La figura fue extraída de la referencia [19]

En la Fig. (1.9) se muestran los perfiles de densidad reportadas en [19]. Como puede observarse, las funciones de onda muestran un decaimiento exponencial, lo cual es una firma clara de un aislante de Anderson.

1.4.2. Átomos ultrafríos II

Una segunda evidencia experimental del fenómeno de localización en el contexto de los átomos ultrafríos fue realizada en el año 2008 por el grupo de Massimo Inguscio en el laboratorio europeo de espectroscopía no lineal en Italia [20]. En este experimento, se consideró un condensado de Bose-Einstein de átomos de ^{39}K , por medio de resonancias de Feshbach se sintonizó la longitud de dispersión de onda s a valores diminutos, dando lugar, para todo propósito práctico, a un gas no interactuante. De manera análoga al experimento anterior, la dinámica del BEC fue restringida al régimen cuasi-1D por medio de un confinamiento armónico anisotrópico. El potencial precursor de la localización consistió de dos redes ópticas: primaria y secundaria, las cuales están caracterizadas por tener períodos inconmensurables. El par de redes da lugar al célebre modelo de Aubry-André (ver Apéndice B) [77].

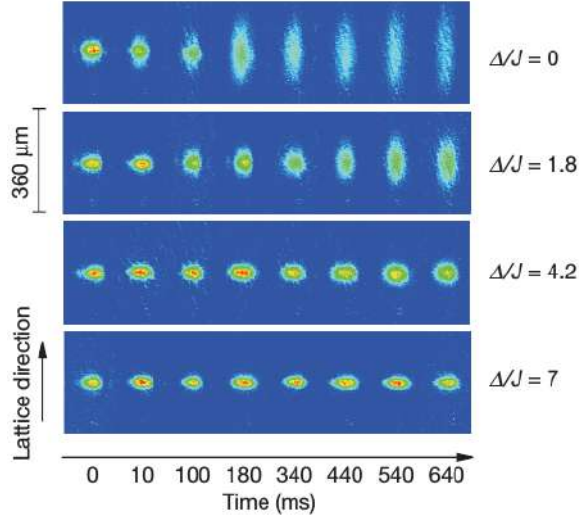


Figura 1.10: Imágenes de absorción de la dinámica a lo largo de la red cuasiperiódica del condensado de Bose-Einstein para diferentes valores de la modulación cuasiperiódica (ver apéndice B). La difusión del BEC se ve suprimida para $\Delta/J > 2$. La figura fue extraída de la referencia [20].

Al tiempo $t = 0$, el confinamiento armónico longitudinal se apagó abruptamente dejando que los átomos se expandieran a lo largo de la red bicromática unidimensional. Posteriormente, como puede observarse de la Fig. (1.10), se fotografió la distribución espacial de los átomos mediante imágenes de absorción a diferentes tiempos de evolución. En ausencia de la red secundaria, el grupo de M. Inguscio observó una difusión balística del gas, mientras que para magnitudes de la red secundaria mayores a cierto valor umbral (ver Apéndice B), los resultados arrojaron nula difusión.

1.4.3. Ondas electromagnéticas

En 2007 el grupo de Mordechai Segev en el laboratorio de tecnología Technion, Israel reportaron localización de Anderson de ondas electromagnéticas [75]. La configuración experimental consistió en hacer incidir un haz de $\lambda = 512$ nm sobre un cristal fotónico, mediante un patrón de speckle en 2D se generó fluctuaciones en el índice de refracción transversal del cristal, estas fluctuaciones juegan el papel del potencial aleatorio o desorden en el sistema. Debido a que la amplitud del haz satisface la ecuación de Helmholtz la cual, bajo la aproximación paraxial, es reminiscente a la ecuación de Schrödinger, se produce la supresión de la difusión transversal por efecto de las fluctuaciones del índice de refracción. En la Fig. (1.11) se muestra el esquema experimental empleado por el grupo de M. Segev y fotografías del haz de luz, el cual en ausencia de patrón speckle se propaga transversalmente en la red con simetría hexagonal mientras, en presencia de desorden, la propagación es únicamente longitudinal, es decir, en la dirección donde no hay desorden.

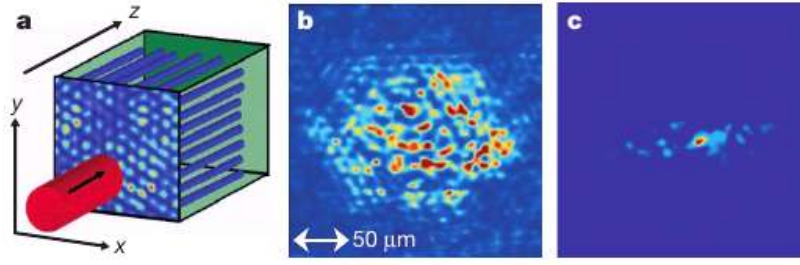


Figura 1.11: (a) Esquema del dispositivo experimental usado en [75], un haz de prueba ingresa a una red desordenada en las direcciones transversales (y y x) pero invariante en la dirección de propagación (z). (b) Propagación transversal del haz en ausencia de desorden. (c) Ausencia de difusión transversal del pulso electromagnético en presencia de desorden. La figura fue extraída de la referencia [75].

1.4.4. Átomos ultrafríos III

El efecto simultáneo entre cuasiperiodicidad e interacciones en sistemas fermiónicos fue mostrado por primera vez por el grupo de Immanuel Bloch en el Instituto Max-Planck en Alemania [17]. Básicamente, el experimento consistió en confinar dos proyecciones hiperfinas de átomos de ^{40}K en una red óptica bicromática unidimensional. Las profundidades de las redes ópticas se sintonizaron para que el potencial resultante coincidiera con la modulación cuasiperiódica del modelo de Aubry-André [77]. En el experimento de I. Bloch se analizó el desequilibrio o imbalance I , por su nombre en inglés, como función del tiempo. Este parámetro está dado de la siguiente forma:

$$I(t) = \frac{n_e(t) - n_o(t)}{n_e(t) + n_o(t)}, \quad (1.34)$$

donde n_e y n_o es la densidad de partículas en sitios pares e impares, respectivamente. Como su nombre lo indica, la cantidad I es una medida del desequilibrio en la densidad de sitios pares e impares. El estado inicial fue una onda de densidad independiente del espín, por ejemplo $|\uparrow, 0, \uparrow, 0, \downarrow, 0, \uparrow, 0, \downarrow, 0, \downarrow, 0, \dots\rangle$, en donde solamente los sitios pares están ocupados. En la Fig. (1.12) se muestra la evolución en el tiempo $\tau = h/(2\pi J)$ del imbalance para diferentes valores de la cuasiperiodicidad. Como puede observarse, en ausencia de modulación cuasiperiódica $\Delta/J = 0$ el sistema relaja la condición inicial $I \rightarrow 0$. Sin embargo, a partir de cierto valor crítico de Δ/J , el sistema detiene su transporte y el imbalance tiende a un valor distinto de cero. Es importante mencionar que, sin duda alguna, los resultados de este experimento dependen fuertemente de la energía del estado inicial del sistema. En particular, la energía de interacción del estado inicial es nula (a excepción de ciertos errores experimentales como los doublones), por ende la formación y estabilidad de estados ligados entre los fermiones está altamente suprimido.

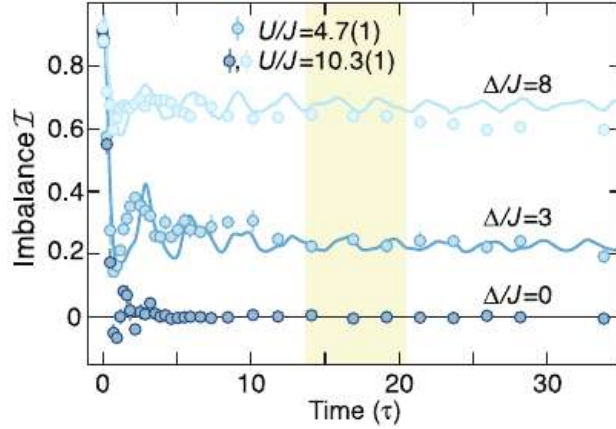


Figura 1.12: (a) Configuración de onda de densidad inicial en donde los átomos ocupan únicamente los sitios pares. Figura extraída de la referencia [17]

1.4.5. Átomos ultrafríos IV

Los efectos de desorden en sistemas interactuantes bidimensionales se logran observar en gases atómicos ultrafríos. Como prueba de ello destaca el experimento realizado por el grupo de Immanuel Bloch en el Instituto Max-Planck en Alemania [18]. La configuración experimental consistió de un confinamiento armónico longitudinal fuerte, de tal forma que el sistema sea cuasi-2D, uno transversal con frecuencias $(\omega_x, \omega_y) = 2\pi \times (54, 60)$ Hz y la acción de la red óptica cuadrada. Modulando la profundidad de la red óptica se logró preparar átomos de ^{87}Rb en la fase aislante de Mott a llenado unitario, posteriormente, se removió la mitad de los átomos mediante un modulador espacial de luz [18]. La evolución en el tiempo arrancó al introducir un potencial tipo speckle a los átomos restantes y al disminuir la profundidad de la red óptica, durante la dinámica se monitoreó la diferencia entre el número de partículas de la región inicialmente ocupada y la desocupada. Análogamente al experimento anterior se definió el parámetro imbalance de la siguiente forma:

$$I(t) = \frac{N_R(t) - N_I(t)}{N_R(t) + N_I(t)}. \quad (1.35)$$

Como se observa en la Fig. (1.13), en ausencia de desorden, se encontró que, en promedio, la difusión de los bosones se encaminaba a homogeneizar el sistema, es decir, $I \rightarrow 0$. Sin embargo, a partir de un valor umbral en la magnitud del desorden, que por supuesto depende del valor de la interacción entre partículas, el arresto del transporte de las partículas y por ende del imbalance es claramente notorio. A pesar que se ha cuestionado si la supresión de la difusión observada en este trabajo es evidencia de localización de muchos cuerpos en 2D [78], no cabe duda que representa una investigación crucial que coadyuva al entendimiento de los efectos en conjunto de las interacciones y el desorden.

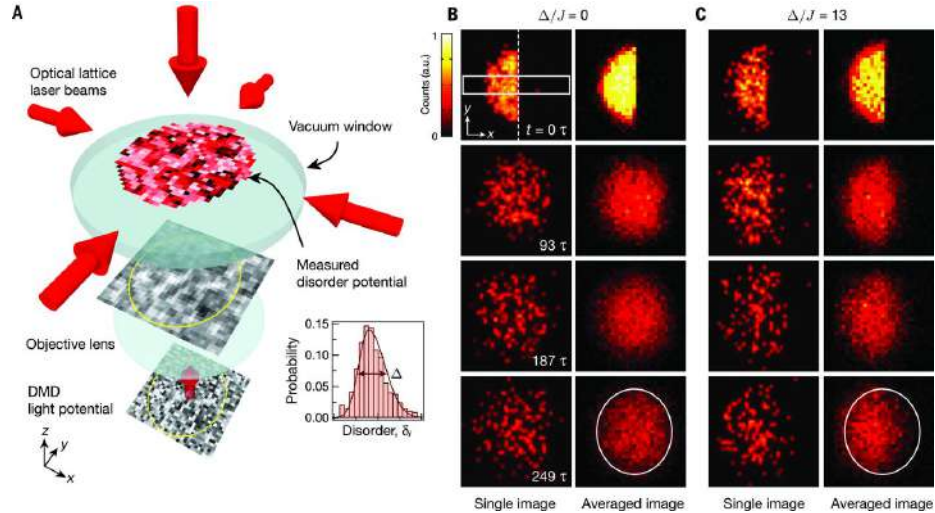


Figura 1.13: (a) Un potencial desordenado controlado por un dispositivo de espejo digital se enfoca en una red óptica que confina átomos bosónicos. (b) Imágenes de fluorescencia que muestran la evolución del estado inicial en ausencia de desorden. La columna izquierda muestra imágenes individuales de la distribución atómica, la columna de la derecha corresponde a la densidad promediada sobre 50 realizaciones de desorden. (c) Igual que el panel (b) pero en presencia de desorden. La figura fue extraída de la referencia [18].

1.5. Conclusiones

En este capítulo se estableció los fundamentos básicos del célebre modelo de Anderson, el cual dio origen al estudio del transporte en sistemas desordenados. Posteriormente, se hizo una recopilación de experimentos relacionados con el fenómeno de localización en diversas plataformas de simulación cuántica. Con este capítulo se pretende dar contexto y motivación experimental a los subsecuentes capítulos de la tesis, los cuales plantean el problema de localización de una, un par y muchas partículas en el esquema de campo medio. Es importante mencionar que además de redes desordenadas, en los siguientes capítulos se estudiará el transporte en redes cuasiperiódicas, concepto que se definirá más adelante. El objetivo de estudiar tanto redes desordenadas como cuasiperiódicas subyace en el hecho que los experimentos en plataformas de simulación cuántica pueden realizar ambos tipos de redes y que el fenómeno de localización en ambas puede llegar a tener características contrastantes.

Capítulo 2

Localización de una partícula

Desde el trabajo seminal de Anderson [3], titulado “Absence of diffusion in certain random lattices”, el estudio de la localización cuántica ha sido un paradigma central en la materia condensada. Sin lugar a dudas, la localización es uno de los temas más estudiados en la física¹ que abarca sistemas tan dispares como los electrones en sólidos, excitaciones no electrónicas (espines, fonones, plasmones, fotones), diferentes tipos de ondas, como electromagnéticas, sonido y materia. Como primer paso en la caracterización de los fenómenos de localización, se requiere de la elección de un modelo efectivo que represente al medio desordenado, y luego el uso de técnicas teóricas y numéricas para analizar sus propiedades. En la literatura actual, existen dos esquemas medulares que capturan la transición metal-aislante de Anderson en la aproximación de partícula libre: el modelo de Anderson [3], en el cual el desorden está representado por energías aleatorias en el sitio y el modelo de Aubry-André (de manera más precisa, el modelo de Aubry-André-Azbel-Harper) [77, 79, 80], donde el medio inhomogéneo surge como consecuencia de la superposición de dos potenciales con periodicidades inconmensurables entre sí. En este último modelo, la presencia del par de potenciales periódicos pero inconmensurables entre sí, resulta en energías correlacionadas por sitio que rompen poco o mucho, dependiendo de la magnitud de los potenciales inconmensurables, la periodicidad de la red. Por esta razón, al medio inhomogéneo que da lugar al modelo de Aubry-André, se le conoce también como cuasiperiódico. A las energías por sitio se les llama cuasidesorden para distinguirlas del desorden aleatorio en el modelo de Anderson. En este capítulo se introducirá y estudiará las propiedades de localización del modelo de Aubry-André y de sus principales extensiones, las cuales son objeto de investigación hoy en día [81–83]. En particular, se analizarán propiedades estacionarias y dinámicas que permitan discernir la transición metal-aislante de Anderson. El estudio del fenómeno de localización de un cuerpo representa el bloque fundamental que dio lugar al trabajo de tesis.

¹Una búsqueda de la palabra localization en la base de datos de revistas de APS arroja más de 40,000 resultados.

2.1. Modelo de Aubry-André

Debido a su fascinante característica de tener un ordenamiento espacial intermedio entre una red periódica y una desordenada, los sistemas cuasiperiódicos unidimensionales han sido objeto de intensa investigación teórica desde hace más de 40 años [77, 79, 80, 84, 86–90]. Uno de los modelos más populares y consolidados es el modelo de Aubry-André [77, 79, 80]. En este modelo, se estudia la emergencia del fenómeno de localización de una partícula cuando se introduce una modulación o potencial cuasiperiódico en una red perfectamente ordenada. El Hamiltoniano que describe al modelo de Aubry-André (AA) es el siguiente:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i, \quad (2.1)$$

donde \hat{b}_i^\dagger (\hat{b}_i) es el operador de creación (aniquilación) de una partícula en el sitio i , J es la amplitud de tunelaje a primeros vecinos, Δ es la magnitud de la modulación cuasiperiódica, β es un número con cierto grado de incomensurabilidad y $\phi \in [0, 2\pi)$ es una fase aleatoria. Debido a que se está considerando el problema de un cuerpo, no hay necesidad de especificar la naturaleza estadística de los operadores \hat{b}_i^\dagger y \hat{b}_i . En el Apéndice B puede encontrarse una derivación del Hamiltoniano de Aubry-André a partir de la superposición de dos potenciales con periodicidades inconmensurables entre sí. Cuando $\Delta = 0$, el Hamiltoniano en la Ec. (2.1) describe a una red perfectamente periódica, en donde todos los sitios son equivalentes entre sí. En contraste, para el caso $\Delta \neq 0$ y β un número con cierto grado de incomensurabilidad, el potencial cuasiperiódico $\Delta \cos(2\pi\beta i + \phi)$ destruye la equivalencia de todos los sitios en la red. Debido a que Δ modula la discrepancia entre una red perfectamente periódica y una aperiódica, al segundo término en el Hamiltoniano de la Ec. (2.1) se le conoce como modulación cuasiperiódica o cuasidesorden. En otras palabras, cuando $\Delta/J \ll 1$, la red es casi-periódica o cuasiperiódica, mientras que para $\Delta/J \gg 1$ la red en cuestión es en gran medida aperiódica. Es importante puntualizar que el rompimiento de la periodicidad emerge como consecuencia de la semejanza de la energía por sitio y no porque la posición de los sitios en la red se haya modificado. Como en este capítulo se está considerando el problema de un cuerpo, es conveniente reescribir el Hamiltoniano en la Ec. (2.1) en términos de la base de sitios $|j\rangle$, donde $|j\rangle$ indica que la partícula está localizada en el sitio j . En esta base, el Hamiltoniano de AA se expresa de la siguiente forma:

$$\hat{H} = -J \sum_j (|j+1\rangle\langle j| + |j-1\rangle\langle j|) + \Delta \sum_j \cos(2\pi\beta j + \phi) |j\rangle\langle j|. \quad (2.2)$$

Habiendo reescrito el Hamiltoniano de AA, es oportuno exponer su propiedad de autosemejanza, la cual puede exhibirse a través de la siguiente transformación al espacio de momentos:

$$|j\rangle = \sum_{k_s} e^{-2\pi i \beta k_s j} |k_s\rangle, \quad (2.3)$$

donde $|k_s\rangle$ indica que la partícula tiene un momento de cristal igual a k_s . Al sustituir la Ec. (2.3) en Ec. (2.2) y después de algo de álgebra directa se encuentra la representación en el

espacio de momentos del Hamiltoniano de AA:

$$\hat{H}_k = -\frac{\Delta}{2} \sum_s (|k_{s+1}\rangle\langle k_s| + |k_{s-1}\rangle\langle k_s|) + 2J \sum_s \cos(2\pi\beta s) |k_s\rangle\langle k_s|, \quad (2.4)$$

por simplicidad se ha considerado el caso $\phi = 0$. El Hamiltoniano en la Ec. (2.4) tiene una apariencia reminiscente a la Ec. (2.2), con las diferencias en la amplitud del tunelaje entre estados vecinos $J \rightarrow \Delta/2$ y la magnitud de la modulación cuasiperiódica $\Delta \rightarrow 2J$. Aubry y André [77] encontraron que en el punto de autosemejanza $\Delta = 2J$, en donde las expresiones matemáticas de \hat{H} y \hat{H}_k se ven idénticas, los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (2.2) cambian de ser extendidos a localizados. Por este motivo, al punto $\Delta = 2J$ se le denomina como punto crítico o cuasidesorden crítico de la transición metal-aislante de Anderson.

2.1.1. Aleatoriedad vs cuasiperiodicidad

En el modelo de Anderson [3], el desorden se introduce mediante energías aleatorias en el sitio ϵ_i , las cuales toman valores de acuerdo a la siguiente distribución:

$$\rho(\epsilon_i) = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon_i \in [-W/2, W/2], \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (2.5)$$

donde W es la magnitud del desorden. En contraste, las energías por sitio del modelo de Aubry-André [77], están dadas por la siguiente expresión:

$$\epsilon_i = \Delta \cos(2\pi\beta i + \phi). \quad (2.6)$$

Además de discrepar en las expresiones matemáticas de ϵ_i , el potencial inhomogéneo introducido en los modelos de Anderson y Aubry-André exhiben diferente tipo de correlación $G(j) = \langle\langle \epsilon_i \epsilon_{i+j} \rangle\rangle$, donde $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ indica un promedio en el espacio y sobre diferentes realizaciones del desorden. Resultados analíticos [92] revelan las siguientes funciones de correlación:

$$\begin{aligned} G_A(i) &= \frac{W^2}{12} \delta_{i,0} \\ G_{AA}(i) &= \frac{\Delta^2 \cos(2\pi\beta i)}{2}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde los subíndices A y AA hacen referencia al modelo de Anderson y Aubry-André, respectivamente. De acuerdo a la Ec. (2.7), las energías en el sitio del modelo de Anderson no guardan una correlación estadística, es decir, es una señal de tipo “ruido blanco”. En contraste, G_{AA} muestra una correlación oscilante de largo alcance. Las expresiones matemáticas en la Ec. (2.7) pueden confirmarse de forma numérica, en la Fig. (2.1) se muestran los resultados analíticos y numéricos de G_A y G_{AA} como función de i . Para la parte numérica se consideró una red de tamaño $L = 144$ y 20 realizaciones de los números aleatorios entre $[-W, W]$ o ϕ dependiendo del modelo en cuestión. Como puede observarse, la concordancia entre los resultados analíticos y numéricos es bastante satisfactoria.

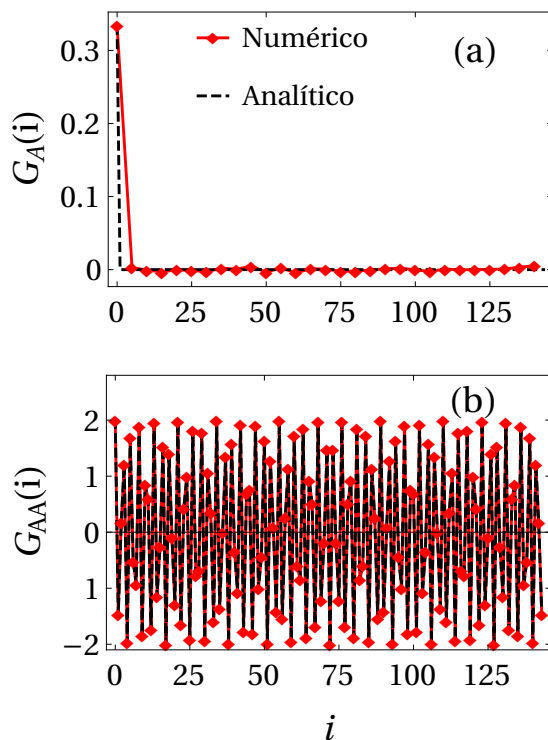


Figura 2.1: (a) Función de correlación de ϵ_i para el modelo de Anderson. (b) Función de correlación de ϵ_i para el modelo de Aubry-André. En ambos casos los resultados numéricos corresponden a $L = 144$ y un promedio sobre 20 realizaciones de desorden.

Otra manera de distinguir las diferencias entre el desorden y la cuasiperiodicidad de los modelos de Anderson y Aubry-André, respectivamente, es mediante esquemas de color en escala de grises. En la Fig. (2.2) se muestra dichos esquemas de color para una red con $L = 900$ sitios, con el objetivo de mejorar su visualización, el arreglo vectorial de ϵ_i con 900 entradas se dispuso en una matrix de 30×30 . La Fig. (2.2) permite apreciar de forma pictográfica la disparidad en las correlaciones de ϵ_i . Como es claro, en el modelo de AA se aprecia un patrón en la función de correlación, en el caso aleatorio no existe dicho patrón. Por esta razón, de forma estricta se dice que las energías ϵ_i del modelo de AA son un cuasidesorden y no un desorden como en el Hamiltoniano de Anderson.

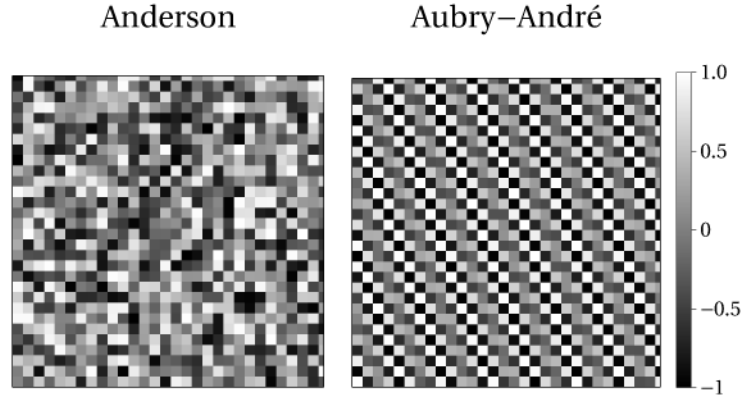


Figura 2.2: Valores de ϵ_i en escala de grises para el modelo de Anderson y el modelo de Aubry-André, se consideró una red de $L = 900$ sitios y una realización del potencial inhomogéneo para ambos modelos.

Por último, otra forma de advertir las disimilitudes entre el desorden y la cuasiperiodicidad es mediante histogramas de los valores de ϵ_i en una red. Para ello se consideró una red de tamaño $L = 987$ y se organizó los valores de ϵ_i en un histograma con 10 cajas. Como puede apreciarse de la Fig. (2.3), mientras que la disposición del potencial inhomogéneo en el modelo de Anderson se asemeja a una distribución uniforme, la cuasiperiodicidad tiende a favorecer los valores extremos del potencial.

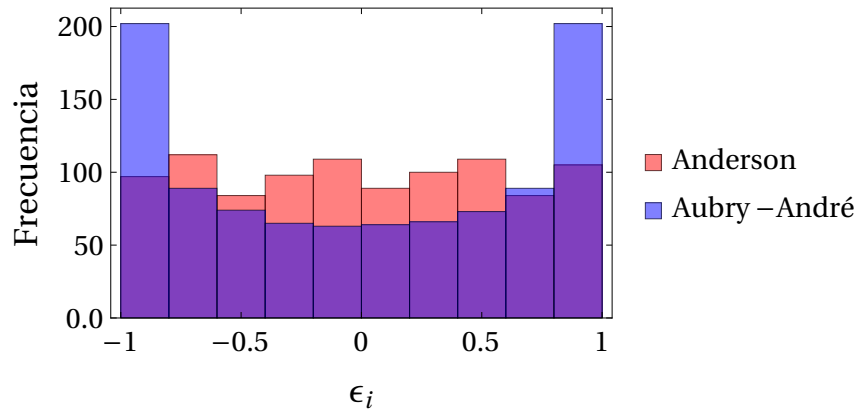


Figura 2.3: Histograma de los valores de ϵ_i en una red de tamaño $L = 987$, se consideró una realización del potencial inhomogéneo para ambos modelos.

En la siguiente subsección se describirá la manera de obtener numéricamente los eigenvalores y eigenvectores asociados al Hamiltoniano de Aubry-André.

2.1.2. Diagonalización numérica del modelo de Aubry-André

Para hallar la ecuación de Schrödinger $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ que genera el Hamiltoniano en la Ec. (2.2), se expande el ket de un estado cuántico $|\psi\rangle$ en términos de la base $|j\rangle$, tal y como se muestra a continuación:

$$|\psi\rangle = \sum_j \langle j|\psi\rangle |j\rangle = \sum_j \psi(j) |j\rangle, \quad (2.8)$$

donde los coeficientes $\psi(j)$ representan la amplitud de probabilidad de ocupación del sitio j . Al sustituir la expresión de arriba en $\langle j|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle j|\psi\rangle$ con \hat{H} en la Ec. (2.2), se obtiene lo siguiente:

$$-J[\psi(j+1) + \psi(j-1)] + \Delta \cos(2\pi\beta j + \phi)\psi(j) = E\psi(j). \quad (2.9)$$

La física que exhibe la Ec. (2.9) depende de un único parámetro el cual, como es usual en la literatura, es el cociente entre la magnitud del cuasidesorden y la del tunelaje a primeros vecinos, es decir, Δ/J . En congruencia con esto último, se elige como escala de energía al valor del tunelaje a primeros vecinos, por consiguiente, todas las cantidades de interés con unidades de energía estarán dadas con respecto a J . Para una red de L sitios, la Ec. (2.9) puede reescribirse en notación matricial como $\mathbf{H}\vec{\psi} = E\vec{\psi}$ con $\vec{\psi} = (\psi(1) \cdots \psi(L))^T$ la representación vectorial del estado $|\psi\rangle$ y \mathbf{H} la matriz Hamiltoniana de tamaño $L \times L$:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \Delta/J \cos(2\pi\beta + \phi) & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & \Delta/J \cos(4\pi\beta + \phi) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ -1 & 0 & -1 & \Delta/J \cos(2L\pi\beta + \phi) \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Los valores -1 en la esquina inferior izquierda y esquina superior derecha de la matrix \mathbf{H} indican que se está considerando condiciones periódicas a la frontera, es decir, se resuelve una cadena circular cerrada y no una cadena abierta (ver Fig. (2.4)). El cálculo de los eigenvectores y eigenvalores de la matriz Hamiltoniana \mathbf{H} puede implementarse usando cualquier paquetería de diagonalización disponible.

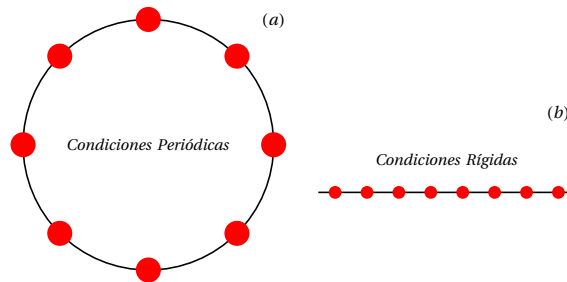


Figura 2.4: (a) Red unidimensional con condiciones periódicas a la frontera. (b) Red unidimensional con condiciones rígidas a la frontera. En ambos casos los círculos rojos representan los sitios de la red.

En la Fig. (2.5) se muestra en escala logarítmica la densidad de probabilidad por sitio para el estado base, que se obtiene al diagonalizar la matriz en la Ec. (2.10) para $\Delta/J = 1$ (azul) y $\Delta/J = 3$ (naranja). Se consideró un número de sitios de $L = 987$, una fase $\phi = \pi/5$ y $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$. Como puede apreciarse de la Fig. (2.5), los perfiles de densidad muestran comportamientos diferentes, uno de ellos se extiende sobre toda la red (azul), mientras que el otro se concentra en algunos pocos sitios (naranja). Se dice que el estado con $\Delta/J = 1$ está extendido en el espacio mientras que el perfil con $\Delta/J = 3$ está localizado.

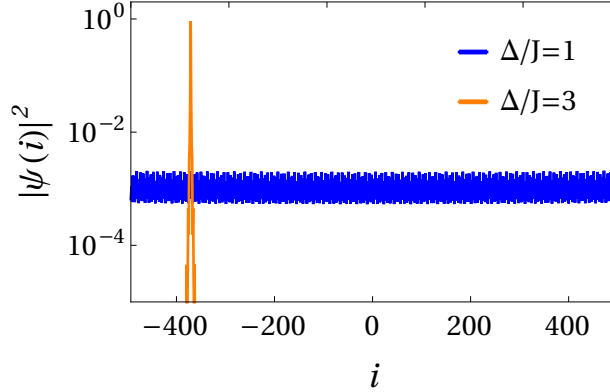


Figura 2.5: Densidad de probabilidad de una partícula en el estado base del Hamiltoniano de Aubry-André versus el índice de sitio. La amplitud del cuasidesorden es $\Delta/J = 1$ (azul) y $\Delta/J = 3$ (naranja).

En contraste con el modelo unidimensional de Anderson, en donde cualquier magnitud finita del desorden localiza los eigenestados del sistema, en el modelo de Aubry-André las eigenfunciones conservan la peculiaridad de ser extendidas para una amplitud de la modulación cuasiperiódica finita. Sin embargo, como puede advertirse de la Fig. (2.5), para $\Delta/J = 3$ el estado base está localizado. Esto sugiere, tal y como Aubry y André indicaron [77], la existencia de un valor crítico del cuasidesorden para el cual la transición extendido-localizado tiene lugar. Para determinar numéricamente la cuasiperiodicidad crítica Δ_c , es necesario introducir una cantidad que sence el grado de localización espacial de las funciones de onda. Es decir, una cantidad que sea análoga a un parámetro de orden en las transiciones de fase. Como se verá a continuación, la razón de participación inversa es el observable requerido para indagar la naturaleza espacial de las funciones de onda.

2.1.3. Razón de participación inversa

La razón de participación inversa o IPR (inverse participation ratio) por sus siglas en inglés, es una cantidad que se utiliza ampliamente en la literatura como indicador de la transición extendido-localizado. En términos simples, el IPR da una medida del inverso del número de sitios en la red donde una función de onda tiene una amplitud no despreciable. Desde el punto de vista matemático, el IPR asociado a un estado normalizado

$|\psi\rangle = \sum_j \psi(j)|j\rangle$ se define de la siguiente forma:

$$\text{IPR}_\psi = \sum_i |\psi(i)|^4. \quad (2.11)$$

Como puede verse de la Ec. (2.11), para una función de onda homogéneamente distribuida en toda la red $\psi(i) = 1/\sqrt{L}$, la razón de participación inversa toma el valor de $\text{IPR}_\psi = 1/L$, el cual se aproxima a cero en el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$. En contraste, para un estado localizado en el sitio i_0 , se tiene $\psi(i) = \delta_{i,i_0}$ lo que da lugar a un valor del IPR igual a la unidad. Esta peculiar característica del IPR lo hace idóneo para clasificar perfiles extendidos y localizados. Para exhibir el comportamiento cuantitativo de la razón de participación inversa para diferentes valores del cuasidesorden, en la Fig. (2.6-a) se muestra el valor del IPR del estado de mínima energía del modelo de AA como función de Δ/J . El tamaño de la red se fijó a $L = 987$, un parámetro $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ y la fase $\phi = \pi/5$. El subíndice en IPR_0 en la Fig. (2.6) hace referencia al estado base. Como puede apreciarse, el estado de mínima energía es extendido para $\Delta/J < 2$ y localizado en el espacio para una amplitud del cuasidesorden de $\Delta/J > 2$. Una forma de estimar numéricamente el valor crítico del cuasidesorden es mediante la evaluación del punto de inflexión de la razón de participación inversa. Como IPR_0 es una función monótona creciente de Δ , en el punto de inflexión su derivada $d\text{IPR}_0/d\Delta$ toma su valor máximo. En la Fig. (2.6-b) se muestra la derivada de IPR_0 con respecto a Δ , el cálculo numérico da como resultado $\Delta_c/J = 2.01 \pm 0.005$. La incertidumbre está asociada a la mitad de la longitud del grid numérico empleado para computar la derivada de la razón de participación inversa.

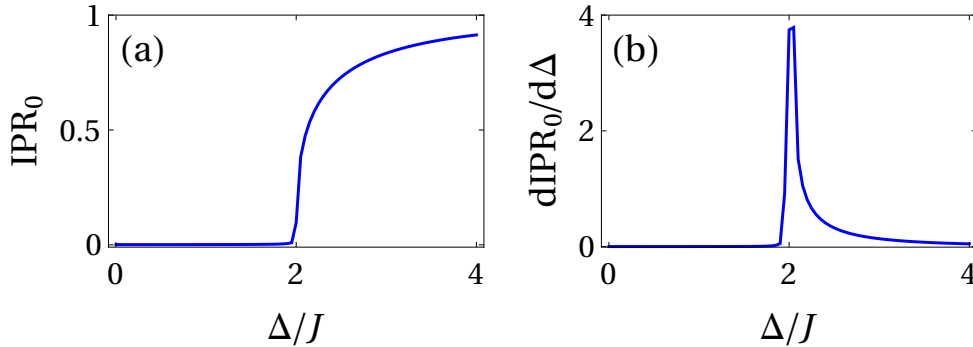


Figura 2.6: (a) Razón de participación inversa del estado de mínima energía del modelo de Aubry-André como función de Δ/J . (b) Derivada de IPR_0 como función Δ/J , el máximo se localiza en $\Delta_c/J = 2.01 \pm 0.005$. Los cálculos corresponden a $L = 987$, $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ y $\phi = \pi/5$.

Para concluir la discusión referente a la razón de participación inversa, en la Fig. (2.7) se muestra el cuasidesorden crítico Δ_c/J estimado mediante el punto de inflexión del IPR_0 , para la transición extendido-localizado del estado de mínima energía del modelo de AA como

función del tamaño L de la red. Como puede apreciarse en la Fig. (2.7), el error asociado al punto crítico disminuye a medida que el tamaño de la red incrementa.

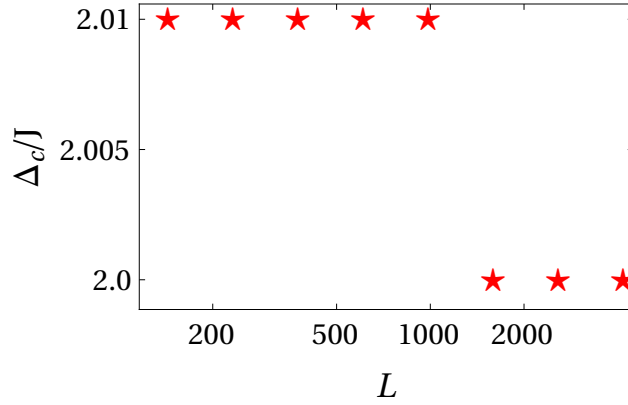


Figura 2.7: Desorden crítico de la transición extendido localizado para diferentes tamaños de red. Los cálculos corresponden a $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ y $\phi = \pi/5$.

2.1.4. Rol del parámetro β

En la descripción del Hamiltoniano de AA se mencionó brevemente que β es un número con cierto grado de incomensurabilidad. La razón por la cual debe ser de esta manera se explica a continuación. Si β fuera un número entero, es decir, $\beta = n$ con $n \in \mathbb{N}$, el potencial de Aubry-André $V_i = \Delta \cos(2\pi\beta i + \phi) = \Delta \cos(2\pi n i + \phi)$ es idéntico en cada sitio de la red, por consiguiente, la periodicidad de la red se mantiene intacta, el único efecto del potencial de AA es introducir un corrimiento en la energía de todos los eigenestados. Este caso pone de manifiesto que si se pretende romper la periodicidad de la red en cuestión, es necesario que el potencial V_i no se repita a lo largo del tamaño del sistema, esto es, $V_i \neq V_j \forall i, j \in [1, L]$. Existen diversas formas de satisfacer este último requerimiento, el más común en la literatura [91–93] consiste en fijar el tamaño de la red a $L = F_n$ y $\beta = F_{n-1}/F_n$, donde F_n es el n -ésimo elemento de la sucesión de Fibonacci. En el límite $n \rightarrow \infty$, el parámetro β converge al inverso del número áureo $\varphi = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$. En los cálculos numéricos, es usual elegir $\beta = \varphi$ cuando $L \geq F_{13} = 233$ ya que para $n \geq 13$ se cumple que $|F_{n-1}/F_n - \varphi| < 10^{-5}$, en consecuencia, las diferencias en los resultados al elegir $\beta = F_{n-1}/F_n$ con $n \geq 13$ o $\beta = \varphi$ son para todo propósito práctico despreciables. En los experimentos con átomos ultrafríos [17, 20, 94] $\beta = \lambda_2/\lambda_1$ (ver apéndice B) con λ_2 y λ_1 las longitudes de onda de los láseres involucrados para crear una red bicromática. Debido a la disponibilidad de láseres, no siempre es posible lograr que β sea el cociente entre dos números de Fibonacci. Sin embargo, mientras que β sea un número racional cuya expansión decimal sea lo suficientemente pronunciada como para asegurar que el potencial de Aubry-André no se repita en la longitud de interés, la transición extendido-localizado tendrá lugar [91, 93]. En lo subsiguiente, en todos los cálculos numéricos se asume $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$.

2.1.5. Rol de la fase aleatoria ϕ

Con el fin de posponer una discusión apropiada del rol de la fase aleatoria ϕ , la cual está presente en la modulación cuasiperiódica $V_i = \Delta \cos(2\pi\beta i + \phi)$, en los resultados previamente mostrados se ha empleado un único valor de la fase ($\phi = \pi/5$). Un valor dado de ϕ conduce a una realización particular de la modulación cuasiperiódica, es decir, a una distribución específica de las profundidades del potencial de AA. En la Fig. (2.8) se muestra el potencial resultante en la red para dos ángulos ϕ diferentes, como puede observarse, la posición de los mínimos del potencial no se ve alterada. Sin embargo, la profundidad de cada mínimo difiere.

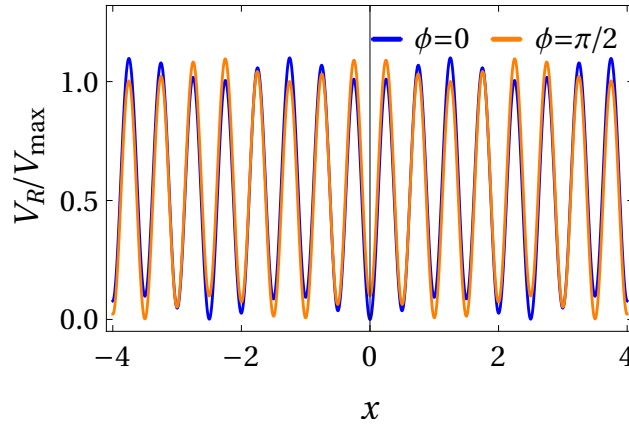


Figura 2.8: Potencial en la red V_R normalizado a su valor máximo V_{max} como función de la posición para dos valores de la fase ϕ . Puede observarse como la profundidad en energía de los mínimos del potencial se altera cuando ϕ se modifica. Se fijó una magnitud de la cuasiperiodicidad de $\Delta/J = 1$.

Para ilustrar el efecto del ángulo ϕ en la localización de los estados cuánticos, en la Fig. (2.9) se muestra el módulo cuadrado de la función de onda del estado de mínima energía del modelo de AA para dos fases ϕ distintas, la magnitud del cuasidesorden es $\Delta/J = 2.5$. Como puede advertirse ambos perfiles están localizados, en congruencia con el hecho que la transición extendido-localizado ocurre en $\Delta_c/J = 2$, aunque difieren en el sitio en donde alcanzan su máximo. Esto se debe a que el punto en donde el potencial de AA toma su valor mínimo se modifica cuando el ángulo ϕ cambia.

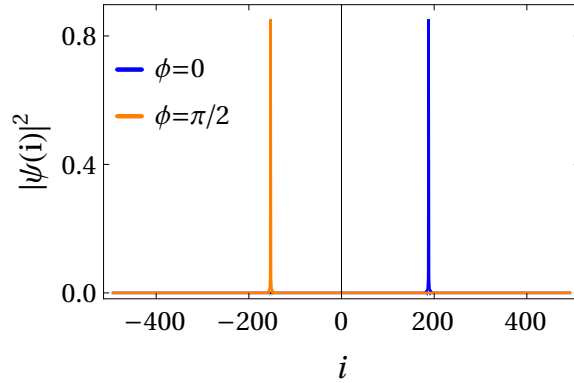


Figura 2.9: Densidad de probabilidad del estado base del modelo de Aubry-André para dos diferentes ángulos ϕ . Se fijó una magnitud de la cuasiperiodicidad de $\Delta/J = 2.5$ y un tamaño de red $L = 987$.

Cuando los cálculos numéricos lo permiten, es recomendable promediar el valor de los observables evaluados sobre distintas fases ϕ , esto con el objetivo de extraer los principales efectos del cuasidesorden independientemente de como se distribuya en la red. El número de realizaciones dependerá de que tan susceptible es el observable en cuestión a la distribución espacial del cuasidesorden. Por lo general, los observables dinámicos son más vulnerables a depender de la fase ϕ en comparación de observables estacionarios, no existe una demostración formal de este último enunciado pero es en cierta forma intuitivo, puesto que, en la difusión de una partícula, esta va explorando las regiones de la red como función del tiempo. De igual forma, se conoce que el tamaño de la red influye en el número de realizaciones de ϕ necesarias para conseguir resultados confiables. A medida que L disminuye el número de realizaciones incrementa. Para redes unidimensionales suficientemente grandes $L \gg 10^2$ se puede omitir el promedio sobre distintas realizaciones. Sin embargo, siempre es recomendable verificar el rol de ϕ para cada problema específico.

2.1.6. Ausencia de borde de movilidad

Si bien hasta el momento se han investigado los efectos del cuasidesorden en el estado base del modelo de Aubry-André, nada nos impide extender el análisis al resto de los eigenestados. En la Fig. (2.10) se ilustra el valor del IPR como función de la cuasiperiodicidad para todos los eigenestados que resultan de diagonalizar el Hamiltoniano de AA. La línea roja discontinua indica el cuasidesorden crítico de la transición metal-aislante de Anderson.

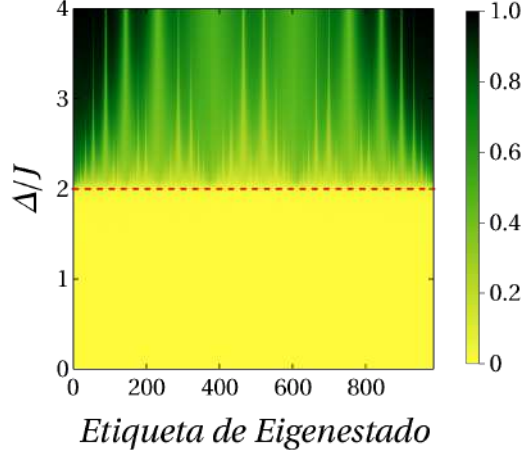


Figura 2.10: Razón de participación inversa de todos los eigenestados del modelo de Aubry-André como función de Δ/J . El número de sitios de la red es $L = 987$. Se promedió sobre 20 realizaciones de la fase ϕ . La línea roja discontinua indica el desorden crítico de la transición extendido-localizado.

La Fig. (2.10) pone de manifiesto que en el modelo de Aubry-André todos los eigenestados son extendidos para $\Delta/J < 2$ y todos son localizados para $\Delta/J > 2$. Es decir, para un valor dado de Δ/J no existe coexistencia entre estados extendidos y localizados. A esta característica del modelo de Aubry-André se le conoce como ausencia de borde de movilidad. Como se verá más adelante, en las redes cuasiperiódicas unidimensionales, los bordes de movilidad pueden emerger cuando el tunelaje de las partículas se extiende a segundos o más vecinos. En particular, es de interés de esta tesis el caso en el cual la amplitud de tunelaje entre los sitio de la red sigue una ley de potencia decayente.

2.1.7. Localización exponencial

Similar a la localización de Anderson [3], en el modelo de Aubry-André [77], los eigenestados están exponencialmente localizados en el espacio, es decir, el perfil de densidad tiene la siguiente forma:

$$|\psi(x)|^2 \sim e^{-x/\xi}, \quad (2.12)$$

donde ξ es la longitud de localización. En la Fig. (2.11) se muestra, en escala logarítmica en el eje de las ordenadas, el módulo cuadrado del estado de mínima energía del modelo de AA para $\Delta/J = 2.5$ y $\phi = \pi/17$, la línea discontinua de color negro corresponde al decaimiento exponencial del perfil.

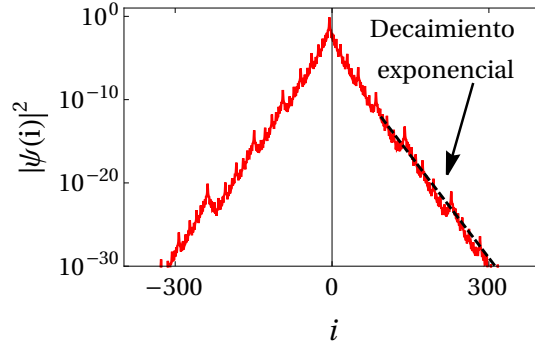


Figura 2.11: Densidad de probabilidad del estado de mínima energía del modelo de AA. El valor del cuasidesorden es $\Delta/J = 2.5$ mientras que la fase aleatoria se fijó a $\phi = \pi/17$. La línea discontinua de color negro muestra el decaimiento exponencial del perfil.

Los trabajos de D. J. Thouless [84, 85] mostraron que la longitud de localización ξ en el modelo de Aubry-André, es independiente de la energía del estado y varía como función de Δ de la siguiente forma:

$$\frac{a}{\xi} = \ln \left(\frac{\Delta}{2J} \right), \quad (2.13)$$

siendo a la constante de red. Los pasos para obtener numéricamente la longitud de localización de un eigenestado ψ fueron los siguientes: primero se ubicó el índice de sitio i_0 en donde el módulo cuadrado de ψ toma su máximo valor, posteriormente se llevó a cabo un ajuste lineal $b_0|i - i_0| + b_1$ del logaritmo natural de $|\psi|^2$. Haciendo este procedimiento se identifica el inverso negativo de la pendiente del ajuste como la longitud de localización, es decir, $\xi = -1/b_0$.

En la Fig. (2.12) se muestra la cantidad ξ como función de la magnitud del cuasidesorden Δ/J para el estado de mínima energía, la curva de color azul corresponde al resultado analítico en la Ec. (2.13), mientras que, de color rojo se muestra el resultado de haber realizado el ajuste mencionado anteriormente para una red de tamaño $L = 987$. La región de rojo claro que rodea a la curva numérica corresponde al error asociado a 20 realizaciones aleatorias de ϕ . Como puede observarse, cerca de la transición extendido-localizado $\Delta_c/J = 2$, el resultado exacto y numérico difieren considerablemente, esto se debe a que cerca del punto crítico los efectos de tamaño finito se intensifican. Los errores de tamaño finito pueden reducirse para valores de L más grande. Sin embargo, una red finita no reproducirá la divergencia de la longitud de localización. Para $\Delta/J > 2.8$ el cálculo numérico de ξ converge razonablemente al resultado de Thouless.

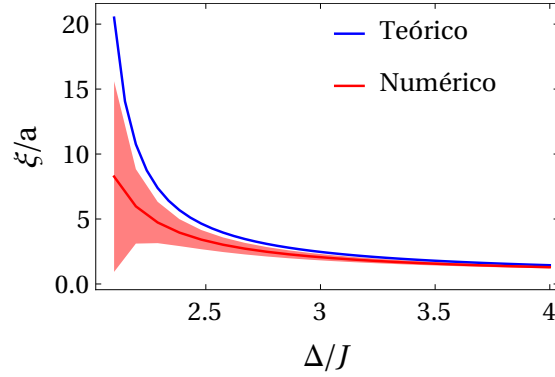


Figura 2.12: Longitud de localización ξ como función de Δ/J . La curva azul corresponde al resultado analítico en la Ec. (2.13) mientras la curva roja está asociada al cálculo numérico. La región de rojo claro que rodea a la curva numérica corresponde al error asociado a 20 realizaciones aleatorias de ϕ .

2.1.8. Dimensión fractal

Hasta el momento se ha mostrado que el modelo de Aubry-André exhibe estados extendidos para $\Delta/J < 2$ y estados localizados cuando $\Delta/J > 2$. Sin embargo, queda inconclusa la naturaleza espacial de los eigenestados en el punto de transición $\Delta_c/J = 2$. Para responder esta incógnita es necesario introducir un parámetro abstracto que lleva como nombre dimensión fractal y que se denotará como D_q . Esta cantidad es un exponente que cuantifica la razón entre el espacio que ocupa cierto objeto y el espacio disponible, a medida que este último crece en escala. En el problema de la localización, el objeto es el perfil de densidad de la partícula $|\psi|^2$ y el espacio es la red. De manera informal, si L_o es el número de sitios donde el estado ψ se extiende, entonces la dimensión fractal es una medida del cociente $D_q \propto L_o/L$ en el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$. La descripción anterior pone de manifiesto que la razón de participación inversa y la dimensión fractal deben estar de cierta forma relacionados. Para exhibir esta conexión es instructivo generalizar la definición del IPR, se define I_q como el q -ésimo momento de una función de onda, matemáticamente se tiene:

$$I_q = \sum_j |\psi(j)|^{2q} \quad (2.14)$$

Nótese que de acuerdo a la definición de arriba el IPR corresponde al segundo momento, es decir, $q = 2$. La literatura establece que los momentos I_q escalan con el tamaño de la red como $I_q \propto L^{-D_q(q-1)}$ [81, 99]. Estados localizados están caracterizados por una dimensión fractal nula $D_q = 0$, estados extendidos cumplen con $D_q = 1$ y estados multifractales satisfacen $0 < D_q < 1$, es decir, las funciones localizadas llenan un conjunto de medida cero de la red, los extendidos ocupan toda la red y los estados multifractales tienen la propiedad de ocupar un número infinito de sitios, en el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$, pero manteniendo el cociente L_o/L estrictamente menor a la unidad. A este rasgo de los estados multifractales se le conoce

como subextensión porque ocupan siempre una fracción de los sitios de la red [4]. En la Fig. (2.13) se muestra la dimensión fractal D_2 del estado de mínima energía del Hamiltoniano de Aubry-André. Como puede apreciarse, $D_2 = 1$ para $\Delta/J < 2$, $D_2 = 0$ cuando $\Delta/J > 2$ y $D_2 \approx 0.22$ en $\Delta/J = 2$. En conclusión, el estado de mínima energía del modelo de AA en $\Delta/J = 2$ exhibe multifractalidad, esto es, no es ni extendido ni localizado. El análisis de la dimensión fractal de todos los eigenestados del Hamiltoniano de AA concluye que, no solo el estado base, sino todos los eigenestados en $\Delta/J = 2$ son multifractales [4].

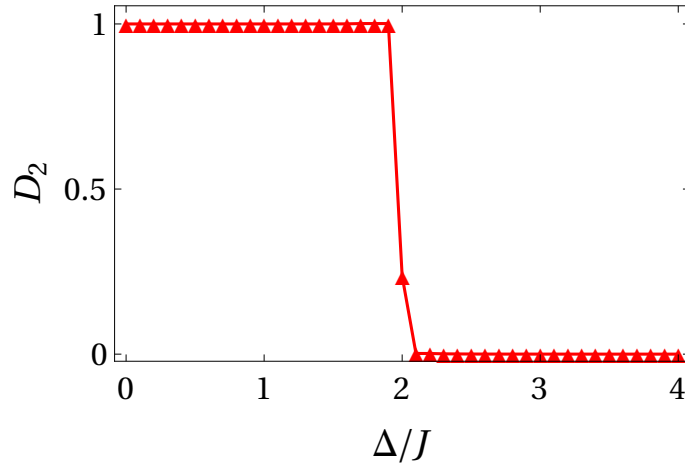


Figura 2.13: Dimensión fractal D_2 como función de la magnitud de la modulación cuasiperiódica Δ/J . Se promedió sobre 20 realizaciones del desorden, el error asociado a las realizaciones es despreciable.

2.1.9. Espectro de energía

En virtud de que muestra una estructura exótica tanto en los regímenes extendido, multifractal y localizado, el espectro de energía que resulta de diagonalizar el Hamiltoniano de Aubry-André como función del parámetro β ha sido intensamente estudiado [96–98]. Es importante enfatizar que, como se mencionó previamente, solo los valores de β con cierto grado de inconmensurabilidad conducen a estados localizados. Para los valores de la amplitud del cuasidesorden por encima y por debajo de la transición extendido-localizado, la organización del espectro de energía es completamente diferente de la asociada al punto crítico $\Delta_c/J = 2$, donde se exhibe la aclamada estructura de mariposa de Hofstadter [97]. En la Fig. (2.14) se muestra el espectro de energía del modelo de AA como función de β para $\Delta/J = 1$ y $\Delta/J = 2$. El espectro de energía para el caso $\Delta/J = 2$ está en completa correspondencia con el que exhibe un electrón moviéndose en una red cuadrada en presencia de un campo magnético transversal [79].

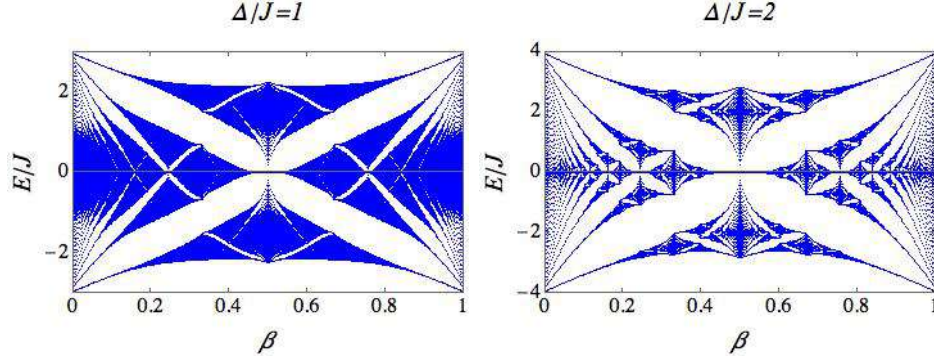


Figura 2.14: Espectro de energía del modelo de Aubry-André como función de β para dos diferentes magnitudes de la modulación cuasiperiódica. En el valor del cuasidesorden crítico $\Delta_c/J = 2$, el espectro da lugar a la muy popular mariposa de Hofstadter [97].

2.1.10. Desviación cuadrática media

La estructura espacial de los eigenestados de un sistema tiene repercusiones en las propiedades de transporte que exhibe. Tal y como Anderson señaló, una de las consecuencias de la localización exponencial de los eigenestados es la supresión de la difusión. Por esta razón, el seguimiento en el tiempo de ciertos observables pueden servir para sondear la presencia de estados extendidos o localizados. De hecho, los experimentos actuales miden observables dinámicos del sistema de interés para determinar sus propiedades de localización. En esta subsección se estudiará la dinámica que exhibe una partícula inicialmente localizada en el centro de la red. La evolución temporal del estado inicial $|\psi(t=0)\rangle$ está determinada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (2.15)$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano de Aubry-André. Para cuantificar la propagación de la función de onda inicial, se hizo siguiendo de la raíz cuadrada del desplazamiento medio (RMSD) por sus siglas en inglés, esta cantidad se define de la siguiente forma:

$$\sigma(t) = \left[\sum_i i^2 |\psi(i, t)|^2 \right]^{1/2}, \quad (2.16)$$

donde la suma corre sobre todos los sitios de la red en cuestión. El RMSD es una medida de la porción de la red que es explorada por la partícula durante un intervalo de tiempo dado. En la Fig. (2.15) se muestra la evolución temporal del RMSD para diferentes magnitudes del desorden. Se eligió escala logarítmica en el eje de las ordenadas para mejorar la visualización de las gráficas.

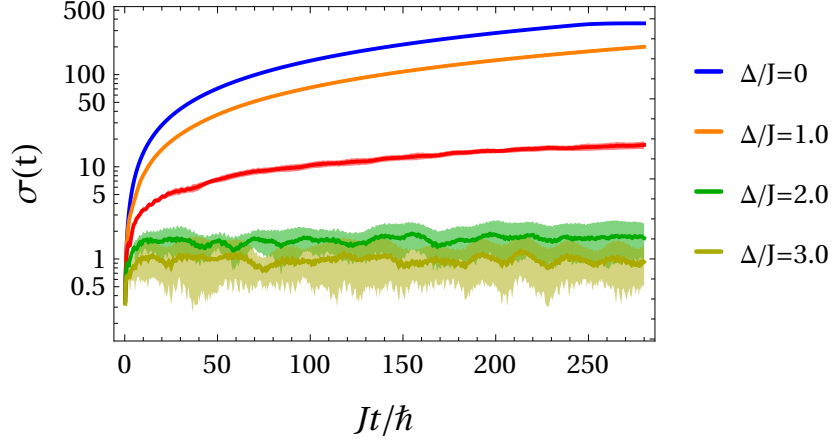


Figura 2.15: Raíz cuadrada del desplazamiento medio como función del tiempo para diferentes magnitudes del cuasidesorden. Las curvas mostradas son el resultado de promediar 20 fases aleatorias ϕ , la región sombreada alrededor de cada curva corresponde al error asociado a las diferentes realizaciones del cuasidesorden.

Como puede observarse de la Fig. (2.15), para el caso sin desorden, la partícula se propaga balísticamente, esto es, $\sigma(t) \propto t$. Debido a que la red es de tamaño finito, la evolución balística concluye cuando el RMSD alcanza su valor máximo ($\tau = Jt/\hbar \approx 280$). Por esta razón, la condición inicial se dejó evolucionar en el tiempo hasta que el RMSD alcanzó su máximo valor para el caso $\Delta/J = 0$. Cuando $\Delta/J = 3$ y $\Delta/J = 4$, la difusión de la condición inicial se ve suprimida, en acuerdo con la transición de localización. La dependencia en el tiempo de σ puede ajustarse a una ley de potencia en el tiempo $\sigma \propto t^\gamma$. En la Fig. (2.16) se muestra el valor del exponente γ como función del cuasidesorden Δ/J , el ajuste fue llevado a cabo usando las curvas promedio $\bar{\sigma}$ de la Fig. (2.15). De los resultado γ vs Δ/J puede identificarse los regímenes de difusión balística $\gamma = 1$, superdifusivo $1/2 < \gamma < 1$, subdifusivo $0 < \gamma < 1/2$, y localizado $\gamma = 0$.

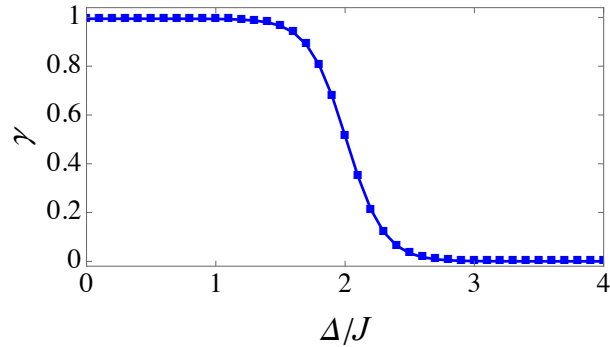


Figura 2.16: Valores del exponente γ de la dependencia en el tiempo del $\sigma \propto t^\gamma$ como función del cuasidesorden Δ/J .

2.1.11. Probabilidad de detección

Otra observable dinámica que permite discernir entre una fase localizada y extendida, y que también se puede medir en experimentos actuales es la probabilidad de detección. En palabras, esta cantidad mide la probabilidad a un tiempo dado de encontrar a una partícula en una región de la red, usualmente llamada región de vigilancia. Matemáticamente, se define a la probabilidad de detección de la siguiente forma:

$$d(t, R) = \sum_{i=-R/2}^{R/2} |\langle i | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle|^2, \quad (2.17)$$

donde $|i\rangle$ es el estado en el cual la partícula está localizada en el sitio i y \hat{H} es el Hamiltoniano de AA. De la definición en la Ec. (2.17) puede observarse que si $R = L$, la probabilidad de detección es, para todo tiempo t , igual a uno puesto que el área de vigilancia comprende toda la red. Por el contrario cuando $R < L$ se esperaría que $d(t, R) < 1$ para todo tiempo. Sin embargo, si los eigenestados del sistema están localizados, la partícula no podrá escapar de una vecindad centrada en su posición inicial y por ende la probabilidad de detección será igual a la unidad. En la Fig. (2.17) se muestra la evolución en el tiempo de $d(t, R = L/2)$ para diferentes valores del cuasidesorden. Como puede observarse, para los casos $\Delta/J = 0$ y $\Delta/J = 1.5$, la probabilidad de detección oscila alrededor de $1/2$, indicando una fase extendida ya que la región de vigilancia es igual a la mitad del tamaño de la red. Cuando $\Delta/J = 3$, el parámetro $d(t, R = L/2)$ es para todo propósito práctico igual a uno, en congruencia con el hecho que los estados de una partícula están localizados. El área sombreada alrededor de las curvas con $\Delta/J \neq 0$ representa la desviación estándar de 20 realizaciones de la fase ϕ .

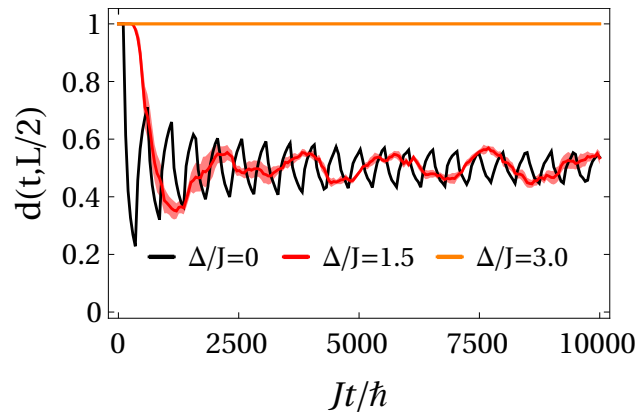


Figura 2.17: Probabilidad de detección como función del tiempo. El estado inicial corresponde a una partícula inicialmente localizada en el centro de la red. El tamaño del sistema es $L = 987$, al área sombreada alrededor de cada curva corresponde al error asociado a 20 realizaciones del ángulo ϕ .

Para condensar y suavizar la evolución temporal de la probabilidad de detección es útil calcular el valor asintótico de su promedio en el tiempo, esta cantidad se define de la siguiente manera:

$$\mathcal{D}(R) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' d(t', R) \quad (2.18)$$

En la Fig. (2.18) se ilustra el valor asintótico de la probabilidad de detección como función del cuasidesorden. Como puede observarse, $\mathcal{D}(L/2) \approx 0.5$ para $\Delta/J < 2$, reflejando el hecho que la partícula está homogéneamente distribuida en toda la red. Sin embargo, para $\Delta/J > 2$, el valor asintótico de la probabilidad de detección toma valores cercanos a la unidad, por ende la partícula es incapaz de abandonar el área de vigilancia.

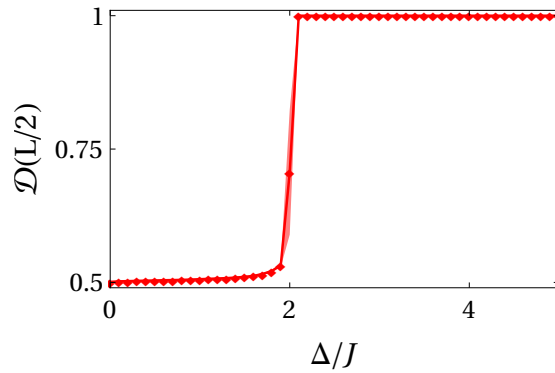


Figura 2.18: Valor asintótico de la probabilidad de detección como función de Δ/J . El tamaño del sistema es $L = 987$, se promedió sobre 20 realizaciones del ángulo ϕ .

2.1.12. Desbalance

Para finalizar el estudio de observables dinámicas, se examinó el comportamiento de la desbalance o imbalance, por su nombre en inglés, en la transición extendido-localizado. Este parámetro está definido de la siguiente forma:

$$I(t) = \frac{n_p(t) - n_i(t)}{n_p(t) + n_i(t)}, \quad (2.19)$$

donde $n_p(t) = \sum_{i \in \text{par}} |\psi(i, t)|^2$ es la densidad de probabilidad en sitios pares, mientras que $n_i(t) = \sum_{i \in \text{impar}} |\psi(i, t)|^2$ corresponde a la densidad de probabilidad en sitios impares. Como el nombre lo sugiere, $I(t)$ da una medida del desequilibrio en la densidad de sitios pares e impares de la red. Además de ser un observable medible, la ventaja más significativa de utilizar I , es que captura indicios de localización en sistemas sin y con interacciones [17,18,93]. Para mostrar el comportamiento dinámico del desbalance, se consideró la evolución en el tiempo de un patrón similar a una onda de densidad, en el cual sólo los sitios pares están inicialmente ocupados. Para obtener cálculos significativos, se impondrá el mismo número de

sitios pares e impares en la red. En lo subsecuente se considera $L = 1000$. En la Fig. (2.19) se muestra el parámetro I como función del tiempo para $\Delta/J = 4$. Es interesante notar que aún a tiempos muy largos el desbalance es distinto de cero, es decir, continúa existiendo una desproporción en la densidad de sitios pares e impares.

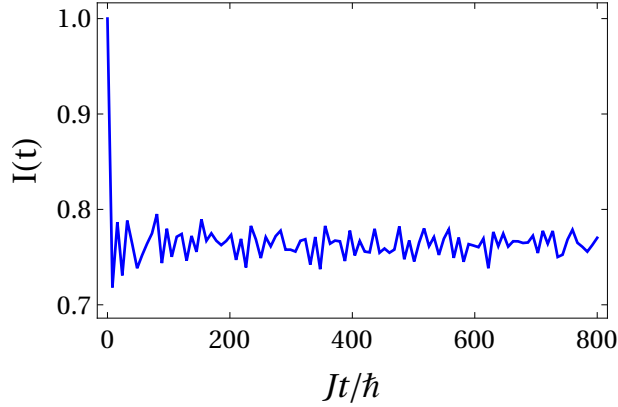


Figura 2.19: Evolución en el tiempo del desbalance para una red de tamaño $L = 1000$ y $\Delta/J = 4$.

Análogamente al caso de la probabilidad de detección, se puede evaluar el valor asintótico del imbalance de la siguiente manera:

$$I = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' \frac{n_e(t') - n_o(t')}{n_e(t') + n_o(t')} \quad (2.20)$$

En la Fig. (2.20) se muestra el valor I como función del cuasidesorden Δ/J , la curva corresponde a promediar 20 realizaciones de la fase ϕ . Ya que para $\Delta/J < 2$, todos los estados son extendidos, la partícula puede difundirse fácilmente a sitios cercanos, lo que lleva a un valor nulo del desbalance en unos pocos tiempos de tunelaje. La aniquilación del imbalance debe interpretarse como un indicio de ergodicidad, ya que el sistema pierde por completo cualquier información previa asociada al estado inicial. En contraste, para $\Delta/J > 2$, el parámetro I se estanca en un valor finito, que se vuelve más grande a medida que Δ/J incrementa. Esto sugiere que el sistema es no ergódico, ya que conserva cierta memoria de la configuración inicial. El hecho de que el sistema guarde información de su estado inicial a tiempos grandes ofrece la posibilidad de diseñar memorias cuánticas basadas en sistemas desordenados.

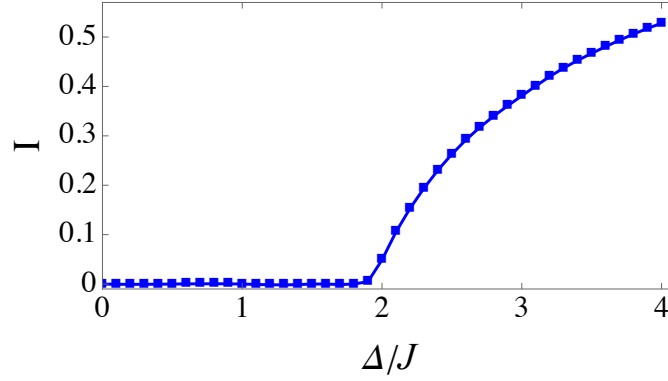


Figura 2.20: Valor asintótico del imbalance como función de Δ/J . El tamaño del sistema es $L = 1000$, se promedia sobre 20 realizaciones del ángulo ϕ .

2.2. Generalizando el modelo de Aubry-André

El Hamiltoniano de Aubry-André está caracterizado por tener un término de tunelaje a primeros vecinos por consiguiente, la movilidad de la partícula en la red se debe únicamente a procesos de la forma $|j\rangle \rightarrow |j+1\rangle$ o $|j\rangle \rightarrow |j-1\rangle$. Con el objetivo de enriquecer la dinámica de la partícula en la red, se puede extender el tunelaje a segundos o más vecinos. En particular, en las siguientes dos subsecciones, se consideran los casos de una red cuasiperiódica con tunelaje a segundos vecinos y una con tunelaje que sigue una ley de potencia decauyente. Se hará énfasis en cómo la introducción de saltos más allá de los primeros vecinos modifica el punto de transición metal-aislante de Anderson. Además, en las consecuencias que el tunelaje de ley de potencia tiene en la dinámica de una partícula en una red cuasiperiódica. Ambas generalizaciones, segundos vecinos y tunelaje de ley de potencia, son de interés actual de investigación y pueden realizarse en plataformas de simulación cuántica [25, 26, 81].

2.2.1. Tunelaje a segundos vecinos

Una extensión natural del Hamiltoniano de AA consiste en incluir el tunelaje a segundos vecinos, por convención, al modelo cuasiperiódico con tunelaje a primeros y segundos vecinos se le llama como Aubry-André Extendido ó EAA por sus siglas en inglés. El Hamiltoniano del modelo de EAA es el siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{EAA} = & -J \sum_i |j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j| - J_2 \sum_j |j\rangle\langle j+2| + |j+2\rangle\langle j| \\ & + \Delta \sum_j \cos(2\pi\beta i + \phi) |j\rangle\langle j|, \end{aligned} \quad (2.21)$$

donde J_2 es la magnitud del tunelaje a segundos vecinos. El tratamiento numérico del Hamiltoniano en la Ec. (2.21) es muy similar al modelo de AA por lo que no se entrará en

detalle. En la Fig. (2.21) se muestra la razón de participación inversa del estado de mínima energía del Hamiltoniano en la Ec. (2.21) para tres valores diferentes de J_2 .

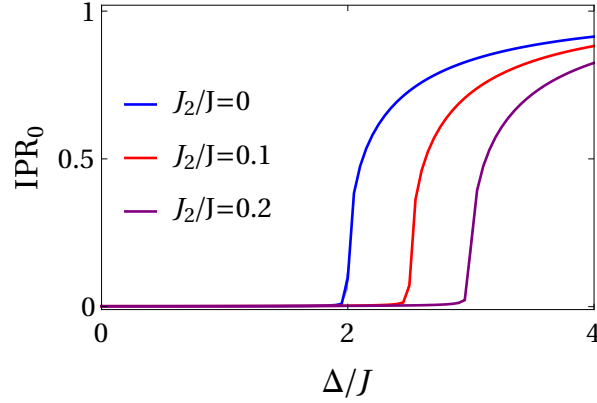


Figura 2.21: Razón de participación inversa del estado de mínima energía del Hamiltoniano en la Ec. (2.21) para $J_2/J = 0, 0.1$ y 0.2 . El tamaño del sistema es $L = 987$, las curvas corresponden al promedio de 20 realizaciones del ángulo ϕ .

Como puede observarse, la transición de localización del estado base se mueve a mayores magnitudes de la cuasiperiodicidad conforme J_2 incrementa. Este resultado es de cierta forma intuitivo puesto que, J_2 promueve la movilidad de la partícula y por ende es antagonista de la localización. En la Fig. (2.21) se muestra la variación del desorden crítico de la transición extendido-localizado del estado fundamental como función de J_2/J .

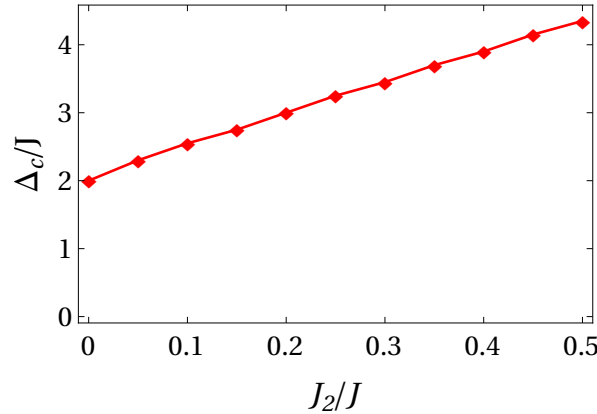


Figura 2.22: Desorden crítico de la transición extendido-localizado del estado de mínima energía del modelo de EAA como función de J_2/J . Se consideró $L = 987$ y 20 realizaciones de ϕ .

Los resultados numéricos muestran que el desorden crítico tiende a crecer linealmente con J_2 . En contraste con el Hamiltoniano de AA, el modelo de EAA no tiene una expresión

analítica para el valor de la modulación cuasiperiódica que conduzca a estados localizados. Para averiguar el efecto del cuasidesorden en la extensión espacial de todos los eigenestados del modelo de EAA, en la Fig. (2.23) se muestra el IPR del espectro de eigenfunciones del Hamiltoniano en la Ec. (2.21) para diferentes valores de la cuasiperiodicidad y el tunelaje a segundos vecinos.

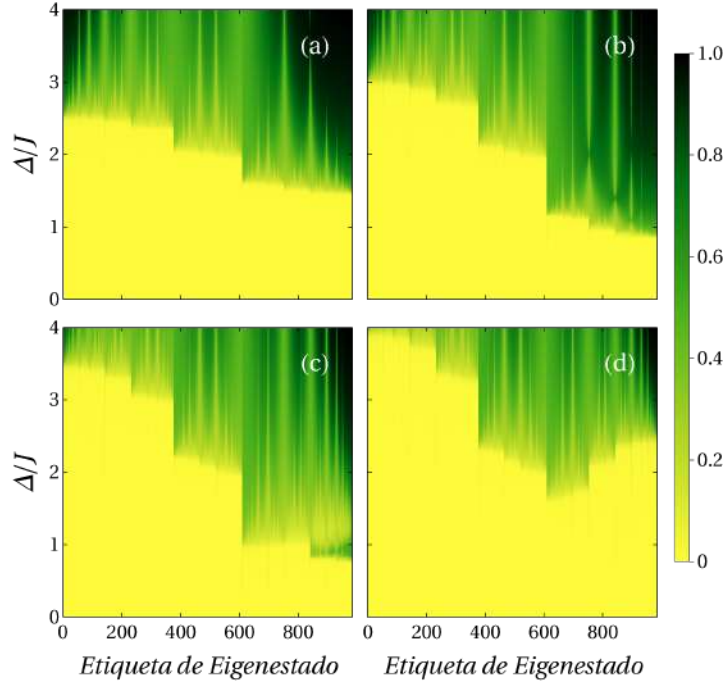


Figura 2.23: Razón de participación inversa de todos los eigenvectores del modelo de EAA, la magnitud del tunelaje a segundos vecinos se fijó a $J_2/J = 0.1$ (a), $J_2/J = 0.2$ (b), $J_2/J = 0.3$ (c) y $J_2/J = 0.4$ (d). Se promedió sobre 20 realizaciones de la fase aleatoria ϕ .

A diferencia del Hamiltoniano de Aubry-André, para el modelo de EAA existe coexistencia de estados extendidos y localizados para ciertos valores del cuasidesorden Δ/J . Es decir, incluir el tunelaje a segundos vecinos trae como consecuencia la presencia de bordes de movilidad.

2.2.2. Saltos de ley de potencia

La posibilidad de implementar interacciones de corto y largo alcance en plataformas de simulación cuántica ha coadyuvado al estudio del efecto en conjunto entre la cuasiperiodicidad y el tunelaje que sigue una ley de potencia. Al Hamiltoniano con una modulación cuasiperiódica idéntica al modelo de AA y una movilidad que sigue una ley de potencia decreciente, se le conoce como Aubry-André generalizado o GAA por sus siglas en inglés, la

expresión matemática del Hamiltoniano de GAA es la siguiente:

$$\hat{H}_{\text{GAA}} = -J \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{|i-j|^\alpha} |i\rangle \langle j| + \Delta \sum_j \cos(2\pi\beta j + \phi) |j\rangle \langle j|, \quad (2.22)$$

donde α es la potencia del tunelaje, en esta tesis se seguirá la convención de denominar, en sistemas unidimensionales, largo alcance cuando $\alpha < 1$ y corto alcance cuando $\alpha > 1$. En caso de que $\alpha \gg 1$, el Hamiltoniano en la Ec. (2.22) se aproxima al célebre modelo de Aubry-André. Como se mostró previamente, una manera de averiguar la naturaleza espacial de los eigenestados es a partir de la dinámica que exhibe una partícula inicialmente localizada en el centro de la red. En particular, para el Hamiltoniano en la Ec. (2.22) se computó la probabilidad de detección asintótica \mathcal{D} en la región $(-L/4, L/4)$ de la red. En la Fig. (2.24) se muestra un gráfico de densidad de color de \mathcal{D} como función de la potencia del tunelaje α y la magnitud del cuasidesorden Δ/J . Las curvas en color blanco que delimitan las regiones Localizado y Extendido corresponden al conjunto de parámetros $(\alpha, \Delta/J)$ en donde únicamente se halla estados localizados o extendidos, respectivamente. Una observación notable del la Fig. (2.24) es que la probabilidad de supervivencia asintótica pronostica una transición suave entre la peculiar estructura del modelo GAA al modelo de AA. Este enunciado se puede reconocer fácilmente al observar como, los contornos extendidos y localizados se aproximan al punto $\Delta/J = 2$ para $\alpha \gg 1$.

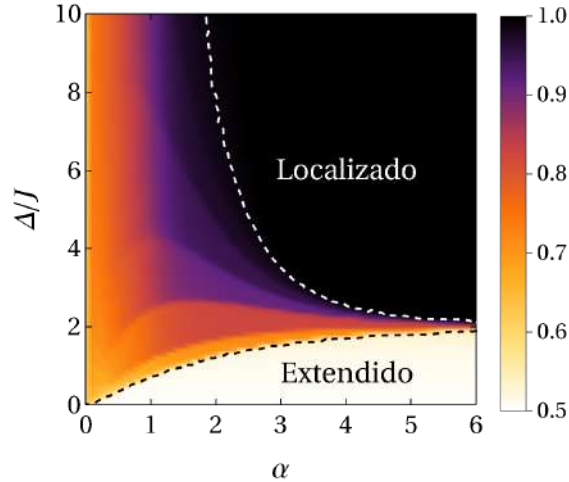


Figura 2.24: Probabilidad de detección asintótica en la región $(-L/4, L/4)$ como función de α y Δ/J . Se consideró un tamaño de red $L = 987$ y 100 realizaciones de la fase ϕ .

Por último, pero no menos importante, son los diferentes regímenes que se muestran por afuera de los contornos Extendido y Localizado. Para $\alpha \gtrsim 1$ existen curvas bien definidas donde la dinámica muestra un comportamiento bimodal, en otras palabras, la partícula escapa parcialmente y permanece parcialmente localizada dentro de la región de vigilancia. Este comportamiento peculiar señala la presencia de bordes de movilidad, es decir, coexistencia

entre estados extendidos, que promueven la difusión de la partícula, y estados localizados que causan la supresión de movilidad. Para los saltos de largo alcance $\alpha < 1$, la probabilidad de supervivencia asintótica exhibe un cambio abrupto que trae como resultado una delocalización de la partícula. Esta modificación del transporte está asociado a la presencia de estados multifractales [81]. A diferencia de los modelos con tunelaje a primeros vecinos, en donde los eigenestados muestran una localización exponencial, un cuasicristal con tunelaje de ley de potencia exhibe estados localizados con decaimiento algebraico $|\psi|^2 \propto |i - i_0|^{-\gamma}$, donde i_0 es el centro de localización. Modelos con desorden no diagonal también exhiben localización algebraica [99]. Estudios recientes sugieren que dependiendo del valor del exponente de decaimiento, los estados localizados algebraicamente pueden ser conductores o aislantes en el límite termodinámico [100]. Por esta razón, determinar el tipo y exponente de decaimiento en los eigenestados de sistemas localizados es de crucial importancia. En la Fig. (2.25) se ilustra, en doble escala logarítmica, el estado de mínima energía para diferentes valores de α , el valor de la modulación cuasiperiódica se fijó a $\Delta/J = 4$. Usando flechas de color negro se indica la potencia del decaimiento $|i - i_0|^{-\gamma}$, como puede observarse, son los valores extremales o las alas del perfil que se ajustan a un decaimiento algebraico.

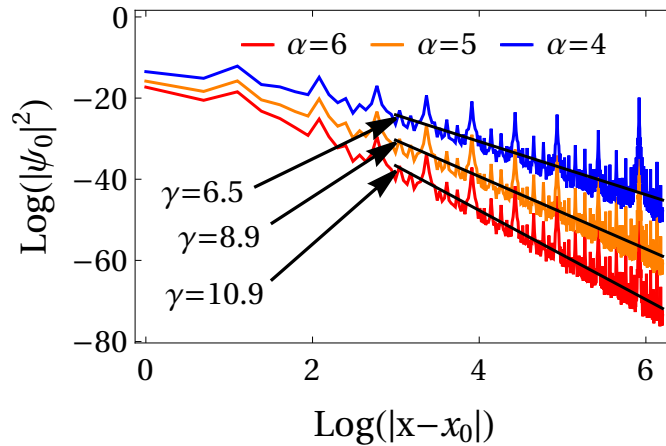


Figura 2.25: Decaimiento algebraico del estado de mínima energía del modelo de GAA para diferentes potencias de tunelaje. Se consideró $L = 987$ y una magnitud de la modulación cuasiperiódica de $\Delta/J = 4$.

2.3. Conclusiones

En este capítulo se introdujo el célebre modelo de Aubry-André, el cual consiste en una modulación cuasiperiódica y un tunelaje a primeros vecinos, y sus principales extensiones que incluyen una movilidad a segundos vecinos o tunelaje que sigue una ley de potencia $1/r^\alpha$. Para este propósito se presentó un estudio completo y detallado de las propiedades estacionarias y dinámicas que permiten caracterizar la transición de localización en función de la

amplitud de la cuasiperiodicidad. En particular, se empleó la razón de participación inversa para determinar el cuasidesorden crítico y la dimensión fractal para examinar la naturaleza espacial de los eigenestados del modelo de AA. Ajustes numéricos posibilitaron el conocimiento de la longitud de localización de los eigenestados y su comparación con los resultados analíticos de D. J. Thouless [84, 85]. El análisis del Hamiltoniano de Aubry-André concluyó con un estudio de la dinámica de dos estados iniciales diferentes, el monitoreo de observables dinámicas permiten discernir, en acuerdo con las propiedades estacionarias, que los eigenestados del modelo de AA sufren una transición espacial. En comparación con el modelo de Anderson (tunelaje a primeros vecinos desorden aleatorio), el Hamiltoniano de AA muestra la transición extendido-localizado para un valor finito del potencial inhomogéneo. Posterior al análisis del célebre modelo de AA, se mostró que al incluir tunelaje a segundos vecinos emerge un borde de movilidad, el cual está ausente en el Hamiltoniano de AA, y que la cantidad de estados localizados depende de la magnitud de la cuasiperiodicidad. Por último se examinó las consecuencias de la transición metal-aislante de Anderson cuando se incluye un tunelaje cuya amplitud decae como una ley de potencia, el seguimiento en el tiempo de la probabilidad de detección exhibió una dinámica coherente con la presencia de: estados localizados, extendidos, coexistencia extendidos-localizados y coexistencia extendidos-multifractales. Además se mostró que en cuasicristales con movilidad de ley de potencia los estados se localizan algebraicamente y no exponencialmente como en los modelos con movilidad de corto alcance. El modelo de Aubry-André describe de forma razonable gases fermiónicos o bosónicos no interactuantes confinados redes ópticas bicromáticas [17, 20]. Por otra parte, la física del Hamiltoniano de GAA puede ser sondeado en moléculas polares ancladas en redes ópticas bicromáticas profundas [24, 101], como también en iones atrapados en presencia de campo magnético [25, 26]. El modelo de AA puede extenderse al caso dos dimensional, en este escenario la modulación cuasiperiódica puede introducirse en cualquier dirección del plano $x - y$. Las propiedades de localización son muy similares al caso unidimensional cuando el potencial cuasiperiódico se introduce en direcciones perpendiculares. Sin embargo, cuando este no es el caso emerge estados parcialmente extendidos para modulaciones cuasiperiódicas grandes [102]. Los observables para caracterizar la localización presentados en este capítulo son de igual forma útil para el tratamiento en dos y tres dimensiones [103]. El estudio fue de importancia crucial para todo el trabajo desarrollado en esta tesis. Particularmente, posibilitó la generación de intuición física de resultados más complejos, por ejemplo aquellos donde la interacción no es despreciable.

Capítulo 3

Localización de pares de partículas

Si bien es cierto que el comportamiento de la materia involucra la participación de un gran número de partículas, existen diversos fenómenos cuánticos cuya comprensión subyace esencialmente en la física de una o dos partículas. Entre los principales ejemplos de estos fenómenos se encuentra la condensación de Bose-Einstein, la localización de Anderson, la superfluidez, la superconductividad, entre otros. Asociado al problema de la localización, el estudio de las propiedades de transporte de dos cuerpos moviéndose en medios desordenados ha sido un tema de intensa investigación [82, 104–110]. El objetivo principal de estos trabajos reside en profundizar en el entendimiento de la localización de muchos cuerpos, la cual, aun cuando se han realizado experimentos excepcionales [17, 18, 111, 112], continúa siendo un tema de amplio debate [78, 113–115]. En virtud de la posibilidad de implementar tunelaje que sigue una ley de potencia en plataformas de simulación cuántica, la comunidad científica se ha interesado en desentrañar no solo el efecto de las interacciones sino también el impacto simultáneo de interacciones y tunelaje de largo y corto alcance en el transporte de sistemas desordenados [37, 116–119]. En este capítulo se abordará el estudio de la localización de dos partículas moviéndose en redes cuasiperiódicas con tunelaje que sigue una ley de potencia. En particular, primero se analizará la dinámica de dos bosones de núcleo duro en el régimen de altas energías en el que las partículas pueden formar un estado ligado tipo dímero. Posteriormente, se determinará la existencia de la transición de localización del estado de mínima energía de un par de partículas bosónicas. Ambos estudios ponen de manifiesto la relevancia de la formación de estados ligados en las propiedades de transporte de redes con desorden espacial.

3.1. Bosones de núcleo duro en una red cuasiperiódica con tunelaje de ley de potencia

Como punto de partida, se considera dos bosones de núcleo duro moviéndose en una red cuasiperiódica unidimensional con tunelaje que sigue el inverso de una ley de potencias. El

Hamiltoniano que describe a este sistema físico es el siguiente:

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{|i-j|^\alpha} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \varphi) \hat{n}_i + U \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j, \quad (3.1)$$

donde \hat{b}_i (\hat{b}_i^\dagger) es el operador bosónico de aniquilación (creación) en el sitio i , $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ es el operador de número correspondiente, J es la amplitud de tunelaje entre primeros vecinos y U es la magnitud de la interacción a vecinos más cercanos. La cuasiperiodicidad en la red es introducida por el segundo término en la Ec. (3.1), como es usual, Δ modula la magnitud, $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ es el parámetro incommensurable, y ϕ es la fase aleatoria. La característica de núcleo duro implica que no se permite la ocupación doble en un sitio, es decir, $(\hat{b}_i^\dagger)^2 = 0$. Sin embargo, los operadores \hat{b}_i y \hat{b}_j^\dagger satisfacen las reglas de conmutación bosónicas $[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0$ siempre y cuando $i \neq j$. Es importante señalar que la restricción de ocupación doble surge de forma natural en sistemas donde sólo se permite una excitación por sitio. Por ejemplo, estados de Rydberg en átomos neutros [27], estados rotacionales en moléculas polares [24] y estados hiperfinos en iones atrapados [25]. Para obtener los eigenestados y energías propias del Hamiltoniano en la Ec. (3.1), se empleará el método de diagonalización exacta [120] para una red con $L = 62$ sitios con condiciones periódicas a la frontera $\hat{n}_{L+1} = \hat{n}_L$. Todos los resultados que se muestran en esta sección son producto de realizar un promedio sobre 400 realizaciones de la fase ϕ . La dimensión del espacio de Hilbert \mathcal{H} requerido para diagonalizar el Hamiltoniano en la Ec. (3.1) con $L = 62$ es $\text{Dim}(\mathcal{H}) = 1891$.

3.1.1. Formación y localización del par repulsivo

Para estudiar los efectos de la interacción entre partículas, la cuasiperiodicidad y el tunelaje de largo y corto alcance en las propiedades de transporte de dos cuerpos, se consideró la caminata cuántica de un par de bosones de núcleo duro inicialmente localizados en sitios adyacentes en el centro de la red. En la Fig. (3.1) se muestra una representación esquemática del la configuración al tiempo $t = 0$ de los bosones de núcleo duro.

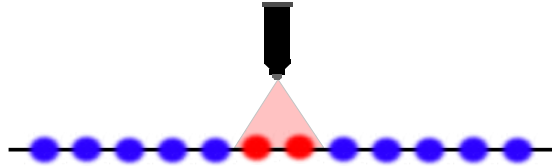


Figura 3.1: Representación esquemática de la condición inicial. Las esferas de color rojo indican la presencia de partículas, mientras que las azules son sitios de la red. La lámpara representa el láser que induce las excitaciones.

La evolución temporal del estado inicial $|\psi(t = 0)\rangle = \hat{b}_{L/2+1}^\dagger \hat{b}_{L/2}^\dagger |0\rangle$ fue computada por medio de los eigenestados $|\phi_m\rangle$ y sus correspondientes eigenenergías E_m obtenidas a través

de la diagonalización exacta del Hamiltoniano en la Ec. (3.1), por lo que la evolución del estado inicial será,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m C_m e^{-iE_m t/\hbar} |\phi_m\rangle, \quad (3.2)$$

donde $C_m = \langle \phi_m | \psi(0) \rangle$ es el traslape entre el estado inicial y el m -ésimo eigenestado de \hat{H} . Para ilustrar los hallazgos más distintivos en la propagación del par de partículas, se eligió un conjunto de parámetros $(U/J, \Delta/J)$ y tres valores diferentes de la potencia de tunelaje α para los cuales emergen efectos de transporte peculiares. Es importante enfatizar que todos los resultados son producto de promediar 400 realizaciones del cuasidesorden, es decir, de valores diferentes de ϕ . En la Fig. (3.2) se muestra la evolución temporal de la densidad por sitio $n_i(t) = \langle \psi(t) | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i | \psi(t) \rangle$ para un cuasidesorden nulo y finito cuando la magnitud de la interacción entre partículas es de $U/J = 8$.

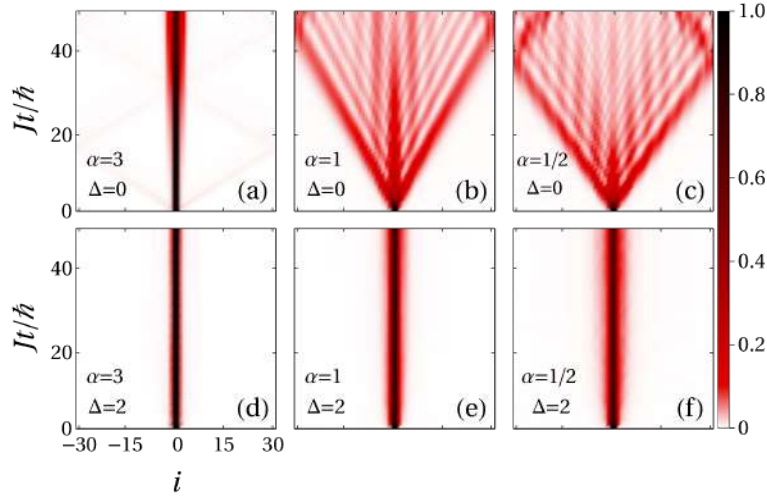


Figura 3.2: Evolución temporal de la distribución de densidad $n_i(t)$ de dos caminantes inicialmente en sitios adyacentes en el centro de la red. Cuasiperiodicidad y potencia del tunelaje se indica en cada panel. La interacción entre partículas es $U/J = 8$.

Un resultado interesante de las Figs. (3.2-a) y (3.2-c) es el frente de propagación en forma de cono que aparece incluso para el caso $\alpha = 1/2$. Este comportamiento es de cierta forma inesperado puesto que los tunelajes de largo alcance $\alpha < 1$ no conducen a una propagación balística en el caso de una partícula [121]. Como a continuación se explicará, este comportamiento es resultado de la formación de un dímero. Para interacciones repulsivas $U/J > 0$, los bosones pueden ligarse en un objeto compuesto llamado par ligado repulsivo [30, 119, 122, 123] o RPB (repulsive bound pair) por sus siglas en inglés. A diferencia de modelos en espacio continuo, donde los estados ligados surgen únicamente para interacciones atractivas, en una cadena de sitios los dímeros repulsivos aparecen como consecuencia de que el espectro de energía de dos partículas en una red está acotado por arriba [122, 124, 125]. En contraste con los estados ligados que surgen por efecto de una interacción atractiva, los dímeros repulsivos

no son el estado de mínima energía del par de partículas. De hecho, como establece la literatura [124, 125], la energía de los estados de pares repulsivos se encuentra por arriba de la energía de los estados no ligados. Tal y como se observa en la Fig. (3.3) el espectro de energía del Hamiltoniano en la Ec. (3.1) exhibe esta característica mencionada. La flecha de color negro en cada panel de la Fig. (3.3) indica la energía de los pares repulsivos. Es importante resaltar que debido a la restricción de núcleo duro el estado tipo dímero está compuesto por bosones cuya mínima separación relativa es una constante de red. La formación de RBP de partículas bosónicas fue observada y caracterizada por primera vez en el año 2006, en este experimento se confinó átomos de ^{87}Rb en una red óptica cuasi-unidimensional [122].

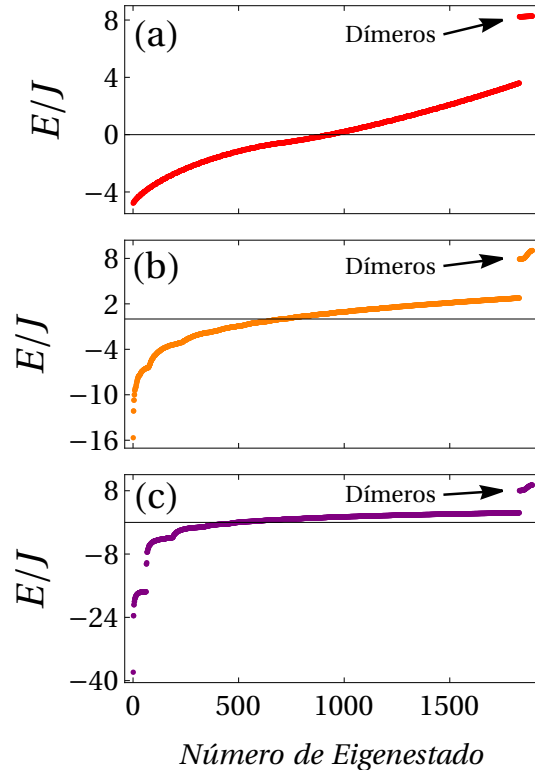


Figura 3.3: Espectro de energía del Hamiltoniano en Ec. (3.1) para $\Delta/J = 0$ y $U/J = 8$. Las figuras (a), (b) y (c) corresponden a una ley de potencia de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente.

El RPB tiene la peculiaridad de desplazarse en la red con ambas partículas en sitios adyacentes, es decir, los bosones de núcleo duro se propagan en pareja. Sin embargo, cuando la interacción es débil $U/J \ll 1$, tanto los estados tipo dímero como los no ligados tienen la característica de tener al par de partículas en sitios colindantes con probabilidad distinta de cero. Motivo por el cual, en el régimen débilmente interactuante, dos bosones que inicialmente están en sitios aledaños pueden desplazarse de manera independiente para tiempos posteriores. A medida que la interacción entre partículas se acentúa, la brecha de energía entre los estados ligados y no ligados se incrementa, lo cual origina estabilidad dinámica al dímero

puesto que, por conservación de energía, no puede disociarse convirtiendo la energía de interacción en energía cinética. En otras palabras, si inicialmente los bosones se sitúan en sitios próximos, se progarán en el espacio conservando esta configuración. Consecuentemente, cuando $U/J \gg 1$ los estados de Fock más relevantes que participan en la dinámica de los bosones son aquellos donde las partículas se encuentran en sitios adyacentes, es decir, aquellos estados de Fock que pertenecen al subespacio $\mathcal{H}_U = \{|n_1 \cdots n_L\rangle \in \mathcal{H} : n_i = n_{i+1} = 1 \forall i \in [1, L]\}$ con \mathcal{H} el espacio de Hilbert que contiene todos los estados de Fock con dos bosones de núcleo duro en una red de L sitios. Con la ayuda de un operador de proyección \hat{P} , es posible cuantificar la relevancia de los estados de \mathcal{H}_U en la dinámica del par de partículas. Una propuesta inmediata del operador de proyección es la siguiente:

$$\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}. \quad (3.3)$$

En la Fig. (3.4) se muestra el valor esperado del proyector \hat{P} , $P(t) = \langle \psi(t) | \hat{P} | \psi(t) \rangle$ como función del tiempo para $U/J = 8$. Los paneles superior e inferior corresponden a una magnitud del cuasidesorden de $\Delta/J = 0$ y $\Delta/J = 2$, respectivamente. Es importante recalcar que, como se mencionó al inicio de esta sección, la condición inicial es invariablemente $|\psi(t=0)\rangle = \hat{b}_{L/2+1}^\dagger \hat{b}_{L/2}^\dagger |0\rangle$, es decir, dos bosones de núcleo duro en sitios colindantes.

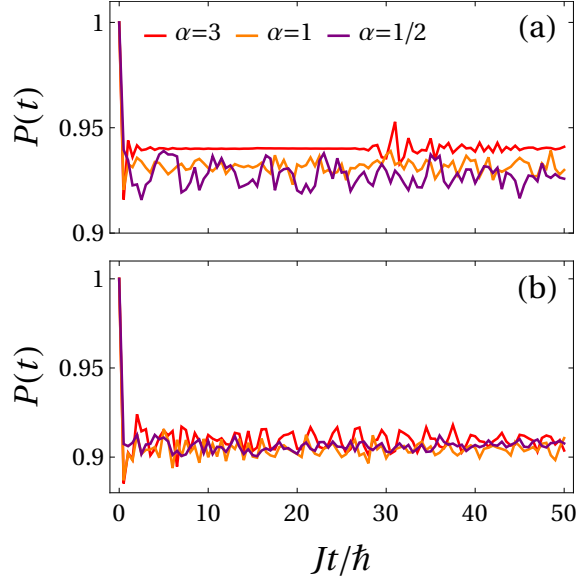


Figura 3.4: Evolución temporal del valor de esperado del operador de proyección $\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$. Panel (a) corresponde a $\Delta/J = 0$ y $U/J = 8$ mientras que panel (b) considera $\Delta/J = 2$ y $U/J = 8$. Los valores de α se indican en colores.

Dado que $P(t)$ toma valores cercanos a la unidad, es razonable afirmar que la dinámica de los caminantes puede describirse satisfactoriamente considerando únicamente los estados pertenecientes a \mathcal{H}_U . Tras establecer la relevancia del subespacio \mathcal{H}_U , para los tres valores de

α considerados, es conveniente introducir un Hamiltoniano efectivo \hat{H}_{eff} que actúa únicamente en los estados pertenecientes al subespacio \mathcal{H}_U . Como punto de partida, se reescribe el Hamiltoniano en la Ec. (3.1) como $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ donde:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= U \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} = U \hat{P} \\ \hat{V} &= -J \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{|i-j|^\alpha} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) \hat{n}_i.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Nótese que $\hat{H}_0|\Psi\rangle = U|\Psi\rangle$ con $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_U$, por consiguiente, el espectro de \hat{H}_0 en el subespacio \mathcal{H}_U está degenerado y es plausible que la interacción \hat{V}/U rompa esta degeneración. A primer orden en la perturbación \hat{V}/U se tiene la siguiente expresión para el Hamiltoniano efectivo [126]:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{P}(\hat{H}_0 + \hat{V})\hat{P}\tag{3.5}$$

Tras algo de álgebra extensa pero directa se obtiene el siguiente resultado para \hat{H}_{eff} a primer orden en la perturbación:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{J}{2^\alpha U} \sum_i \hat{n}_{i+1} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+2} + \hat{b}_{i+2}^\dagger \hat{b}_i) + \frac{2\Delta}{U} \cos(\pi\beta) \sum_i \cos(2\pi\beta i + \varphi) \hat{n}_i \hat{n}_{i+1},\tag{3.6}$$

donde se ha omitido un término constante puesto que es irrelevante para la dinámica. En términos de los operadores de los bosones de núcleo duro \hat{b}_i^\dagger y \hat{b}_i , la estructura del Hamiltoniano efectivo \hat{H}_{eff} es reminiscente a la del Hamiltoniano de Bose-Hubbard:

$$\hat{H}_{\text{BH}} = -J' \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + U' \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1),\tag{3.7}$$

con las distinciones que el tunelaje a primeros vecinos se ha remplazado por un tunelaje a segundos vecinos dependiente de la densidad y modulado por el coeficiente $J/(2^\alpha U)$, mientras que la interacción en el sitio se ha sustituido por una interacción a primeros vecinos que depende del sitio en cuestión y cuya amplitud es el resultado de sumar la contribución cuasiperiódica del modelo de AA en sitios adyacentes, es decir, $\cos[2\pi\beta i + \phi] + \cos[2\pi\beta(i+1) + \phi] = 2\cos(\pi\beta) \cos[2\pi\beta i + \varphi]$ con $\varphi = \phi + \pi\beta$. Curiosamente, el movimiento de los bosones elude el tunelaje que sigue una ley de potencia, el exponente α de la ley de potencia únicamente juega un papel en la cantidad $J/(2^\alpha U)$. Nótese que a medida que el tunelaje se vuelve de corto alcance $\alpha \gg 1$, el coeficiente $J/(2^\alpha U)$ se aproxima a cero. De hecho, para un modelo con tunelaje a primeros vecinos, este término está completamente ausente [104,124,125]. En contraste con estudios previos [104,105,124,125], la contribución dominante en la movilidad del dímero emerge de los procesos de salto a primer orden $|1_i\rangle|1_{i+1}\rangle \rightarrow |1_{i+2}\rangle|1_{i+1}\rangle$ y $|1_i\rangle|1_{i+1}\rangle \rightarrow |1_i\rangle|1_{i-1}\rangle$ (véase la representación esquemática en la Fig. (3.5). El Hamiltoniano efectivo en la Ec. (3.6) da una explicación sólida de los perfiles de propagación en forma de cono que se muestran en las Figs. (3.2-a) y (3.2-c), ya que los caminantes se comportan como un sólo objeto compuesto que se mueve en una red sin saltos de ley de

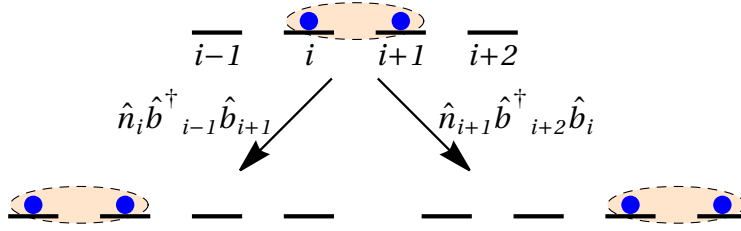


Figura 3.5: Representación esquemática de la movilidad del dímerno de acuerdo al Hamiltoniano efectivo de la Ec. (3.6).

potencia, lo cual, de acuerdo a lo reportado previamente, da lugar a conos de propagación [121].

En las Figs. (3.2-d) y (3.2-f) se observa una supresión del transporte de los bosones para $\Delta/J = 2$, como puede observarse de la Fig. (3.4-b), para este valor de la modulación cuasiperiódica, la dinámica de las partículas continúa concentrada en el subespacio \mathcal{H}_U , por ende, se puede sospechar que la supresión del transporte es debido a la localización de los eigenestados pertenecientes a \hat{H}_{eff} . Este último enunciado puede confirmarse mediante la evaluación de la razón de participación inversa de los eigenestados de \hat{H}_{eff} . Para un estado propio normalizado $|\phi_m\rangle$, su IPR se define de la siguiente manera:

$$\text{IPR}_m = \sum_{\{n\}} |\langle \{n\} | \phi_m \rangle|^4, \quad (3.8)$$

donde $|\{n\}\rangle$ es un estado ket de la base de Fock del subespacio \mathcal{H}_U . En la Fig. (3.6-a) y (3.6-c) se muestra el IPR de los eigenestados pertenecientes a \hat{H} y \hat{H}_{eff} (recuadro) en su base de Fock respectiva cuando $(U/J, \Delta/J) = (8, 2)$ para $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente. De la Fig. (3.6) se puede notar que una fracción de los estados de baja energía de \hat{H} no están localizados, mientras que sus estados propios del alta energía muestran una fuerte localización. Por el contrario, todos los eigenestados de \hat{H}_{eff} están localizados. Dado que, de manera efectiva, la dinámica del dímerno está descrita únicamente por los estados de \hat{H}_{eff} , su transporte se ve suprimido pese a que el Hamiltoniano principal \hat{H} posee estados extendidos.

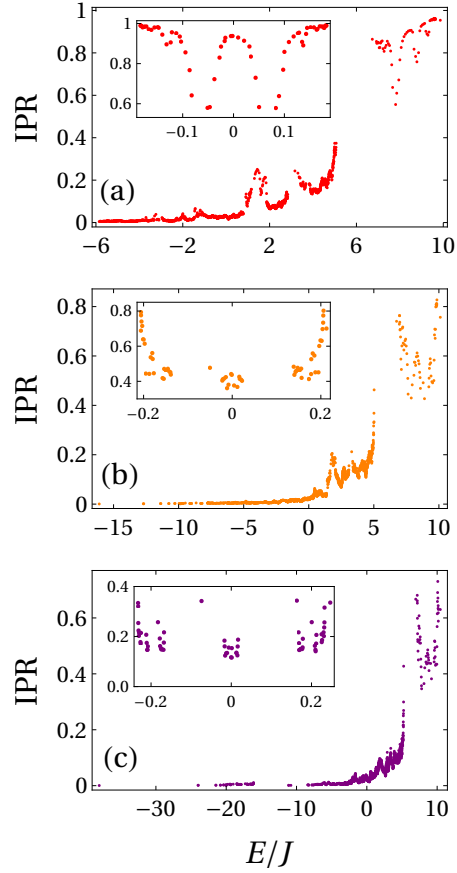


Figura 3.6: Razón de participación inversa de los eigenestados pertenecientes a ambos, \hat{H} y \hat{H}_{eff} (inset) para $(\Delta/J, U/J) = (2, 8)$. Figuras (a), (b) y (c) corresponde a una ley de potencial de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente.

Otra observable que nos permite reconocer el movimiento coherente de los caminantes es la correlación de dos partículas, la cual se define de la siguiente forma:

$$\Gamma_{i,j}(t) = \langle \psi(t) | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_i | \psi(t) \rangle. \quad (3.9)$$

La función de correlación de dos cuerpos proporciona información significativa sobre los efectos de la interacción entre partículas en la dinámica de los caminantes cuánticos [106, 110, 127, 128]. En la Fig. (3.7) se muestra $\Gamma_{i,j}(t)$ para un tiempo de $Jt/\hbar = 20$ para los valores de $(\Delta/J, U/J) = (0, 8)$, $(\Delta/J, U/J) = (2, 8)$ y los valores de la ley de potencial $\alpha = 3, 1$ y $1/2$. De acuerdo con la restricción de núcleo duro, la diagonal principal de la función de correlación toma un valor nulo $\Gamma_{ii} = 0$. Sin embargo, se puede notar que las contribuciones principales emergen de la diagonal superior e inferior de la diagonal principal, esto confirma la formación y el movimiento coherente del par. En particular, de acuerdo a las Figs. (3.7-b), (3.7-d) y (3.7-f) el dímero perdura, independientemente del valor de α , para una magnitud de la modulación cuasiperiódica de $\Delta/J = 2$. No obstante, para este valor del cuasidesorden,

el transporte del par repulsivo se suprime.

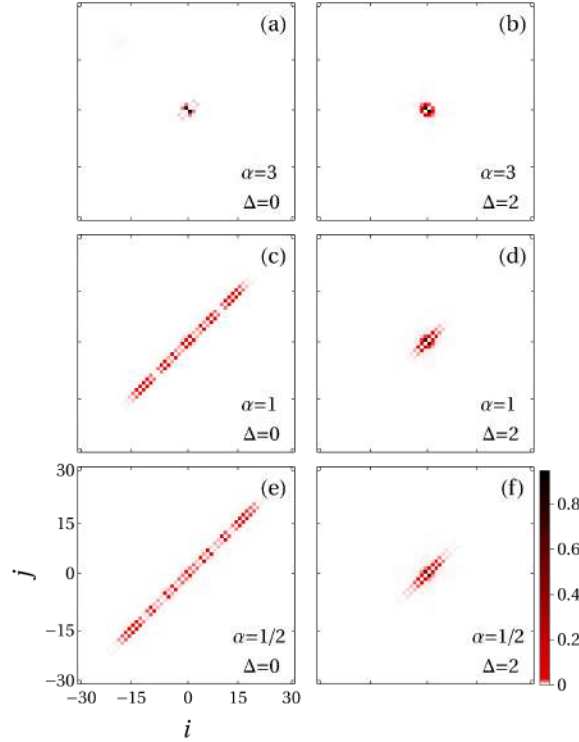


Figura 3.7: Función de correlación de dos partículas $\Gamma_{ij}(t)$ a un tiempo de $Jt/\hbar = 20$. El par de bosones de núcleo duro están inicialmente localizados en sitios adyacentes. El cuasidesorden y el valor de la ley de potencia del tunelaje se indican en cada panel. La interacción entre partículas es $U/J = 8$.

3.1.2. Disociación del dímero como mecanismo de delocalización

En la subsección anterior se mostró como el transporte del par de bosones de núcleo duro se efectúa de manera efectiva como un solo objeto compuesto. Asimismo, se exhibió cómo la modulación cuasiperiódica inhibe el transporte de los bosones, en congruencia con la imagen habitual en la que el cuasidesorden siempre suprime la movilidad de las partículas. En esta subsección se estudiará la propagación del par de bosones cuando la magnitud del cuasidesorden compite con la magnitud de la interacción $\Delta/J \sim U/J$. Es importante tener presente que la condición inicial es la misma considerada en la subsección anterior $|\psi(t=0)\rangle = \hat{b}_{L/2+1}^\dagger \hat{b}_{L/2}^\dagger |0\rangle$ (ver Fig. (3.1)). En la Fig. (3.8) se ilustra la evolución en el tiempo del valor esperado de la densidad de una partícula $n_i(t) = \langle \psi(t) | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i | \psi(t) \rangle$ para la pareja de valores $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$, $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$ y los tres valores de la potencia del tunelaje previamente considerados $\alpha = 3, 1$ y $1/2$. Para el caso $\alpha = 3$, Figs. (3.8-a) y (3.8-d), la movilidad de los bosones es prácticamente nula, es decir, se pone en evidencia que

la interacción y la cuasiperiodicidad suprimen la difusión del par de partículas. Sorprendentemente, este no es el caso para $\alpha = 1$ y $\alpha = 1/2$, Figs. (3.8-b), (3.8-c), (3.8-e) y (3.8-f), ya que los perfiles de densidad logran expandirse a mayores distancias en comparación que el caso $\Delta/J = 2$ (ver Figs. (3.2-b), (3.2-c), (3.2-e) y (3.2-f)). Este resultado contradice la noción general de que el cuasidesorden siempre produce la supresión del transporte. El régimen de transporte estimulado por el cuasidesorden es uno de los resultados principales del trabajo de Tesis. En comparación con investigaciones recientes [129], el modelo expuesto no requiere de tunelaje todos con todos [130] para que se exhiba el transporte estimulado por desorden. Adicionalmente, se proporciona un mecanismo microscópico que explica la razón del transporte mejorado por el cuasidesorden.

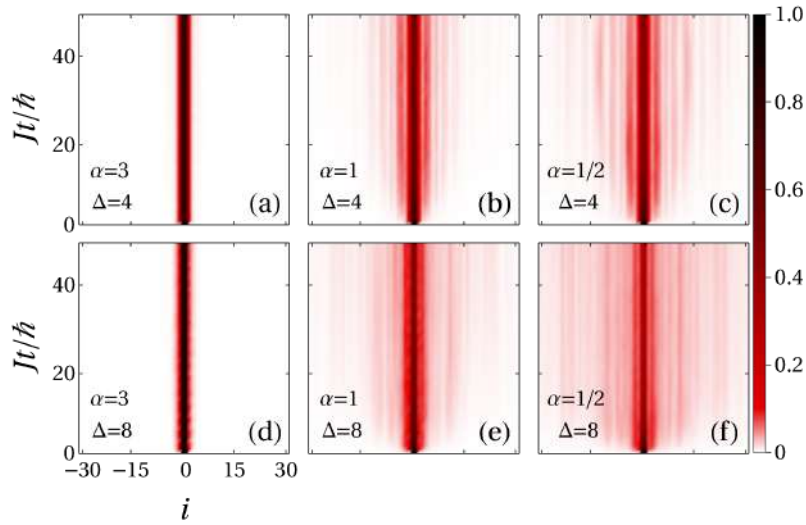


Figura 3.8: Evolución temporal de la distribución de densidad de una partícula $n_i(t)$ de dos bosones de núcleo duro que inicialmente ocupaban sitios adyacentes en el centro de la red. El cuasidesorden y el valor de la ley de potencia del tunelaje se indican en cada panel. La interacción entre partículas para todos los paneles es de $U/J = 8$.

Para entender porque la cuasiperiodicidad restablece el transporte de los caminantes, es instructivo mostrar primero que la imagen de los caminantes moviéndose en par deja de ser válida. En la Fig. (3.9-a) se muestra el valor esperado del operador $\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$ cuando $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$ para $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, mientras que la Fig. (3.9-b) considera $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$ para los mismos valores de α . Nótese que ahora, la contribución de los estados de Fock pertenecientes a \mathcal{H}_U en la dinámica de las partículas es menos relevante que los casos exhibidos en la Fig. (3.4). De hecho, esto es más evidente para el caso $\Delta/J = 8$, donde el valor esperado de \hat{P} se desprecia rápidamente como función del tiempo. Por lo tanto, cuando el cuasidesorden compite con la interacción, el Hamiltoniano efectivo \hat{H}_{eff} ya no es adecuado para describir de manera apropiada la propagación de los bosones. En otras palabras la dinámica de las partículas deja de estar completamente concentrada en el subespacio \mathcal{H}_U .

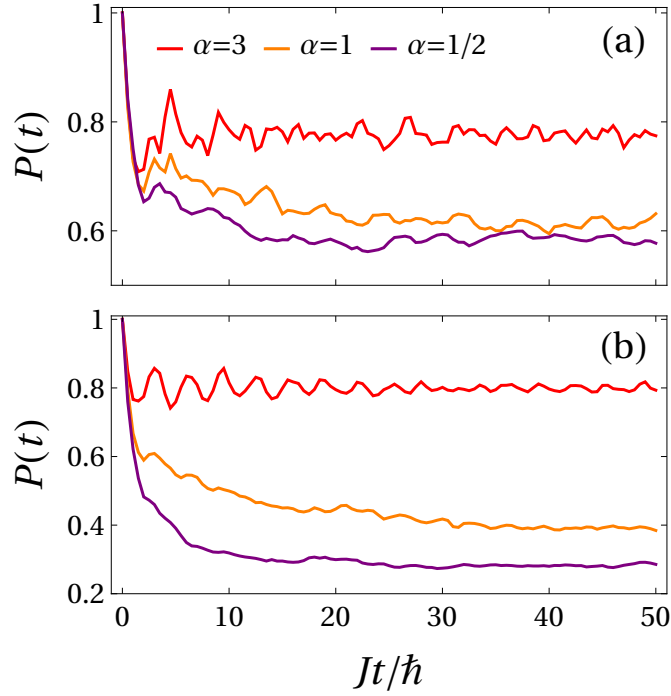


Figura 3.9: Evolución temporal del valor esperado del operador $\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$. Panel (a) corresponde a $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$, mientras que el panel (b) considera $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$. El valor de la potencia del tunelaje es $\alpha = 3$ (rojo), $\alpha = 1$ (naranja) y $\alpha = 1/2$ (morado).

Para mostrar el efecto del cuasidesorden en el espectro de energía, en la Fig. (3.10) se muestra las eigenenergías del Hamiltoniano en la Ec. (2.1) para $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$ en las Figs. (3.10-a), (3.10-c) y (3.10-e), y $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$ en las Figs. (3.10-b), (3.10-d) y (3.10-f). Los valores de la potencia de tunelaje α son los mismos considerados previamente, es decir, $\alpha = 3, 1$ y $1/2$. De la Fig. (3.10) se puede observar que para los valores del cuasidesorden considerados $\Delta/J = 4$ y 8 , la brecha de energía entre los estados ligados y no ligados es insignificante, independientemente del valor α , en comparación con el caso donde $\Delta/J = 0$ (ver Fig. (3.3)). En consecuencia, la dinámica de los bosones ya no se concentra exclusivamente en el sector de alta energía, donde se ubican los estados tipo dímero, sino también en los estados de menor energía.

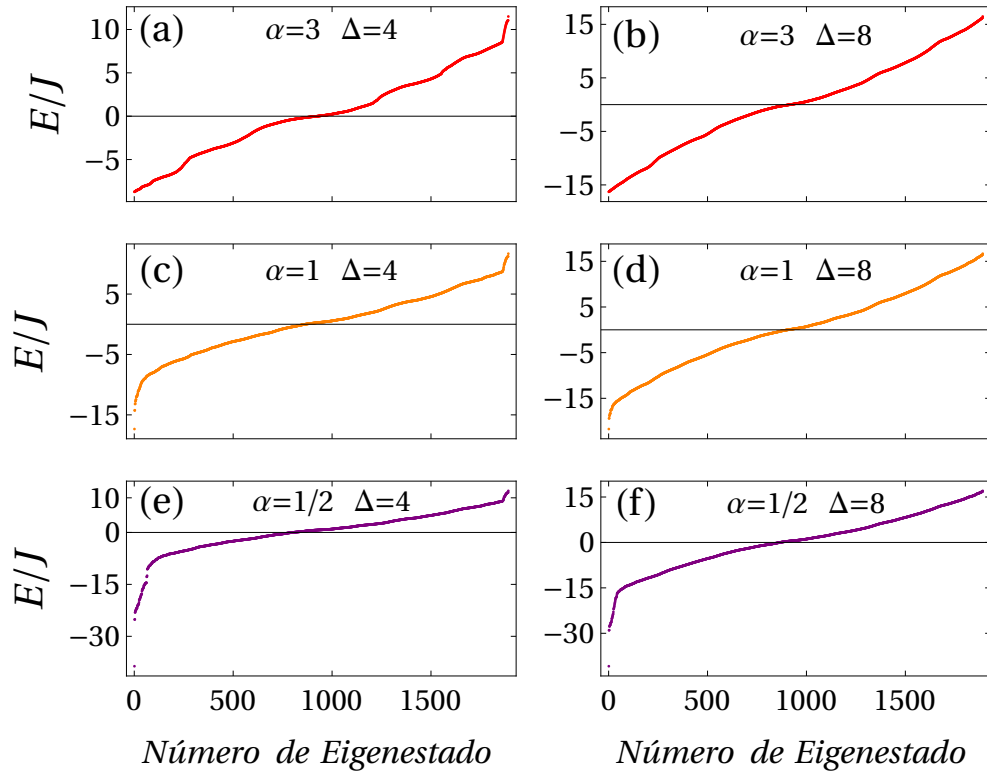


Figura 3.10: Espectro de energía del Hamiltoniano en la Ec. (3.1) para $U/J = 8$. Los valores del cuasidesorden y la ley de potencia del tunelaje se indica en cada panel.

Como se observa en la Fig. (3.11), los eigenestados de baja energía tienen la peculiaridad de tener un IPR más bajo que los estados de alta energía. Es decir, exhiben poca o nula localización espacial en comparación con los eigenestados de alta energía. Por lo tanto, la participación de los estados de baja energía, donde el dímero está disociado mejora el transporte de los bosones de núcleo duro.

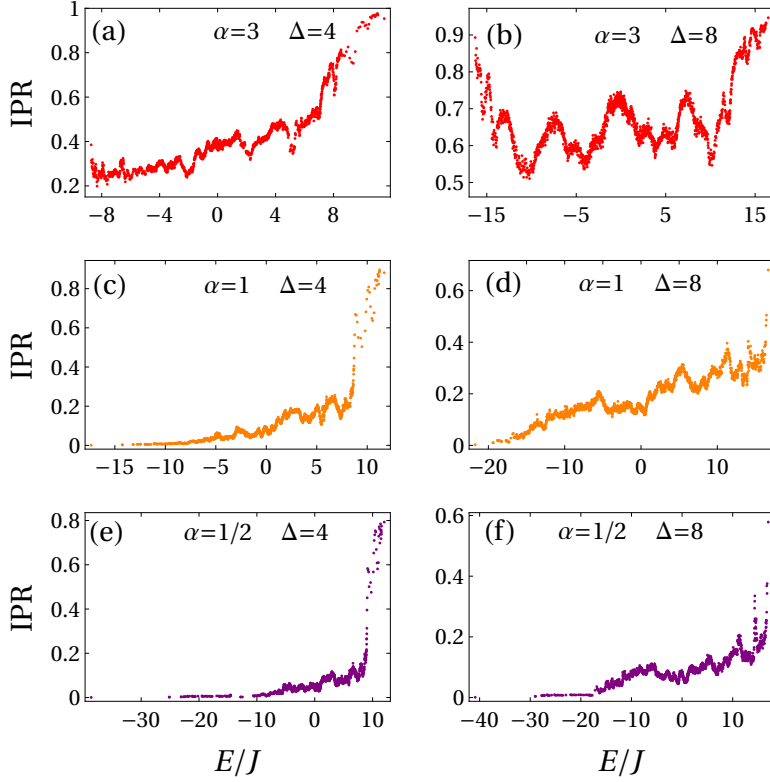


Figura 3.11: Razón de participación inversa asociado con los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (2.1) para $U/J = 8$. El valor de la cuasiperiodicidad y la ley de potencia del tunelaje se indican en cada panel.

En la Fig. (3.12) se muestra la función de correlación $\Gamma_{i,j}(t) = \langle \psi(t) | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_i | \psi(t) \rangle$ a un tiempo $Jt/\hbar = 20$, para $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$, $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$, y los tres valores de la potencia de tunelaje $\alpha = 3, 1$ y $1/2$. En contraste con las funciones de correlación mostradas en la Fig. (3.7), las diagonales superior e inferior de la diagonal principal en la Fig. (3.12) ya no son las contribuciones principales de la función de correlación. Por lo tanto, los estados donde el par está disociado son los que más contribuyen a la dinámica de los bosones, permitiendo así que las partículas se propaguen a regiones que no eran accesibles para el caso $\Delta/J = 2$.

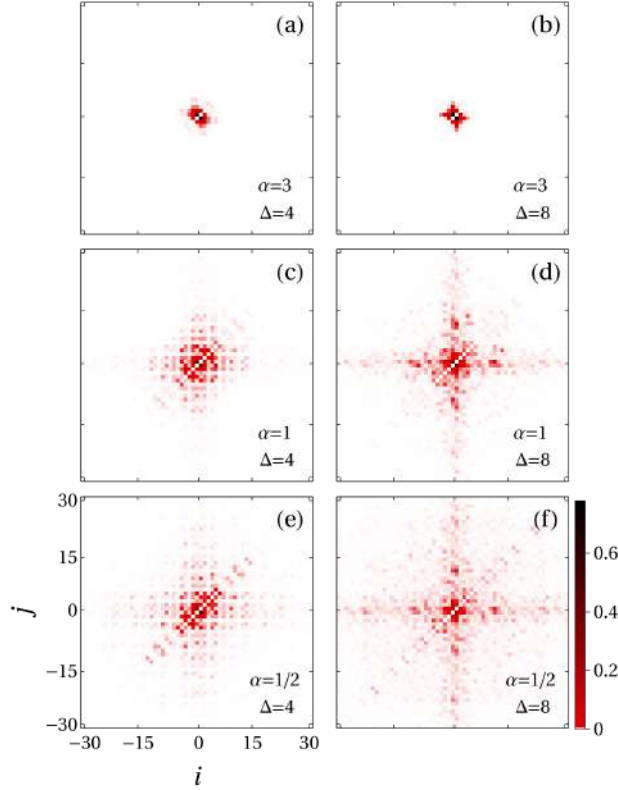


Figura 3.12: Función de correlación de dos cuerpos a $Jt\hbar = 20$ para una interacción entre partículas de $U/J = 8$. Cuasiperiodicidad y valor de la ley de potencia del tunelaje se indica en cada panel.

3.1.3. Probabilidad de supervivencia del estado inicial

Después de haber establecido el mecanismo detrás del transporte mejorado por el cuasidesorden, en esta subsección se mostrará que dicha transición ocurre para un amplio conjunto de la tripleta de parámetros $(U/J, \Delta/J, \alpha)$. Para este propósito, es adecuado encontrar una cantidad que ayude a detectar el grado de localización de las partículas durante su evolución temporal. Estudios recientes en sistemas desordenados [131, 132], han mostrado que la probabilidad de supervivencia proporciona información crucial con respecto al transporte de sistemas interactuantes [133, 134] y no interactuantes [135]. La probabilidad de supervivencia $f(t)$, se define de la siguiente forma:

$$f(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle \psi(0) | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle|^2. \quad (3.10)$$

La Ec. (3.10) puede reescribirse en términos de las eigenenergías E_m y los coeficientes $C_m = \langle \phi_m | \psi(0) \rangle$ que cuantifican el traslape entre los eigenestados $|\phi_m\rangle$ y el estado inicial $|\psi(0)\rangle$:

$$f(t) = \left| \sum_m |C_m|^2 e^{-iE_m t/\hbar} \right|^2. \quad (3.11)$$

En términos simples, la cantidad $f(t)$ mide la probabilidad de encontrar el par de partículas en el estado inicial $|\psi(0)\rangle$ al tiempo t . En las Figs. (3.13-a) y (3.13-c) se muestra la evolución temporal de la probabilidad de supervivencia para $U/J = 8$ y las potencias de tunelaje de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente.

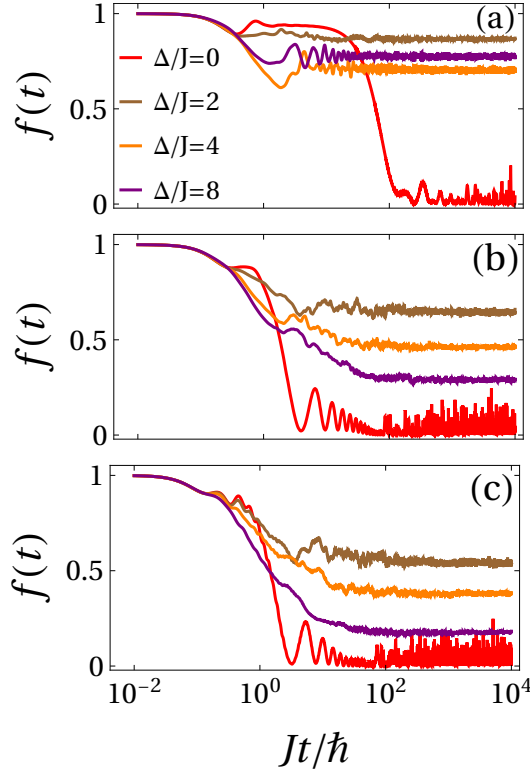


Figura 3.13: Probabilidad de supervivencia $f(t)$ para $U/J = 8$. Paneles (a), (b) y (c) corresponden a una ley de potencial del tunelaje de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente. Las magnitudes del cuasidesorden son $\Delta/J = 0$ (red), $\Delta/J = 2$ (café), $\Delta/J = 4$ (naranja) y $\Delta/J = 8$ (morado).

En general, la evolución temporal de $f(t)$ muestra un decaimiento de su valor inicial $f(0) = 1.0$ seguido de oscilaciones alrededor de un valor asintótico. En ausencia de cuasidesorden $\Delta/J = 0$, se observa que a tiempos largos $Jt/\hbar > 10^2$ la probabilidad de supervivencia $f(t)$ oscila alrededor del valor $1/L$, independientemente de la potencia del tunelaje α . Esto indica que los bosones pueden propagarse a lo largo de toda la red, sin restricción alguna. Para un valor de la modulación cuasiperiódica de $\Delta/J = 2$, el valor asintótico de $f(t)$ aumenta con respecto al caso anterior. El incremento de la probabilidad de supervivencia está en concordancia con la transición de localización del dímero encontrada en las subsecciones anteriores. Todos los valores de α mostrados exhiben una supresión del transporte cuando se incrementa el cuasidesorden. Sorprendentemente, para $\Delta/J = 4$ el valor asintótico de la probabilidad de supervivencia decrece. Contrariamente a la intuición general, al aumentar

aún más la magnitud de la cuasiperiodicidad, el valor de la probabilidad de supervivencia decrece más para las potencias de tunelaje de $\alpha = 1$ y $\alpha = 1/2$, entonces el transporte es mejorado por el cuasidesorden. Nótese que esto no pasa para $\alpha = 3$ ya que para $\Delta/J = 8$, la probabilidad de supervivencia incrementa, tal y como es esperado.

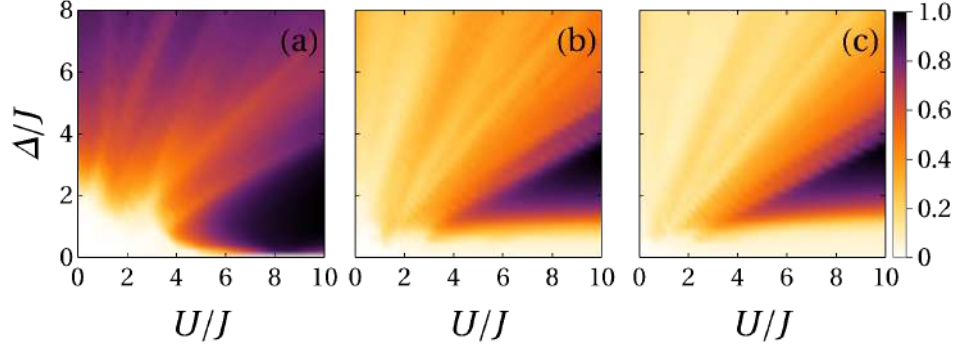


Figura 3.14: Valor asintótico de la probabilidad de supervivencia $F(t \rightarrow \infty)$ Ec. (3.12) como función de Δ/J y U/J . Paneles (a), (b) y (c) corresponden a un valor de la ley de potencia del tunelaje de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente.

Con el objetivo de suavizar las fluctuaciones en la evolución temporal de $f(t)$, es conveniente emplear el promedio temporal de la probabilidad de supervivencia,

$$F(t) = \frac{1}{t} \int_0^t dt' f(t'). \quad (3.12)$$

En el límite de tiempo largo, $F(t)$ satura al valor asintótico de la probabilidad de supervivencia $F(t \rightarrow \infty)$. El valor de saturación tiene la peculiaridad de coincidir con la razón de participación inversa de la condición inicial en términos de los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (3.1),

$$F(t \rightarrow \infty) = \sum_m |C_m|^4 = \text{IPR}^{(0)} \quad (3.13)$$

Es importante notar que la Ec. (3.13) relaciona una cantidad dinámica con la estructura inherente de los estados propios del sistema de interés. Para establecer los valores de la modulación cuasiperiódica y la interacción entre partículas para las cuales se produce la delocalización, en las Figs. (3.14-a) y (3.14-c) se muestra en gráficas de densidad los valores de $F(t \rightarrow \infty)$ asociados con la competencia Δ/J vs U/J para $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente. De la Fig. (3.14-a) se puede observar que para valores de la interacción $U/J > 4$, los bosones con $\alpha = 3$ se localizan para magnitudes pequeños del cuasidesorden en comparación con los casos $\alpha = 1$ y $\alpha = 1/2$. Esto pone de manifiesto que la difusión de las partículas con $\alpha = 1$ y $\alpha = 1/2$ es más robusta al cuasidesorden. Otro aspecto importante de resaltar en las Figs. (3.14-b) y (3.14-c) es que, dado que las interacciones dan robustez al dímero, la delocalización del par requiere amplitudes de cuasidesorden mayores a medida que aumenta la magnitud de la interacción.

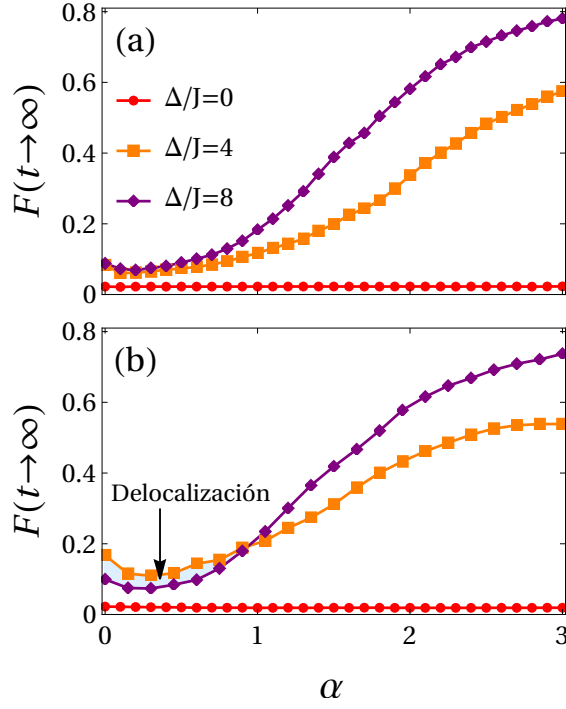


Figura 3.15: Valor asintótico de la probabilidad de supervivencia $F(t \rightarrow \infty)$ como función de la ley de potencia del tunelaje α . El valor del cuasidesorden es $\Delta/J = 0$ (rojo), $\Delta/J = 4$ (naranja), $\Delta/J = 8$ (morado). Paneles (a) y (b) corresponden a una interacción de $U/J = 1$ y $U/J = 4$, respectivamente.

Para mostrar el rol de la potencia del tunelaje α en el transporte mejorado por cuasidesorden, en las Figs. (3.15-a) y (3.15-b) se muestra el valor asintótico de la probabilidad de supervivencia como función de α para diferentes magnitudes de la cuasiperiodicidad Δ/J a una interacción fija. Para la interacción más pequeña $U/J = 1$, se observa el comportamiento usual, es decir, el valor de $F(t \rightarrow \infty)$ incrementa a medida que el cuasidesorden aumenta. Sin embargo, este no es el caso para $U/J = 4$ ya que existe un valor de α para el cual $F(t \rightarrow \infty)$ disminuye cuando la cuasiperiodicidad incrementa. La región celeste delimitada por la curvas $\Delta/J = 4$ y $\Delta/J = 8$ indica el espacio de parámetros para los cuales los bosones se delocalizan y por lo tanto su transporte se ve mejorado por el cuasidesorden. En las Figs. (3.16-a) y (3.16-b) se grafica el valor asintótico de la probabilidad de supervivencia como función de α para magnitudes de la interacción de $U/J = 6$ y $U/J = 8$, respectivamente. Tanto la Fig. (3.16-a) como la Fig. (3.16-b) ponen de manifiesto que conforme la interacción entre partículas incrementa, la región de delocalización se extiende. Es interesante notar que de acuerdo a la Fig. (3.16-b) la transición de delocalización tiene lugar tanto para tunelajes de corto $\alpha < 1$ como de largo alcance $\alpha > 1$.

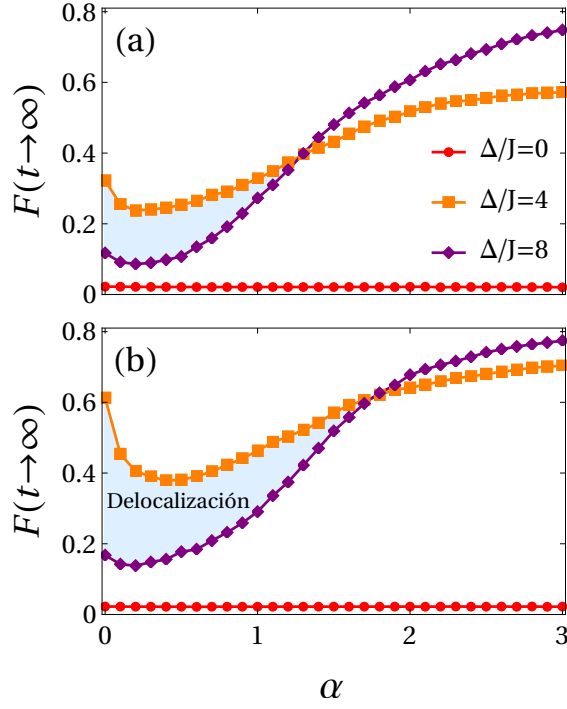


Figura 3.16: Valor asintótico de la probabilidad de supervivencia $F(t \rightarrow \infty)$ como función de la ley de potencia del tunelaje α . El valor del cuasidesorden es $\Delta/J = 0$ (rojo), $\Delta/J = 4$ (naranja), $\Delta/J = 8$ (morado). Paneles (a) y (b) corresponden a una interacción de $U/J = 6$ y $U/J = 8$, respectivamente.

3.1.4. Dímeros de núcleo duro

En la sección 3.1.1, se introdujo un Hamiltoniano efectivo para describir la dinámica de los bosones de núcleo duro dentro del régimen de interacción fuerte. Para mostrar que la modulación cuasiperiódica induce una interacción a primeros vecinos, se escribió \hat{H}_{eff} en términos de los operadores de creación y aniquilación de los bosones de núcleo duro. Sin embargo, es conveniente definir los nuevos operadores $\hat{d}_i = \hat{b}_i \hat{b}_{i+1}$ y $\hat{d}_i^\dagger = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1}^\dagger$ que aniquilan y crean un dímero ubicado en los sitios i y $i+1$. Estos operadores heredan la restricción de núcleo duro de los bosones originales, es decir, $(\hat{d}_i)^2 = (\hat{d}_i^\dagger)^2 = 0$ pero también adquieren una restricción a vecinos próximos $\hat{d}_i \hat{d}_{i+1} = \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_{i+1}^\dagger = 0$. Adicionalmente, dentro del subespacio \mathcal{H}_U , \hat{d}_i y \hat{d}_i^\dagger obedecen las reglas de conmutación bosónicas $[\hat{d}_i, \hat{d}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ y $[\hat{d}_i^\dagger, \hat{d}_j^\dagger] = [\hat{d}_i, \hat{d}_j] = 0$, siempre que $j \neq \{i, i \pm 1\}$. En términos de los operadores de dímero, el Hamiltoniano efectivo

puede reescribirse como:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} = & -\frac{J}{2^\alpha U} \sum_i (\hat{d}_i^\dagger \hat{d}_{i+1} + \hat{d}_{i+1}^\dagger \hat{d}_i) \\ & + \frac{2\Delta}{U} \cos(\pi\beta) \sum_i \cos(2\pi\beta i + \varphi) \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_i. \end{aligned} \quad (3.14)$$

El Hamiltoniano en la Ec. (3.14) no es más que el conocido Hamiltoniano de Aubry-André con un tunelaje a primeros vecinos con magnitud $J/(2^\alpha U)$ y una modulación cuasiperiódica modulada por $2 \cos(\pi\beta)\Delta/U$. El punto de crítico de la transición extendido-localizado tiene lugar en:

$$\frac{\Delta_c}{J} = \frac{1}{2^\alpha |\cos(\pi\beta)|}. \quad (3.15)$$

En las Figs. (3.17-a) y (3.17-c) se muestra el valor de la razón de participación inversa de los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (3.14) como función del cuasidesorden para $\alpha = 3, 1$ y $1/2$, respectivamente. La línea roja horizontal corresponde al cuasidesorden crítico en la Ec. (3.15).

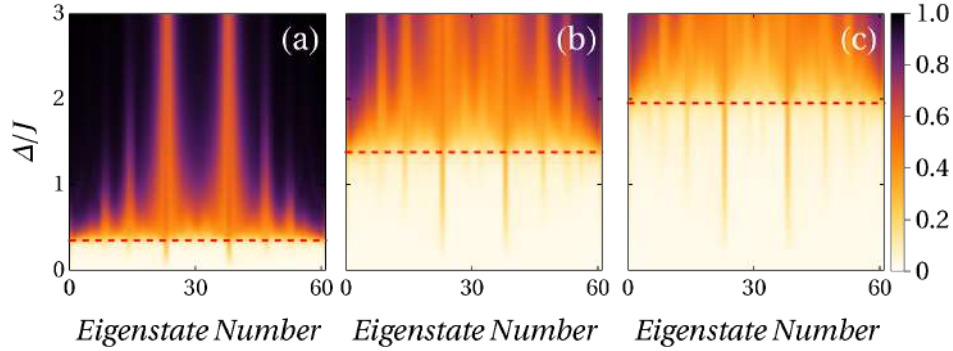


Figura 3.17: Razón de participación inversa de todos los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (3.14) como función de la magnitud de la cuasiperiodicidad. Paneles (a), (b) y (c) corresponden a una potencia del tunelaje de $\alpha = 3, 1$ y $1/2$. La línea roja discontinua corresponde al cuasidesorden crítico en la Ec. (3.15)

Para explorar la naturaleza promedio de los eigenestados en el plano α vs Δ/J , es conveniente emplear el promedio en el espectro de eigenestados de la razón de participación inversa, definido de la siguiente forma:

$$\overline{\text{IPR}} = \frac{1}{L} \sum_m \text{IPR}_m, \quad (3.16)$$

donde la suma corre sobre los L eigenestados del Hamiltoniano. En la Fig. (3.17) se ilustra el valor de $\overline{\text{IPR}}$ como función de α y Δ/J . La línea roja discontinua corresponde al cuasidesorden crítico en la Ec. (3.15).

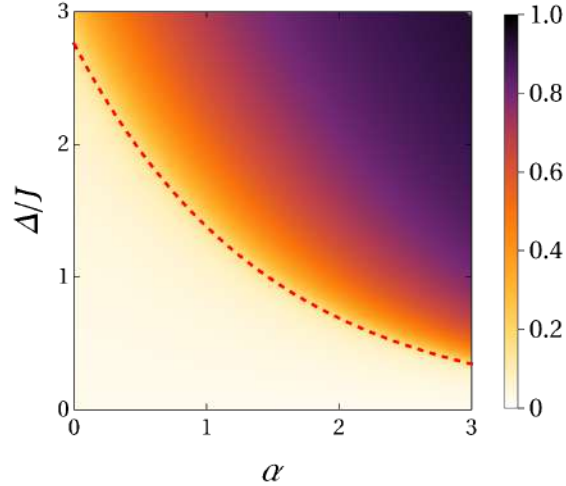


Figura 3.18: Promedio de la razón de participación inversa como función de el valor de la ley de potencia del tunelaje α y el cuasidesorden Δ/J . La línea roja discontinua corresponde al cuasidesorden crítico en la Ec. (3.15)

3.1.5. Conclusiones

En esta sección se ha investigado la dinámica de un par de bosones de núcleo duro que interactúan y se mueven en una red cuasiperiódica unidimensional con tunelaje de ley de potencia $1/r^\alpha$. En particular, al analizar la evolución en el tiempo de la densidad de una partícula, la probabilidad de supervivencia y la función de correlación de dos cuerpos, se ha encontrado que, para interacciones fuertes, el transporte se suprime para valores pequeños del cuasidesorden y luego se restaura a medida que aumenta. Este resultado contrasta fuertemente con la noción general de que el cuasidesorden siempre favorece la localización. Para revelar la física detrás de la transición de transporte mejorado por cuasidesorden, se definió un Hamiltoniano efectivo que describe satisfactoriamente la dinámica de los bosones cuando la interacción entre partículas es la escala de energía más grande. En este Hamiltoniano efectivo, los bosones se mueven como un objeto compuesto cuya dinámica ignora completamente el tunelaje de ley de potencia. Como resultado, el dímero se localiza para intensidades moderadas del cuasidesorden, como en la imagen habitual de la localización de Anderson. Sin embargo cuando la cuasiperiodicidad entra en competencia con la interacción, la estabilidad del par se ve comprometida y la delocalización surge como resultado de la disociación del par para ciertos rangos del tunelaje. Utilizando el valor asintótico de la probabilidad de supervivencia, se estableció las regiones de parámetros en las que se produce la delocalización de las partículas. En particular, primero se fijó el valor de la ley de potencia del tunelaje y se exploró la delocalización como función del cuasidesorden y la magnitud de interacción. Posteriormente, se precisó el efecto de variar la ley de potencia del tunelaje para valores fijos de la cuasiperiodicidad y de la interacción. Este estudio saca a luz la relevancia de la formación de dímeros en las propiedades de transporte de sistemas desordenados con tunelajes que

siguen una ley de potencia. Como se expusó en múltiples gráficas, pueden surgir resultados sorprendidos en la dinámica cuando se tiene en cuenta la formación de dímeros. Esto es de importancia primordial para fenómenos más complejos que involucran sistemas de muchos cuerpos. En particular, dentro del contexto experimental, donde la posibilidad de establecer estados preparados con pares puede conducir a regímenes de difusión inesperados.

3.2. Localización de pares en cuasicristales unidimensionales con tunelaje de ley de potencia

Han pasado más de 60 años desde el nacimiento de la localización de Anderson, y aunque se sabe mucho sobre los sistemas desordenados y cuasiperiódicos, aún quedan cuestiones fundamentales que siguen siendo objeto de numerosos estudios teóricos y numéricos. Por ejemplo, un problema que ha impulsado un intenso debate [78, 136, 137], es el efecto en conjunto entre el desorden o cuasiperiodicidad y las interacciones, a una densidad de partículas finita. Este tema, también llamado el problema de localización de muchos cuerpos (MBL) enfrenta importantes desafíos experimentales y computacionales. Desde el punto de vista numérico, los métodos de diagonalización exacta están restringidos a sistemas de tamaño pequeño debido al crecimiento exponencial del espacio de Hilbert, algoritmos de redes tensoriales, como TEBD [138, 139] o TDVP [140, 141] permiten simular la dinámica de sistemas más grandes, pero hasta tiempos limitados por la cantidad de enredamiento en el sistema. Por otro lado, los experimentos actuales están restringidos a varios cientos de tiempos de tunelaje debido al acoplamiento con el entorno externo [18, 111, 112]. Esta limitación dificulta la extrapolación de los resultados al límite de tiempo infinito, donde un régimen de decaimiento lento puede distinguirse directamente de la peculiar dinámica congelada de MBL. En vista de la complejidad de describir sistemas desordenados interactuantes dentro del régimen de muchos cuerpos, es razonable centrar los esfuerzos en las propiedades de localización de sistemas de pocos cuerpos. A pesar de su aparente simplicidad, dos partículas acopladas a través de interacciones de corto alcance y que se mueven en redes cuasiperiódicas exhiben una física rica. Por ejemplo, el escalamiento de la longitud de localización del par [142, 143], la transición extendido-localizado [104, 144–146], la presencia o ausencia de bordes de movilidad [105, 107] y la naturaleza multifractal del espectro de dos cuerpos [108], entre otros. En esta sección se estudiarán los efectos de interacciones repulsivas y atractivas en la localización de un par de bosones que se mueven en un cuasicristal con tunelaje de ley de potencia $r^{-\alpha}$. En particular, usando la razón de participación inversa se determinó que los pares atractivos son más robustos a la localización que los pares repulsivos cuando $\alpha \rightarrow 1$. Este resultado pone de manifiesto la importancia del alcance del tunelaje de la red en la transición extendido-localizado.

3.2.1. Formalismo de función de Green

En esta subsección se considera un par interactuante de partículas moviéndose en una red cuasiperiódica unidimensional. Al igual que la sección anterior, el tunelaje en la red

decae como una ley de potencial con exponente α , es decir, como $1/r^\alpha$. El Hamiltoniano que describe al sistema de dos cuerpos moviéndose en una red de L sitios puede ser escrito como:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}, \quad (3.17)$$

con \hat{H}_0 la componente no interactuante y \hat{U} el operador de interacción. La parte ideal de \hat{H} puede descomponerse como:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{GAA}} \otimes \hat{\mathbb{I}}_1 + \hat{\mathbb{I}}_1 \otimes \hat{H}_{\text{GAA}}, \quad (3.18)$$

siendo $\hat{\mathbb{I}}_1$ el operador identidad de un cuerpo y \hat{H}_{GAA} el Hamiltoniano generalizado de Aubry-André de una partícula:

$$\hat{H}_{\text{GAA}} = -J \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{|i-j|^\alpha} |i\rangle\langle j| + \Delta \sum_j \cos(2\pi\beta j + \phi) |j\rangle\langle j|, \quad (3.19)$$

donde $|j\rangle$ representa el estado en el cual la partícula se encuentra localizada en el sitio j , $J/|i-j|^\alpha$ es la amplitud de tunelaje entre los sitios i y j . Como es usual, la cuasiperiodicidad en la red está caracterizada por una magnitud Δ , el parámetro incomensurable $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ y una fase aleatoria $\phi \in [0, 2\pi)$. Para $\alpha \gg 1$, el modelo de Aubry-André generalizado se aproxima al célebre modelo de AA. Como es bien conocido, todos los eigenestados del Hamiltoniano de Aubry-André son extendidos para $\Delta/J < 2$, todos localizados para $\Delta/J > 2$ y todos multifractales en el punto de transición $\Delta/J = 2$. En contraste, para $\alpha > 1$ el modelo de GAA muestra una plétora de bordes de movilidad que separan estados extendidos de localizados. Cuando el tunelaje es de largo alcance $\alpha \leq 1$, los estados de una partícula son extendidos o multifractales. El operador \hat{U} acopla al par de partículas a través de una interacción de contacto con magnitud U :

$$\hat{U} = U \sum_j |j, j\rangle\langle j, j|, \quad (3.20)$$

siendo $|j, j\rangle$ el estado de dos cuerpos en el cual ambas partículas se encuentran en el sitio j . Es importante mencionar que una interacción de sitio, como la mostrada en la Ec. (3.20), juega un papel siempre que la función de onda espacial del par sea simétrica ante el intercambio de las coordenadas de las partículas, en este caso, las partículas pueden ser encontradas en el mismo sitio con probabilidad distinta de cero. En otras palabras, los resultados de esta sección son de relevancia cuando el par de partículas son bosones o fermiones con espín opuesto en el estado singlete. La ecuación de Schrödinger para el estado cuántico de dos cuerpos $|\Psi\rangle$ puede ser escrita como:

$$(E - \hat{H}_0)|\Psi\rangle = \hat{U}|\Psi\rangle, \quad (3.21)$$

con E la energía de sistema. La Ec. (3.21) puede resolverse numéricamente con la ayuda de la función de Green de dos cuerpos que no interactúan $\hat{\mathcal{G}}_0$. Formalmente este operador está dado por la siguiente expresión:

$$\hat{\mathcal{G}}_0(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0}. \quad (3.22)$$

En términos de los eigenestados $|\phi_l\rangle$ y las eigenenergías ε_l del Hamiltoniano de GAA, la Ec. (3.22) puede reescribirse como:

$$\hat{\mathcal{G}}_0(E) = \sum_{m,n} \frac{1}{E - \varepsilon_n - \varepsilon_m} |\phi_n, \phi_m\rangle \langle \phi_n, \phi_m|. \quad (3.23)$$

Aplicando $\hat{\mathcal{G}}_0$ por ambos lados de la Ec. (3.21) se encuentra lo siguiente:

$$|\Psi\rangle = \hat{\mathcal{G}}_0 \hat{U} |\Psi\rangle. \quad (3.24)$$

Proyectando esta última expresión sobre el estado $|j, j'\rangle$, se obtiene la siguiente expresión para las amplitudes $\Psi(j, j') = \langle j, j' | \Psi \rangle$ de la función de onda de dos partículas:

$$\Psi(j, j') = \langle j, j' | \hat{\mathcal{G}}_0(E) \hat{U} |\Psi\rangle = U \sum_i \langle j, j' | \hat{\mathcal{G}}_0(E) | i, i \rangle \Psi(i, i), \quad (3.25)$$

donde en la última igualdad se introdujo una identidad de dos cuerpos $\hat{\mathbb{I}}_2 = \sum_i |i, i\rangle \langle i, i|$ entre los operadores $\hat{\mathcal{G}}_0(E)$ y \hat{U} . Además, se hizo uso del hecho que el operador de interacción \hat{U} es diagonal en la representación espacial. La Ec. (3.25) muestra que $\Psi(j, j')$ está completamente determinada por sus componentes diagonales $\Psi(j, j)$, las cuales por simplicidad se denotarán como $\psi(j) = \Psi(j, j)$. Al colocar $j = j'$ en la Ec. (3.25) se obtiene la ecuación de eigenvalores deseada:

$$\frac{1}{U} \psi(j) = \sum_i G(j, i; E) \psi(i), \quad (3.26)$$

siendo $G(j, i; E)$ los elementos de matriz de la función de Green de dos cuerpos que no interactúan:

$$G(j, i; E) = \langle j, j | \hat{\mathcal{G}}_0(E) | i, i \rangle = \sum_{n,m} \frac{\psi_n(i) \psi_m(i) \psi_n^*(j) \psi_m^*(j)}{E - \varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad (3.27)$$

La complejidad computacional de evaluar directamente la expresión de arriba es $O(L^4)$ y, en contraste con redes con tunelaje a primeros vecinos [104], no puede reducirse a $O(L^3)$, ya que \hat{H}_{GAA} no tiene una representación matricial tridiagonal, de hecho, esta matriz está densamente llena debido al tunelaje de ley de potencia. Por esta razón, los cálculos de esta sección se limitaron a redes con $L = 377$ sitios. Dado que el movimiento del par se limita a una dimensión, el estado ligado existe para interacciones arbitrariamente pequeñas. Además, el problema de valores propios en la Ec. (3.26) admite soluciones para interacciones negativas y positivas. En el primer caso se denominan pares ligados atractivos y los últimos pares ligados repulsivos. A diferencia de los pares unidos por una interacción atractiva, un par ligado repulsivo no es el estado de mínima energía del sistema de dos cuerpos. Sin embargo, debido a la conservación de la energía, el par no puede decaer convirtiendo la energía de interacción en energía cinética y, por lo tanto, es dinámicamente estable. La Ec. (3.26) debe ser resuelta de forma iterativa, es decir, primero se construye la matriz $G(j, i; E)$ utilizando una adivinanza para la energía E , se diagonaliza dicha matriz utilizando paqueterías numéricas de álgebra lineal y se guarda el mínimo o máximo eigenvalor λ , dependiendo si la interacción es atractiva

o repulsiva, respectivamente. Posteriormente, se compara si el eigenvalor guardado es igual a $1/U$, si este es el caso, el eigenvector asociado al eigenvalor λ es la función del estado ligado. En caso contrario, la adivinanza de E se perfecciona utilizando el método de Newton-Rapson, este nuevo ansatz sirve para volver a calcular la matriz $G(j, i; E)$ y el ciclo se repite. En las gráficas que se muestran en las siguientes subsecciones se considerará leyes de potencia del tunelaje mayores a la unidad, es decir, $\alpha > 1$.

3.2.2. Transición extendido-localizado

En cuasicristales unidimensionales con tunelaje a primeros vecinos, la función de onda de un estado ligado atractivo con energía $-E$ describe también un par ligado repulsivo con energía E siempre que la fase ϕ , perteneciente al potencial de Aubry-André, sea desplazada por π . Es decir, mientras que el estado unido por $U < 0$ se localiza en el mínimo de la modulación cuasiperiódica, la función de onda para $U > 0$ se localiza en el máximo. El hecho de que ambos tipos de pares estén representados por el mismo perfil espacial implica que la transición extendido-localizado no dependa del signo de interacción [104, 105]. Este resultado deja de ser válido para cuasicristales con tunelaje que sigue una ley de potencia. Como puede apreciarse de la Fig. (3.19), las funciones ψ_{att} y ψ_{rep} pueden mostrar comportamientos espaciales contrastantes. En particular, mientras que el par atractivo para $\alpha = 2$ y $(U/J, \Delta/J) = (-2, 2)$ está extendido, el estado ligado repulsivo para $U/J = 2$ y mismo valor de α y Δ/J muestra una fuerte localización. Para $\alpha = 6$, los perfiles de los pares son casi idénticos, tal y como se espera de los cuasicristales con tunelaje de corto alcance [104]. Es importante mencionar que los perfiles atractivos y repulsivos mostrados en la Fig. (3.19), corresponden a diferentes fases ϕ .

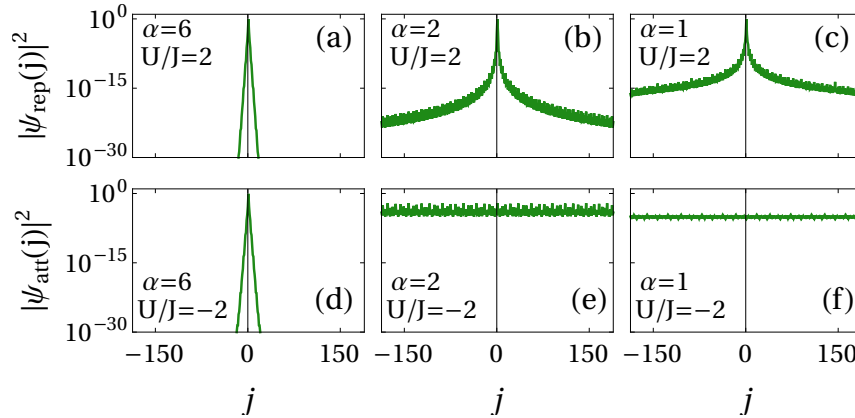


Figura 3.19: Elementos diagonales del perfil de dos cuerpos $\psi(j) = |\Psi(j, j)|$ como función del índice de la red j . Las funciones ψ_{att} y ψ_{rep} corresponden a pares atractivos y repulsivos, respectivamente. La magnitud de la modulación cuasiperiódica es $\Delta/J = 2$ para todos los paneles.

Un parámetro habitual que se utiliza como medida de la localización es la razón de

participación inversa, dada una función de onda ψ normalizada, su IPR se define como $\text{IPR}_\psi = \sum_{i=1}^L |\psi(i)|^4$. Para estados extendidos, el IPR se anula en el límite termodinámico como $\propto L^{-1}$, mientras que para perfiles localizados es siempre finito. En la Fig. (3.20) se ilustra la razón de participación inversa de pares atractivos y repulsivos como función de α y Δ/J para diferentes magnitudes de la interacción. Los casos no interactuantes, mostrados en la Fig. (3.20-a) y Fig. (3.20-d) corresponden a los estados de mínima y máxima energía de la banda de dispersión, respectivamente. Como se puede notar, la interacción entre partículas favorece la localización de ambos estados ligados. Sin embargo, el IPR muestra una estructura diferente para $U < 0$ y $U > 0$. Por ejemplo, siempre y cuando $\alpha \lesssim 2$, los pares atractivos son extendidos para cuasiperiodicidades grandes $\Delta/J \approx 8$. Por el contrario, todos los estados ligados repulsivos están localizados para esta región de parámetros. Es interesante notar que para pares ligados de forma atractiva, la región extendida, donde el IPR es nulo, se agranda a medida que α disminuye. Por el contrario, la región extendida para pares unidos repulsivamente se agranda a medida que α aumenta.

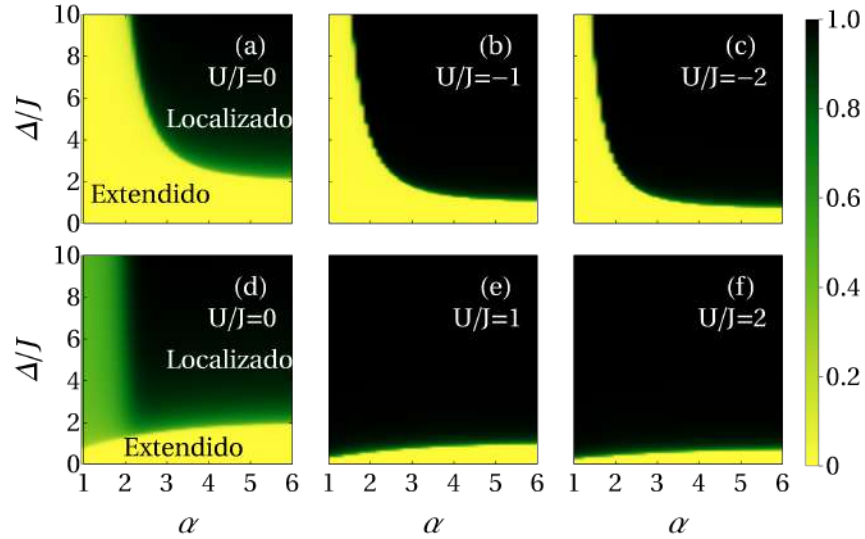


Figura 3.20: Razón de participación inversa en función de la potencia del tunelaje α y la magnitud de la modulación cuasiperiódica Δ/J para diferentes valores de la interacción. Los casos no interactuantes en los paneles (a) y (d) están asociados con los estados de dispersión de mínima y máxima energía, respectivamente. Los resultados corresponden a 30 realizaciones de la fase ϕ .

Para determinar la cuasiperiodicidad crítica Δ_c/J , donde tiene lugar la transición de localización de los pares se empleó el punto de inflexión de la razón de participación inversa. Esto es, para U y α fijas se evaluó el IPR como función de Δ y se encontró el punto en donde la segunda derivada de la curva $\text{IPR}(\Delta)$ se hace cero. La técnica del punto de inflexión se ha utilizado con éxito en varios trabajos anteriores [104, 105]. En la Fig. (3.21) se muestra la cuasiperiodicidad crítica Δ_c/J como función de la magnitud de la interacción U/J para diferentes valores de la potencia de tunelaje α . Para $\alpha = 6$, la magnitud cuasiperiódica

crítica es aproximadamente simétrica con respecto al signo de la interacción, este hallazgo está de acuerdo con el resultado obtenido para cuasicristales con tunelaje de corto alcance [104]. A medida que α decrece se observa el incremento abrupto de Δ_c/J para interacciones atractivas. En contraste, la cuasiperiodicidad crítica disminuye para interacciones positivas. Este resultado indica que si $|U/J|$ está fijo, los pares repulsivos se localizan a magnitudes cuasiperiodicas menores iguales que los pares atractivos y además que esta discrepancia se acentua conforme el tunelaje se hace de largo alcance.

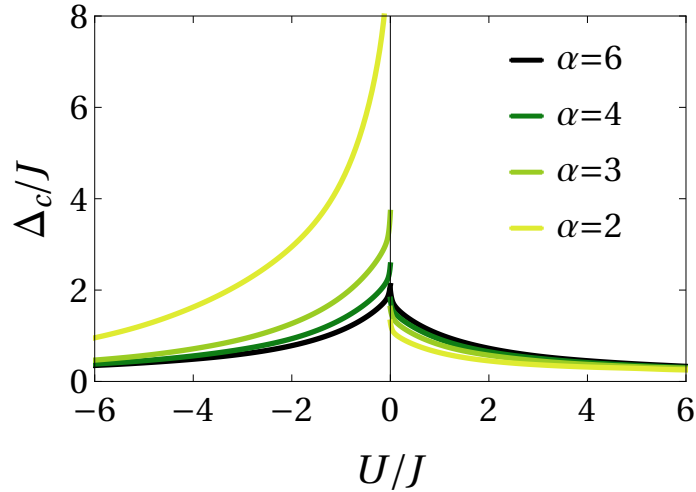


Figura 3.21: Desorden crítico de la transición extendido-localizado del par como función de U/J para diferentes valores de la cuasiperiodicidad. Los resultados corresponden a 30 realizaciones de la fase ϕ .

Para concluir esta subsección, en la Fig. (3.22) se muestra Δ_c/J como función de α para diferentes magnitudes de la interacción. En congruencia con la Fig. (3.22), cuando $\alpha \rightarrow 1$, se tiene que Δ_c/J crece indefinidamente para $U/J < 0$, mientras que para $U/J > 0$ se aproxima a una constante.

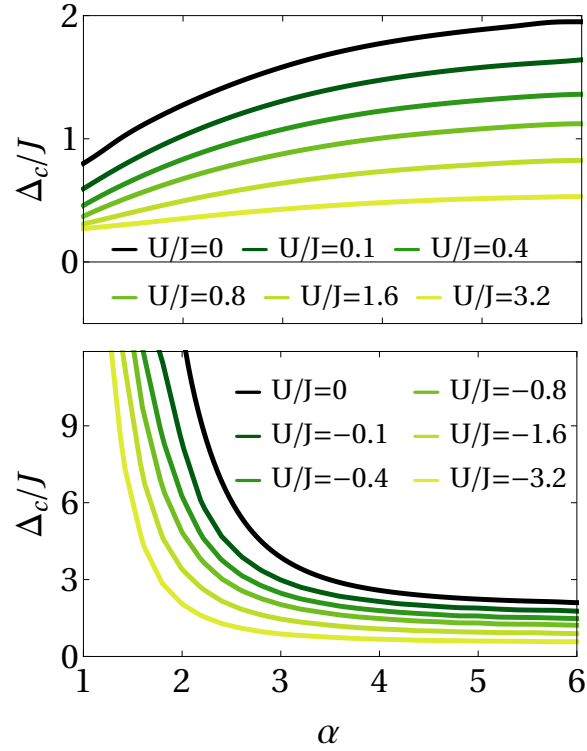


Figura 3.22: Desorden crítico de la transición extendido-localizado del par como función de la potencia de tunelaje α para diferentes magnitudes de la interacción. Los resultados corresponden a 30 realizaciones de la fase ϕ .

3.2.3. Brecha de energía del par

Como es bien conocido, la energía total de los pares repulsivos y atractivos se encuentra por encima y por debajo de las energías de los estados dispersados de dos cuerpos, respectivamente. La brecha energética E_G entre un estado ligado y el estado de dispersión más cercano es una medida de la energía requerida para disociar el par. Matemáticamente, E_G se puede definir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} E_G^R &= E - 2\varepsilon_L \\ E_G^A &= 2\varepsilon_1 - E, \end{aligned} \quad (3.28)$$

donde los superíndices R y A están asociados a pares repulsivos y atractivos, respectivamente, ε_1 es la energía del estado base de dos partículas no interactuantes, mientras que ε_L es la máxima energía. En las Fig. (3.23) se muestra la cantidad E_G como función de la interacción para un valor de $\Delta/J = 0, 1, 2$ y 3 , respectivamente. Los valores de la potencia de tunelaje α se indica en diferentes colores. Como se ilustra en Fig. (3.23-a), E_G^R corresponde a U positiva y E_G^A a valores negativos de la interacción.

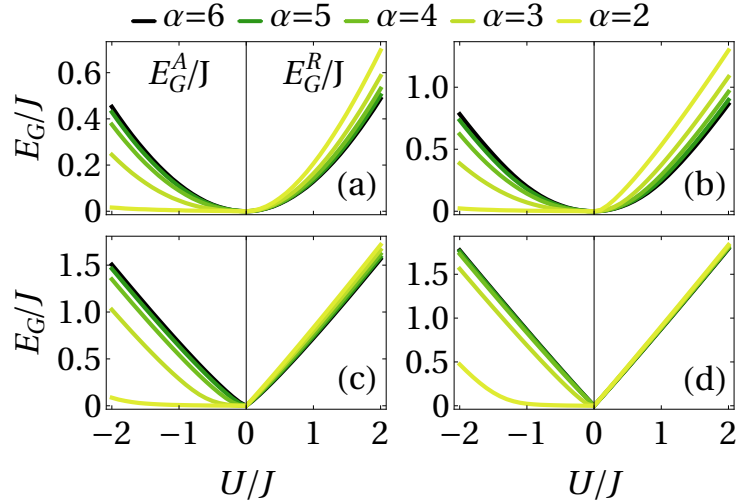


Figura 3.23: Brecha de energía de las moléculas como función de la interacción U/J para diferentes valores de la potencia del tunelaje α . E_G^A y E_G^R están asociadas a las ramas atractivas y repulsivas. Paneles (a), (b), (c) y (d) corresponden a un valor de la cuasiperiodicidad de $\Delta/J = 0, 1, 2$ y 3 , respectivamente.

Para la red periódica $\Delta/J = 0$, se puede ver una imagen casi especular entre E_G^A y E_G^R si $\alpha = 6$, en acuerdo con el resultado para cuasicristales con tunelaje a primeros vecinos [104]. Sin embargo, a medida que α disminuye, el comportamiento asimétrico en la brecha de energía se reconoce fácilmente. En particular, los dímeros unidos repulsivamente exhiben una E_G mayor en comparación con los pares atractivos. A partir de las Fig. (3.23) se puede reconocer que la brecha de energía para ambos pares, repulsivos y atractivos, aumenta significativamente cuando el potencial cuasiperiódico localiza la función de onda. Esto se debe a que un perfil localizado robustece los efectos de interacción. Además, debido a una fuerte localización, la movilidad del par deja de jugar un papel y, por lo tanto, las curvas E_B asociadas a diferentes valores de α colapsan gradualmente a una línea recta.

3.2.4. Conclusiones

En esta sección se han analizado las propiedades de localización estacionarias de un par de bosones que interactúan y se mueven en un cuasicristal unidimensional con tunelaje de ley de potencia $r^{-\alpha}$. Al analizar la razón de participación inversa se mostró que conforme el rango del tunelaje se incrementa $\alpha \rightarrow 1$, la asimetría de las interacciones atractivas y repulsivas en la transición extendido-localizado del par de partículas se manifiesta. Este resultado está en contraste con los hallados en cuasicristales con saltos a primeros vecinos [104]. Un hallazgo principal de esta sección subyace en el hecho que los pares ligados por una interacción atractiva son más robustos a localizarse en comparación con los pares repulsivos. En particular, la cuasiperiodicidad crítica para pares atractivos crece abruptamente cuando $\alpha \rightarrow 1$, mientras que para los pares repulsivos está acotada por el valor de la modulación

cuasiperiódica en ausencia de interacciones, es decir, $\Delta_c/J = 2$. Es importante mencionar que cuando $\alpha \rightarrow \infty$, la transición extendido-localizado recupera la simetría con respecto al signo de la interacción. Los resultados de esta sección son de relevancia para los estudios relacionados con el transporte de sistemas de muchos cuerpos en cuasicristales, en donde la formación de estados ligados y su localización puede dar lugar al arresto abrupto de la dinámica de estos sistemas. Queda como problema abierto la física de tres o más cuerpos interactuantes en un cuasicristal con tunelaje de ley de potencia, de esta forma se podría averiguar el destino de los estados ligados y su relevancia en el transporte de un sistema macroscópico.

Capítulo 4

Localización en el esquema de campo medio

La descripción física de la acción mutua entre el desorden y las interacciones en sistemas cuánticos de muchos cuerpos continúa siendo un gran desafío para la comunidad científica. Desde la perspectiva computacional, el uso del método de diagonalización exacta se ve severamente limitado debido al crecimiento exponencial del espacio de Hilbert necesario para describir de forma exacta las propiedades dinámicas y estacionarias de un sistema cuántico. Los métodos de Monte Carlo Cuántico, ofrecen mayor flexibilidad al número de partículas. Sin embargo, la presencia de desorden espacial favorece la emergencia de estados metaestables causando un incremento en el tiempo computacional requerido para llevar a cabo un muestreo apropiado del espacio de configuraciones [147]. A la vista de estos obstáculos se ha empleado la aproximación de campo medio para poder describir, cuando menos de manera cualitativa, el comportamiento de sistemas desordenados con muchos cuerpos. Este método logra capturar los efectos principales del desorden e interacción y además, reproduce resultados que están razonablemente de acuerdo con los obtenidos mediante métodos más sofisticados [148–151]. En este capítulo se estudiará el efecto de desorden estructural aleatorio en la conservación de dominios ferromagnéticos con polarización opuesta y que inicialmente se encuentran separados espacialmente (ver Fig. (4.1)). En particular, siguiendo el esquema de campo medio, se determinó la dinámica en el tiempo de un condensado de Bose-Einstein de dos componentes, las cuales simulan las polarizaciones opuestas del dominio ferromagnético. A través del cómputo de la magnetización local y el correlador de la magnetización, se logró establecer el impacto del desorden y las interacciones en el proceso de degradación del orden magnético en el condensado. Este trabajo pone de manifiesto la posibilidad de simular procesos dinámicos que involucran grados de libertad de espín, interacciones entre partículas y desorden espacial en experimentos con átomos ultrafríos que son análogos a estudios en la materia condensada [152–154].

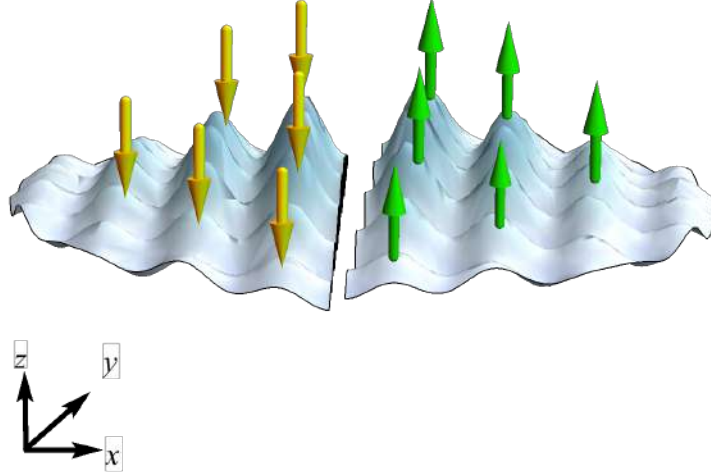


Figura 4.1: Representación esquemática de dos dominios ferromagnéticos con polarización opuesta $|\uparrow\rangle$ (amarillo) y $|\downarrow\rangle$ (verde) separados espacialmente.

4.1. Modelo

Para estudiar la dinámica bidimensional de dominios magnéticos en presencia de desorden estructural e interacciones entre partículas, se considera una mezcla compuesta de dos componentes hiperfinas $|\uparrow\rangle = |F = 1, m_F = -1\rangle$ y $|\downarrow\rangle = |F = 2, m_F = -2\rangle$ de átomos de ^{87}Rb . El gas bosónico se encuentra confinado por la acción en conjunto de un potencial armónico isotrópico y una red óptica cuadrada. En el régimen débilmente interactuante y a una temperatura nula $T = 0$, las propiedades estacionarias y dinámicas del gas pueden describirse siguiendo la aproximación de campo medio. Dentro de este esquema, la funciones de onda de cada componente hiperfina ψ_\uparrow y ψ_\downarrow satisfacen las siguientes ecuaciones de Gross-Pitaevskii:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_\uparrow}{\partial t} &= [\hat{H}_0 + g_{\uparrow\uparrow}|\psi_\uparrow|^2 + g_{\uparrow\downarrow}|\psi_\downarrow|^2]\psi_\uparrow \\ i\hbar \frac{\partial \psi_\downarrow}{\partial t} &= [\hat{H}_0 + g_{\downarrow\downarrow}|\psi_\downarrow|^2 + g_{\downarrow\uparrow}|\psi_\uparrow|^2]\psi_\downarrow, \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_\perp^2 + V_{\text{ext}}(x, y)$, con $\nabla_\perp^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ el laplaciano en dos dimensiones y m la masa de las dos componentes hiperfinas. En el apéndice C puede consultarse una derivación de las ecuaciones de Gross-Pitaevskii a partir del Hamiltoniano de muchos cuerpos. El potencial externo $V_{\text{ext}}(x, y)$ tiene la siguiente forma funcional:

$$V_{\text{ext}}(x, y) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) + V_0^\delta \left[\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \cos^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \right], \quad (4.2)$$

con ω_x y ω_y las frecuencias en el eje x y eje y , respectivamente. Por simplicidad se considera el caso en el cual $\omega_x = \omega_y = \omega_r$, es decir, el confinamiento en el plano es homogéneo y por ende está caracterizado por una única frecuencia ω_r , llamada frecuencia radial. En la práctica,

un condensado de Bose-Einstein en dos dimensiones, estrictamente en cuasi-2D, se puede obtener apartir de un gas en 3D confinado fuertemente en la dirección transversal [155]. En otras palabras si (ω_r, ω_z) es el par de frecuencias empleadas para confinar el condensado tridimensional, el régimen cuasi-2D es posible cuando $\omega_z \gg \omega_r$. En estas condiciones la ecuación de Gross-Pitaevskii en tres dimensiones puede reducirse a una bidimensional [155], más aún, cuando se trata de un gas espinorial, es posible llegar al conjunto de ecuaciones acopladas como las expuestas en la Ec. (4.1). Una discusión más profunda de la reducción dimensional puede encontrarse en el apéndice C. El segundo término en la Ec. (4.2) modela el confinamiento de la red óptica, la cual está caracterizada por la constante de red a y una profundidad $V_0^\delta = V_0[1 + \epsilon_\delta(x, y)]$ que depende de la posición (x, y) . La función $\epsilon_\delta(x, y)$ representa un desorden aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo $[-\delta, \delta]$, es decir, la magnitud del desorden está modulado por la cantidad δ . La profundidad aleatoria del potencial V_0^δ imita un entorno desordenado semejante al introducido por los patrones tipo speckle [18, 19, 156]. En las Figs. (4.2-a y 4.2-c) se ilustra una representación esquemática de la red cuadrada cuando $\delta = 0$, $\delta = 0.01$ y $\delta = 0.1$, respectivamente. De las Figs. (4.2-b y 4.2-c) puede apreciarse que el desorden aleatorio introducido altera el fondo del potencial óptico y sus alrededores. Además, la forma funcional del desorden garantiza que, aunque se altere la periodicidad de la red, se conserva la estructura subyacente; es decir, prevalece la geometría cuadrada y el confinamiento armónico. Como es usual en la literatura, la amplitud V_0^δ de la red está escalada en unidades de la energía de retroceso $E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, con $k = \pi/a$.

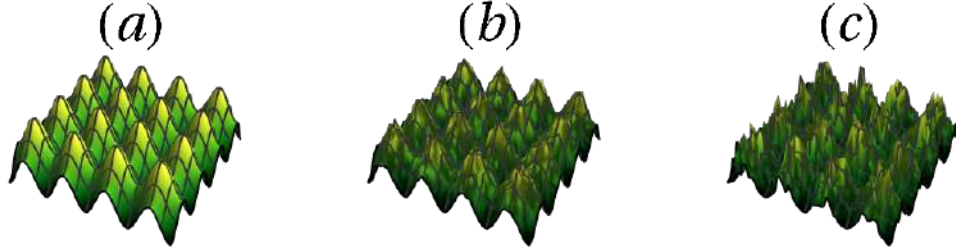


Figura 4.2: Representación esquemática de una red óptica cuadrada cuando el desorden toma el valor: (a) $\delta = 0$, (b) $\delta = 0.01$ y (c) $\delta = 0.1$.

Los acomplamientos de interacción $g_{\sigma, \sigma'} = 4\pi N \hbar^2 a_{\sigma, \sigma'}^{2D} / m$, con $\sigma, \sigma' = \{\uparrow, \downarrow\}$, se escriben en términos de la longitud de dispersión bidimensional de onda s , $a_{\sigma, \sigma'}^{2D}$, y el número N de átomos en el condensado. Debido a que las colisiones entre átomos ocurre en dos dimensiones, la longitud de dispersión bidimensional $a_{\sigma, \sigma'}^{2D}$, difiere de la correspondiente al caso tridimensional $a_{\sigma, \sigma'}^{3D}$. En el límite de energías bajas, $a_{\sigma, \sigma'}^{2D}$, se relaciona con $a_{\sigma, \sigma'}^{3D}$, de la siguiente forma (ver apéndice C):

$$a_{\sigma, \sigma'}^{2D} = \frac{a_{\sigma, \sigma'}^{3D}}{\sqrt{2\pi\ell_z}}, \quad (4.3)$$

con $\ell_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ la longitud característica del confinamiento transversal. Los valores de las constantes de acomplamiento $g_{\sigma, \sigma'}$ se pueden variar a través de resonancias de Feshbach [157]

y, por lo tanto, es posible ajustarlas al caso que es de interés para esta tesis $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} > g_{\uparrow\downarrow} = g_{\downarrow\uparrow}$. Es decir, la magnitud de interacción intraespecie es la misma para ambas componentes. En estas condiciones se satisface el criterio de miscibilidad de las componentes hiperfinas $g_{\uparrow\downarrow} < \sqrt{g_{\uparrow\uparrow}g_{\downarrow\downarrow}}$ [158, 159], lo cual garantiza que los gases puedan mezclarse y por ende exhibir una dinámica de espín no trivial.

4.2. Preparación del dominio ferromagnético

En la sección anterior se presentó las ecuaciones dependientes del tiempo de Gross-Pitaevskii, a partir de ellas es posible computar como evoluciona en el tiempo una configuración inicial de las funciones de onda que representan a las componentes hiperfinas $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$. En vista de que el objetivo es estudiar el efecto de desorden estructural aleatorio en la conservación de dominios ferromagnéticos con polarización opuesta y que inicialmente se encuentran separados espacialmente, es indispensable que las condiciones iniciales $\psi_{\uparrow}(t=0)$ y $\psi_{\downarrow}(t=0)$ tengan una configuración congruente con el propósito mencionado. Para crear el estado inicial a partir del cual se seguirá el proceso de desmagnetización, primero se determinó el estado estacionario de la Ec. (4.1), para ello se sustituyen las propuestas $\psi_{\uparrow}(t) = e^{i\mu t/\hbar}\phi_{\uparrow}$ y $\psi_{\downarrow}(t) = e^{i\mu t/\hbar}\phi_{\downarrow}$ en la Ec. (4.1), al evaluar la derivada temporal y cancelar el factor exponencial común se obtiene las siguientes ecuaciones estacionarias de Gross-Pitaevskii:

$$\begin{aligned}\mu\phi_{\uparrow} &= [\hat{H}_0 + g_{\uparrow\uparrow}|\phi_{\uparrow}|^2 + g_{\uparrow\downarrow}|\phi_{\downarrow}|^2]\phi_{\uparrow} \\ \mu\phi_{\downarrow} &= [\hat{H}_0 + g_{\downarrow\downarrow}|\phi_{\downarrow}|^2 + g_{\downarrow\uparrow}|\phi_{\uparrow}|^2]\phi_{\downarrow},\end{aligned}\tag{4.4}$$

donde μ es el potencial químico de la mezcla. Con la finalidad de obtener numéricamente los perfiles ϕ_{\uparrow} y ϕ_{\downarrow} en la Ec. (4.4) se utilizó el esquema de evolución en tiempo imaginario basado en el método de Fourier en pasos divididos [160–163]. Para mayor detalles técnicos del método se puede consultar el apéndice C. Los parámetros físicos relevantes utilizados en la solución numérica de la Ec. (4.4) se muestran en la siguiente tabla:

Nombre	Símbolo	Valor
Número de partículas	N	600
Masa de ^{87}Rb	m	87 amu
Constante de red	a	532 nm
Frecuencia de la trampa armónica en la dirección x	ω_x	$2\pi \times 50$ rad/s
Frecuencia de la trampa armónica en la dirección y	ω_y	$2\pi \times 50$ rad/s
Frecuencia de la trampa armónica en la dirección z	ω_z	$2\pi \times 4000$ rad/s
Longitud de dispersión de onda s en 3D	a_s^{3D}	$100a_0$
Profundidad de la red óptica	V_0	$4E_R$
Magnitud del desorden	δ	0

Cuadro 4.1: Parámetros físicos utilizados en la solución numérica de las ecuaciones estacionarias de Gross-Pitaevskii.

Donde $a_0 = 5.29 \times 10^{-11}$ m es el radio de Bohr. Nótese que los estados estacionarios ϕ_{\uparrow} y ϕ_{\downarrow} se obtuvieron para una red óptica sin desorden $\delta = 0$ y que las frecuencias e interacciones están fijadas a valores congruentes con los utilizados en los experimentos en sistemas desordenados [18]. En la Fig. (4.3) se gráfica los estados estacionarios obtenidos mediante el método de evolución en tiempo imaginario.

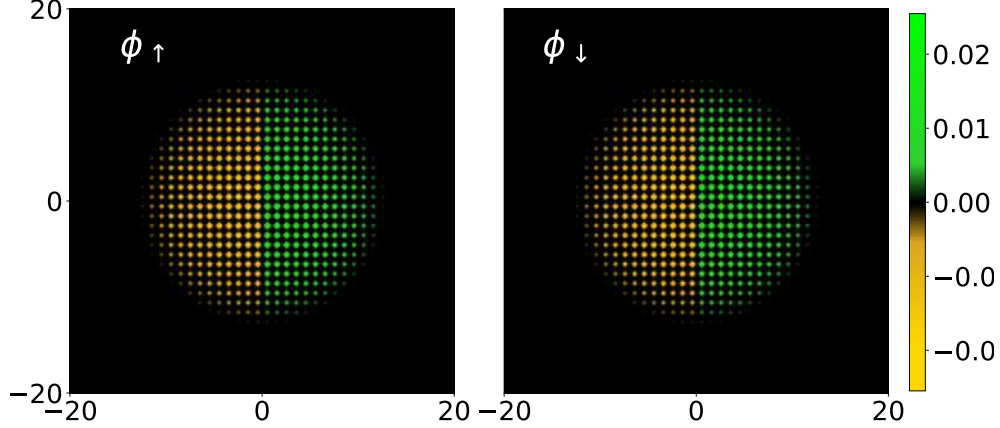


Figura 4.3: Estados estacionarios obtenidos al resolver numéricamente las ecuaciones estacionarias de Gross-Pitaevskii (ver Ec. (4.4)). Los parámetros físicos utilizados se encuentran en la tabla (4.1). La función de onda se especifica en cada panel.

En la siguiente tabla se muestran los parámetros de la simulación numérica utilizados para obtener los estados estacionarios de las ecuaciones de Gross-Pitaevskii (ver apéndice C para mayor información).

Nombre	Símbolo	Valor
Número de puntos de la cuadrícula en la dirección x	N_x	512
Número de puntos de la cuadrícula en la dirección y	N_y	512
Extensión espacial de la cuadrícula numérica en la dirección x	L_x	$40a$
Extensión espacial de la cuadrícula numérica en la dirección y	L_y	$40a$
Tamaño de paso utilizado en la evolución en tiempo imaginario	$d\tau_i$	0.01

Cuadro 4.2: Parámetros de la simulación numérica utilizados en la solución de las ecuaciones estacionarias de Gross-Pitaevskii.

Posterior a obtener los estado estacionarios ϕ_{\uparrow} y ϕ_{\downarrow} , se eliminó manualmente las partículas con componente $\sigma = \uparrow$ de la región izquierda de la red mientras que las partículas con $\sigma = \downarrow$ se removieron de la región derecha. La expulsión de partículas descrita imita los protocolos experimentales donde se utiliza un dispositivo de espejo digital para remover ópticamente los átomos en posiciones específicas [18, 78]. En este trabajo, el protocolo de eliminación

empleado tiene como objetivo diseñar manualmente un estado que muestre dos dominios ferromagnéticos con magnetización opuesta y densidades hiperfinas iguales. Alternativamente, otra ruta experimental y numérica para lograr dominios magnéticos con la disposición espacial mencionada es mediante el uso de un gradiente de campo magnético [164]. En la Fig. (4.4) se ilustra la magnetización local en la dirección transversal $M_z = |\phi_\uparrow|^2 - |\phi_\downarrow|^2$ tras realizar el protocolo de remoción de partículas, en letras blancas se indica la componente hiperfina que ocupa la región izquierda Ω_I o región derecha Ω_D del sistema en cuestión. Nótese que debido a la eliminación de la mitad de la población, $N \rightarrow N/2$, los coeficientes de interacción $g_{\sigma,\sigma'}$ deben de ajustarse correctamente al nuevo número de partículas. La configuración de las componentes hiperfinas mostradas en la Fig. (4.4) exhibe el ordenamiento anhelado, es decir, dos dominios ferromagnéticos con polarización opuesta y separados espacialmente.

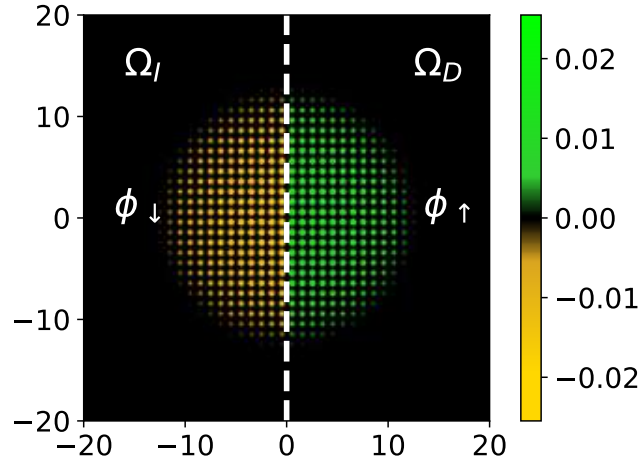


Figura 4.4: Magnetización local transversal $M_z = |\phi_\uparrow|^2 - |\phi_\downarrow|^2$ posterior al protocolo de eliminación de partículas. En letras blancas se indica la componente hiperfina que ocupa la región izquierda Ω_I o región derecha Ω_D del sistema en cuestión

4.3. Dinámica del dominio ferromagnético

El patrón creado manualmente, es decir, los dos dominios ferromagnéticos mostrados en la Fig. (4.4), es el punto de partida para estudiar la persistencia en el tiempo del orden magnético bajo la influencia de desorden aleatorio e interacciones débiles. De manera formal, la condiciones iniciales de las funciones ψ_\uparrow y ψ_\downarrow que evolucionan de acuerdo a las ecuaciones dinámicas de Gross-Pitaevskii (ver Ec. (4.1)) son:

$$\begin{aligned}\psi_\uparrow(x, y, t = 0) &= \phi_\uparrow^{N/2}(x, y) \\ \psi_\downarrow(x, y, t = 0) &= \phi_\downarrow^{N/2}(x, y),\end{aligned}\tag{4.5}$$

donde el superíndice $N/2$ hace referencia a los estados estacionarios posterior a la remoción de partículas referida en la sección anterior. Similar a los protocolos conocidos como “Quantum Quenches” [18, 78], al tiempo $t = 0$ se introduce el desorden no correlacionado en toda la red. Debido a que el doble dominio ferromagnético no es un estado estacionario de la red desordenada, exhibirá una evolución en el tiempo no trivial como función del desorden y las interacciones.

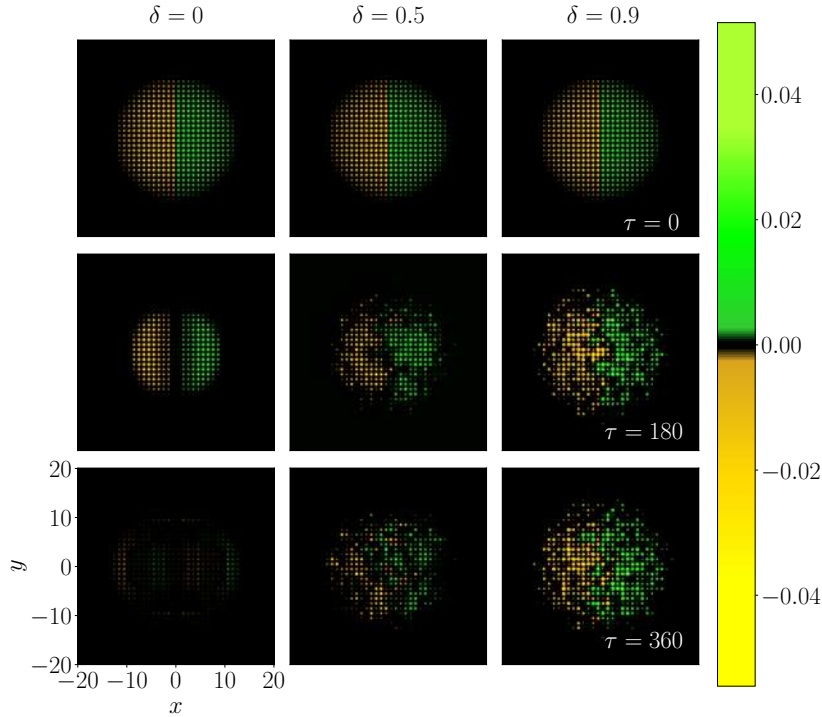


Figura 4.5: Gráficos de la magnetización local instantánea $m(x, y; t)$ para tres valores diferentes de la amplitud del desorden δ y tres tiempos distintos. Las distancias a lo largo de los ejes y y x están escaladas en términos de la constante de red a . El cociente entre los acoplamientos de interacción es de $g_{\uparrow\uparrow}/g_{\uparrow\downarrow} = 0.9$.

Para realizar un análisis robusto de las cantidades físicas, se calculó el promedio sobre un conjunto de 200 realizaciones del desorden para cada valor de la amplitud δ y un valor dado del cociente entre la interacción intra e interespecies $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$. Además del conjunto de realizaciones aleatorias, se consideraron tres diferentes valores de la razón de los acoplamientos de interacción $g_{\uparrow\uparrow}/g_{\uparrow\downarrow} = 0.9, 0.8$ y 0.7 . En virtud de que el objetivo principal es investigar cómo se degrada la magnetización de los dominios ferromagnéticos en función del tiempo, se estudió tanto la magnetización local izquierda m_I como la magnetización local derecha m_D ,

estas cantidades se pueden determinar a partir de la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} m_I &= \int \int_{\Omega_I} dx dy m(x, y; t) \\ m_D &= \int \int_{\Omega_D} dx dy m(x, y; t), \end{aligned} \tag{4.6}$$

donde $m(x, y; t) = |\psi_{\uparrow}(x, y; t)|^2 - |\psi_{\downarrow}(x, y; t)|^2$ es la magnetización total y Ω_I , Ω_D son las regiones izquierda y derecha del sistema, respectivamente (ver Fig. (4.4)). A causa de la elección particular del estado inicial, se tiene que $m_I(t = 0) = -0.5$ y $m_D(t = 0) = 0.5$. En la Fig. (4.5) se muestra la magnetización total $m(x, y; t)$ para tres valores diferentes de la amplitud de desorden $\delta = 0, 0.5$ y 0.9 , y tres diferentes tiempos $\tau = E_R t / \hbar = 0, 180$ y 360 . Cada panel está asociado a una realización de desorden dada y un valor fijo del cociente $g_{\uparrow\uparrow}/g_{\uparrow\downarrow} = 0.9$. Como se puede apreciar de la Fig. (4.5), para $\delta = 0$, las densidades $|\psi_{\uparrow}|^2$ y $|\psi_{\downarrow}|^2$ permanecen exactamente opuestas mientras que exhiben un comportamiento asimétrico para $\delta \neq 0$. Se observa también que incrementar el valor de la amplitud del desorden conduce a una ralentización de la dinámica de los dominios magnéticos. Es decir, el estado inicial permanece durante tiempos más prolongados, mostrando así una persistencia del orden magnético durante la evolución temporal. La Fig. (4.5) es representativa del comportamiento de la magnetización observada en diferentes tiempos y a distintos valores del desorden.

En la Fig. (4.6) se muestra la evolución en el tiempo de la magnetización en los lados derecho m_D e izquierdo m_I para diferentes magnitudes de la amplitud del desorden δ . La región sombreada alrededor de cada curva indica la desviación cuadrática media procedente de las 200 realizaciones de desorden. La dinámica temporal se computó durante un período de tiempo tal que con un desorden nulo y valor dado de las interacciones, la magnetización en los lados izquierdo y derecho se vuelve nula, es decir, hasta un tiempo en donde en ausencia de desorden el orden magnético se extingue por completo. A partir de las Fig. (4.6), se puede observar que para tiempos cortos $E_R t / \hbar < 50$, el comportamiento decreciente de la magnetización es muy similar, independiente de la magnitud δ de desorden. Sin embargo, para tiempos más grandes $E_R t / \hbar > 50$ cada curva de magnetización se aparta una de la otra, revelando así los efectos del medio desordenado. Además, a medida que aumenta δ , el orden ferromagnético en cada dominio se preserva más en el tiempo. En particular, para el mayor valor de la amplitud del desorden considerado, es decir, $\delta = 0.9$, el valor de la magnetización izquierda y derecha permanece inalterada alrededor de un 50%. Con respecto al valor del cociente $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$, se observa que en ausencia de desorden, el tiempo para el cual la magnetización se anula disminuye conforme $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ decrece. Sin embargo, en presencia de desorden $\delta \neq 0$, a medida que aumenta la razón $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ la anulación de la magnetización se acrecenta progresivamente con respecto a su valor inicial.

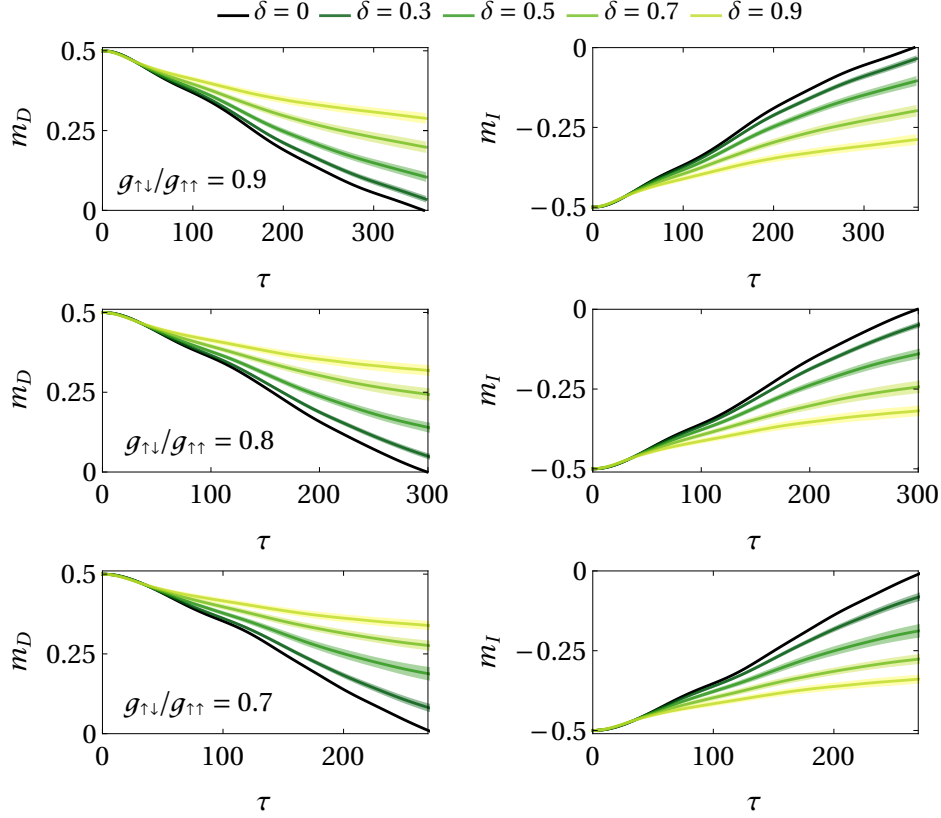


Figura 4.6: Magnetización en los lados derechos m_D e izquierdo m_I en función del tiempo para diferentes valores de amplitud del desorden δ . La razón de la interacción intra e interespecie $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ se indica en los panel izquierdos. Cada punto de las curvas es el resultado de promediar 200 realizaciones de desorden. El área sombreada alrededor de cada curva corresponde a la desviación estándar de las distintas realizaciones.

La evolución en el tiempo de las magnetización derecha puede ser descrita por el siguiente ansatz:

$$m_R(\tau) \approx b(\delta)\tau^{\gamma(\delta)}, \quad (4.7)$$

donde por simplicidad solo se tomará el caso de la magnetización derecha. Las curvas de los paneles derechos en la Fig. (4.6) se ajustaron a la ley de potencias de la Eq. (4.7) para tiempos intermedios, donde se desprecia el comportamiento transitorio inicial. Es importante enfatizar que los coeficientes γ y b también tienen una dependencia en el cociente de los acoplamientos de interacción $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$. En la Fig. (4.7) se exhibe el comportamiento de γ como función de δ para $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow} = 0.9, 0.8$ y 0.7 . Se observa que al incrementar el desorden, el exponente disminuye y por lo tanto la disminución del orden magnético se ve suprimido. En otras palabras, el dominio magnético inicial persiste. Es notable observar que para $\delta > 0.6$, el exponente de la dinámica toma valores muy similares, independientemente del la razón entre los acoplamientos inter e intraespecies. Esto indica que el desorden en la red se ha convertido en la contribución dominante durante la evolución transcurrida. El recuadro de

la Fig. (4.7) muestra el error del ajuste de ley de potencias en la evolución temporal de la magnetización.

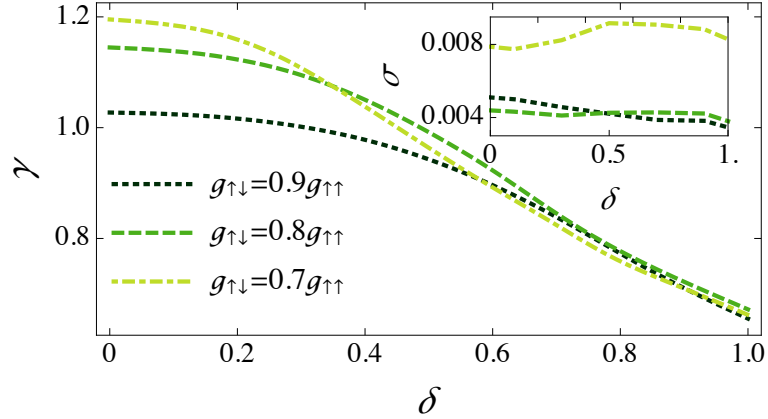


Figura 4.7: Ajuste de ley de potencia $m_R(\tau) \approx b(\delta)\tau^{\gamma(\delta)}$ para la magnetización derecha en función de δ , para tres valores diferentes de la relación de la interacción intra e interespecie. El recuadro muestra el error σ del ajuste.

4.4. Correlación de la magnetización

Otra cantidad que se ha utilizado en varios experimentos y que proporciona información crucial sobre cómo un dominio magnético cambia en el espacio y el tiempo [165, 166], es la función de correlación de la magnetización ponderado por la densidad, el cual se define de la siguiente forma:

$$G(\Delta\vec{r}, t) = \frac{\int_{\Omega} m(\vec{r}, t)m(\vec{r} + \Delta\vec{r}, t)d\vec{r}}{\int_{\Omega} \rho(\vec{r}, t)\rho(\vec{r} + \Delta\vec{r}, t)d\vec{r}}, \quad (4.8)$$

donde $m(\vec{r}, t) = m_D(\vec{r}, t) + m_I(\vec{r}, t)$ es la magnetización local total, $\rho(\vec{r}, t) = |\psi_{\uparrow}(\vec{r}, t)|^2 + |\psi_{\downarrow}(\vec{r}, t)|^2$ es la densidad total y $\Omega = \Omega_D + \Omega_I$. En la Fig. (4.8) se ilustra la función de correlación $G(\Delta\vec{r} = 0, t)$ para varios valores de la magnitud del desorden y una razón de las interacciones de $g_{\downarrow,\downarrow}/g_{\uparrow,\uparrow} = 0.9$.

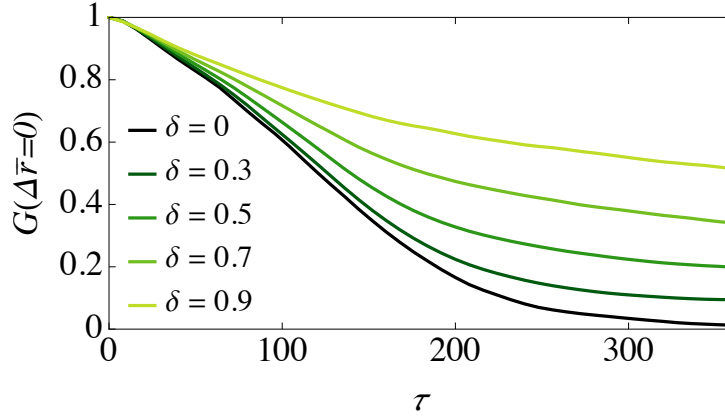


Figura 4.8: Función de correlación $G(\Delta\vec{r} = 0, t)$ como función del tiempo para diferentes valores de la amplitud del desorden δ y un cociente de interacción fijo $g_{\downarrow,\downarrow}/g_{\uparrow,\uparrow} = 0.9$. Cada curva es el resultado de promediar 200 realizaciones de desorden.

Nótese que para $\Delta\vec{r} = 0$, el correlador ponderado por la densidad coincide con la varianza de la magnetización. Para $t = 0$, la cantidad $G(\Delta\vec{r} = 0, t = 0)$ toma su valor máximo, ya que el estado inicial corresponde a dos dominios totalmente polarizados y con magnetización opuesta. Para $t > 0$, la varianza muestra un comportamiento decreciente, que se vuelve menos pronunciado a medida que aumenta la amplitud del desorden. De hecho, para la máxima magnitud de desorden considerado $\delta = 0.9$ y a un tiempo de $\tau = E_R t / \hbar = 360$, la disminución de la varianza es alrededor de 50% de su valor inicial. En contraste, $G(\Delta\vec{r} = 0, t)$ se vuelve nula a $\tau = E_R t / \hbar = 360$ en ausencia de desorden. Por consiguiente, el desorden estructural estimula la conservación de la polarización de los dominios magnéticos.

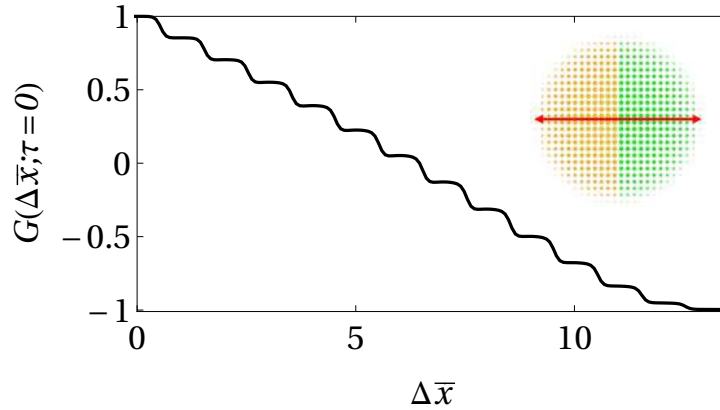


Figura 4.9: Función de correlación $G(\Delta\vec{x}, \tau = 0)$ previo a iniciar la dinámica. El recuadro muestra el perfil de la magnetización inicial y el eje, en color rojo, a lo largo del cual se determinó la variación espacial del correlador.

Dado que a $t = 0$ los componentes $|\downarrow\rangle$ y $|\uparrow\rangle$ se encuentran en las mitades izquierda y derecha de la red cuadrada, una elección natural para averiguar las variaciones espaciales del correlador $G(\Delta\vec{r}, t)$ es una línea que cruce perpendicularmente a las mitades de los dominios magnéticos. Por simplicidad se considera la recta $y = 0$, de esta manera la dependencia espacial del correlador se convierte en $G(\Delta\vec{r}, \tau) = G(\Delta\vec{x}, \tau)$. En la Fig. (4.9) se ilustra tanto el eje en el que se evaluó el correlador (recuadro) como la dependencia espacial del correlador a $t = 0$ para valores positivos de x . La forma de escalera del correlador de la Fig. (4.9) es debido a que la densidad del condensado en un sitio de la red dado y en la región que lo rodea permanece esencialmente constante. Para concluir el presente análisis, en la Fig. (4.10) se muestra la variación espacial de la función de correlación de la Ec. (4.8) para $\tau = 180$ y $\tau = 360$. A partir de Fig. (4.10), se observa un agotamiento del orden magnético en el espacio, en congruencia con los resultados previos la reducción del correlador es menos pronunciada a medida que el desorden incrementa. En el panel superior de la Fig. (4.10) se advierte que las curvas para desorden distinto colapsan cuando el correlador es nulo, esto indica la presencia de una pared de dominio remanente a la del estado inicial, la estructura espacial de los dominios se conserva para $\tau = 180$ a costa de una reducción de la polarización. Por el contrario, la dinámica a largo plazo, ilustrada en el panel inferior de la Fig. (4.10) muestra mayores discrepancias para cada valor de la amplitud del desorden. En particular, para $\delta = 0.3$ y $\delta = 0.5$ el orden magnético se ha extinguido casi por completo, quedando diminutos dominios en el centro de la red, en el caso $\delta = 0.7$ y $\delta = 0.9$ se observa un dominio espacialmente extenso pero cuya polarización se ha reducido a casi 50 %, en concordancia con los resultados de la magnetización derecha e izquierda.

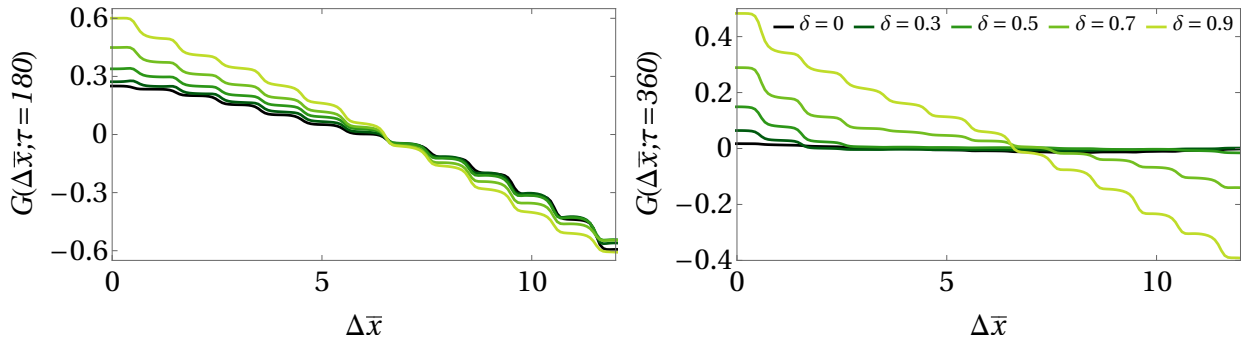


Figura 4.10: Función de correlación $G(\Delta\vec{x}, \tau)$ para $\tau = 180$ (panel superior) y $\tau = 360$ (panel inferior) como función de $\Delta\vec{x}$. El cociente de la interacción inter- e intraespecies se fijó al valor $g_{\downarrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow} = 0.9$

4.4.1. Conclusiones

En este capítulo se ha estudiado la dinámica de dos dominios ferromagnéticos que evolucionan bajo la influencia de confinamiento desordenado e interacciones de corto alcance. En

particular, se consideró el caso en el cual los dominios tienen polarización opuesta, densidades iguales y están inicialmente separados. El propósito de tal investigación fue establecer y caracterizar la conservación del orden magnético bidimensional cuando los efectos del confinamiento y las interacciones podrían llevar al sistema a anular el patrón inicial. Las polarizaciones opuestas del doble dominio fueron modeladas a través de un condensado de Bose-Einstein de dos especies de ^{87}Rb , el medio desordenado consistió en una red óptica cuadrada con desorden tipo speckle, además, en conformidad con los experimentos actuales, se confinó al condensado mediante una trampa armónica isotrópica. La descripción de la dinámica del doble dominio ferromagnético se abordó siguiendo el esquema de campo medio, es decir mediante la solución numérica de las ecuaciones de Gross-Pitaevskii. Para contar con un análisis confiable de la evolución en el tiempo de las observables medidas, se consideró un extenso conjunto de cálculos numéricos sobre diferentes realizaciones de desorden. De igual forma, se evaluó la acción de la interacción en el régimen miscible de las componentes, es decir cuando ambas densidades hiperfinas pueden coexistir en la misma región del espacio. Los resultados del estudio de la dinámica de la magnetización muestran que la degradación del orden magnético inicial, se vuelve cada vez más lenta a medida que aumenta el desorden estructural, mientras que, en contraste, los dominios se extinguen más rápido conforme incrementa el cociente de interacción entre las partículas. Aún más, el análisis de la función de correlación ponderado por la densidad, reveló también la persistencia del estado inicial tanto en el tiempo como en el espacio a medida que aumenta la magnitud del desorden. Este trabajo establece una posible plataforma para el diseño de protocolos específicos para estudiar los procesos de desmagnetización o los efectos de frustración asociados con la geometría de la red y el desorden espacial. La comprensión de la dinámica de dominios magnéticos se ha convertido en la actualidad en un tema relevante no solo en el contexto de la física fundamental sino también asociado a la aparición de nuevas tecnologías, como las relacionadas con el diseño de dispositivos de memoria magnética. Es de notarse que los resultados obtenidos en este capítulo para la preservación de los dominios magnéticos en presencia de desorden, son reminiscentes del fenómeno estudiado por P. W. Anderson en 1958 [3], que establece que bajo el efecto de desorden los estados electrónicos permanecen localizados y por ende el transporte se suprime. Ciertamente, debe señalarse que a diferencia de ese trabajo fundamental, en la investigación aquí presentada se consideró no solamente el papel del desorden, sino también el efecto de las interacciones en el régimen débil.

Capítulo 5

Conclusiones generales

En esta tesis se estudiaron los efectos de desorden y cuasiperiodicidad en el transporte de sistemas cuánticos con interacciones de corto y largo alcance. Como punto de partida, mediante el análisis del modelo de Anderson y de Aubry-André se establecieron los fundamentos esenciales del problema de localización unidimensional de una partícula. Esto es, la familiarización de los conceptos y herramientas empleadas para discernir la transición conductor-aislante de Anderson en los modelos antes mencionados. Además, se ahondó en las características principales que distinguen a la fase extendida y localizada. Por ejemplo, el transporte balístico peculiar en la fase extendida, el arresto de la difusión en el régimen localizado, la localización exponencial y la dimensión fractal, entre otros. Estos antecedentes, junto con la motivación de literatura previa y el desarrollo de los experimentos en simuladores cuánticos dieron origen a estudiar los efectos del desorden y la cuasiperiodicidad en novedosos sistemas cuánticos. En particular, el surgimiento de plataformas de simulación (iones atrapados, átomos en cavidades, moléculas polares, átomos de Rydberg, entre otros) en donde, el alcance de la movilidad de las partículas puede sintonizarse, posibilitó la emergencia del trabajo de cuasicristales unidimensionales con tunelaje de ley de potencia $r^{-\alpha}$. El enfoque de las dos investigaciones, en el contexto de los cuasicristales, fue en el marco de dos cuerpos, empleándose para su análisis el método de diagonalización exacta. Dentro de los resultados más notables se pueden mencionar los siguientes. Se encontró que en el caso de dos bosones de núcleo duro, la posibilidad de la formación de un estado ligado da origen, para una región extensa de valores de α , a un régimen de transporte en donde la cuasiperiodicidad restablece la difusión de las partículas. Este resultado está en alto contraste con la intuición general del impacto de la modulación cuasiperiódica en el transporte cuántico. El hallazgo mencionado pone de manifiesto que la difusión en sistemas cuánticos interactuantes es altamente dependiente de la energía del sistema, puesto que, cuando la formación de estados ligados es plausible, la dinámica exhibida discrepa en gran medida de la que se obtiene al considerar solamente partículas individuales. Con la ayuda del formalismo de la función de Green, se obtuvo de manera exacta el efecto de interacciones repulsivas y atractivas en la transición de localización de un par de bosones. En particular, se encontró que dicha transición es altamente sensible al signo de la interacción cuando el alcance del tunelaje de las partículas se incrementa. Este hallazgo no es discernible en cuasicristales con

tunelaje a primeros vecinos. Los diagramas de fase permitieron concluir que los pares ligados asociados a una interacción atractiva tienen una mayor prevalencia ante la localización, en comparación a los pares que son producto de interacción repulsiva.

Tras examinar el problema de localización en sistemas de dos partículas interactuantes, se prosiguió a realizar el análisis de la persistencia de orden magnético como función del desorden de un gas de Bose compuesto de dos proyecciones hiperfinas. La motivación principal para llevar a cabo el análisis de la dinámica en dicho sistema fue el paralelismo que dicho sistema tiene con la posibilidad de diseñar memorias cuánticas a partir del arresto de la dinámica de un sistema debido a desorden estructural. Con el objetivo de caracterizar el efecto conjunto de interacciones de contacto y desorden, se determinó numéricamente la evolución en el tiempo de un doble dominio ferromagnético, durante la dinámica se monitoreó la magnetización local del sistema, este parámetro mostró que la degradación del orden magnético inicial, se vuelve cada vez más lenta a medida que aumenta el desorden estructural, mientras que, en contraste, los dominos se extinguen más rápido conforme incrementa las interacciones entre las partículas. Aún más, el análisis de la correlación de la magnetización reveló la persistencia del doble dominio ferromagnético tanto en el tiempo como en el espacio a medida que aumenta la magnitud del desorden.

Si bien los resultados expuestos en esta tesis no dan una respuesta definitiva o completa al efecto en conjunto entre desorden e interacciones cuando la movilidad de las partículas es de corto o largo alcance, si se proporciona información relevante sobre las condiciones necesarias en las que un sistema interactuante arresta su dinámica, cuando el transporte se lleva a cabo por medio de pares de partículas, cuando las interacciones repulsivas o atractivas coadyuvan a localizar un par de partículas, entre otros. Existen diversas aristas para profundizar y extender el análisis elaborado en esta tesis. Por ejemplo, el destino y rol de los estados ligados cuando el número de partículas se incrementa, rol de formación de trimeros en el transporte cuántico, y el papel de la geometría en sistemas bidimensionales, entre otros.

Una ruta a continuar es el estudio del transporte cuántico de moléculas polares en redes ópticas bidimensionales desordenadas. Esta investigación es de relevancia tanto para los experimentos realizados con moléculas polares [23, 24] como también teórico ya que se expondría los efectos del desorden en sistemas bidimensionales con interacciones que decaen como $1/r^3$. De igual forma, el estudio de sistemas con más de dos partículas sería una dirección para proseguir con el trabajo presentado.

Apéndice A

Rumbo a la degeneración cuántica

En este apéndice se presenta información básica sobre las técnicas de confinamiento, enfriamiento y sintonización de interacciones utilizadas en plataformas de simulación cuántica. Es importante mencionar que no se pretende hacer una exposición exhaustiva sino dar una idea simple de cómo y porque funcionan estas técnicas. El conocimiento básico de los procedimientos experimentales permitieron entender desde la perspectiva teórica diversos experimentos que motivaron los modelos estudiados en esta tesis.

A.1. Técnicas de enfriamiento

A.1.1. Enfriamiento Doppler

Como fue sugerido en 1975 por los físicos Hänsch y Schawlow [167], el momento que lleva un fotón del láser puede ser empleado para modificar la velocidad de un átomo durante el ciclo de absorción-emisión. Para describir brevemente este proceso se considera el caso unidimensional. Supóngase un átomo que tiene dos estados $|g\rangle$ y $|e\rangle$ con una frecuencia de transición ν_a , el átomo se mueve con velocidad v en la dirección $+x$ y interactúa con un haz láser con frecuencia ν_L que se propaga en dirección opuesta. La frecuencia del láser es desintonizada de la frecuencia de transición del átomo por una cantidad $\delta/\nu_a \ll 1$:

$$\nu_L = \nu_a + \delta. \quad (\text{A.1})$$

En el sistema de referencia del átomo, el láser se mueve hacia él, experimentando un cambio en la frecuencia debido al efecto Doppler, la frecuencia percibida por el átomo ν'_L es:

$$\nu'_L = \nu_L \left(1 + \frac{v}{c}\right) = (\nu_a + \delta) \left(1 + \frac{v}{c}\right) \approx \nu_L + \delta + \frac{v}{c}\nu_L, \quad (\text{A.2})$$

donde se ha supuesto $v/c \ll 1$, siendo c la velocidad de la luz. Eligiendo $\delta = -(v/c)\nu_a$ se consigue que $\nu'_L = \nu_a$ resultando en la absorción del fotón. Después de la absorción, el átomo es llevado a su estado excitado $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ que decaerá por emisión espontánea de un fotón con la misma frecuencia ν_a pero en una dirección arbitraria. Cada vez que el ciclo de

absorción-emisión se repite, hay un cambio $\Delta p_x = -h\nu_L/c$ en el momento del átomo, donde h es la constante de Planck, el signo menos indica que el cambio en el momento es en la dirección opuesta al movimiento del átomo. Caso contrario al retroceso por la emisión, que al ser en una dirección arbitraria, tras múltiples ciclos absorción-emisión promedia a cero. Cuando el átomo es iluminado con rayos láser desintonizados desde los lados izquierdo y derecho (ver Fig. (A.1)), el escenario es el siguiente: si el átomo está estacionario, la tasa de absorción y por lo tanto la fuerza de frenamiento de los dos rayos láser es igual. Sin embargo, si el átomo se mueve hacia la derecha, entonces, por efecto Doppler, el rayo láser de la derecha está más cerca de la resonancia en comparación con el rayo láser izquierdo. Como consecuencia, el átomo dispersa más fotones del haz derecho y siente una fuerza hacia la izquierda. El panorama se invierte para un átomo que se mueve hacia la izquierda, es decir, el haz izquierdo está más cerca de la resonancia, dispersa más fotones de ese haz y, por lo tanto, siente una fuerza a la derecha. Recapitulando, la fuerza ejercida por el par de láseres siempre se opone al movimiento y se comporta como una fuerza de fricción que produce enfriamiento.

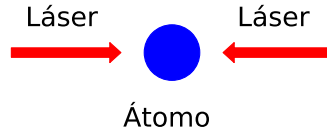


Figura A.1: Esquema de un átomo (círculo azul) en presencia de dos láseres contrapropagantes (líneas rojas).

Un tratamiento semi-clásico del ciclo de absorción-emisión [44] establece que la fuerza total ejercida sobre el átomo por el par de rayos láseres contrapropagantes puede ser aproximada como:

$$F = \frac{4\hbar I k}{I_s} \frac{kv(2\delta/\Gamma)}{[1 + (2\delta/\Gamma)^2]^2}, \quad (\text{A.3})$$

donde $\Gamma = 1/\tau$ es el tiempo de vida media del estado excitado, I/I_{sat} es la razón entre la intensidad del láser y la de saturación [44]. En la Fig. (A.2) se ilustra una caricatura de la fuerza resultante en la Ec. (A.2). Puede apreciarse como la fuerza cambia de signo cuando la velocidad cambia de dirección ($v < 0$ o $v > 0$), es decir se opone al movimiento y solamente cuando $v = 0$ la fuerza es nula. El modelo unidimensional considerado se puede extender fácilmente a 3D al tener tres conjuntos de haces contrapropagantes en las tres direcciones ortogonales. Usando enfriamiento Doppler es posible alcanzar temperaturas del orden de $100 \mu\text{K}$.

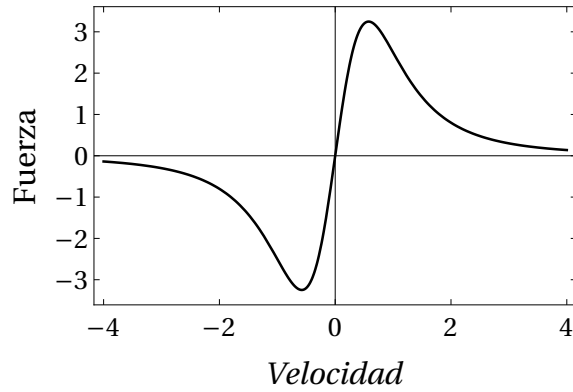


Figura A.2: Figura representativa de la fuerza en la Ec. (A.2) como función de la velocidad del átomo v .

A.1.2. Enfriamiento evaporativo

Las temperaturas alcanzados por enfriamiento láser son sorprendentemente bajas (μK), pero no son suficientes para producir la condensación de Bose-Einstein en gases a las densidades que son realizables experimentalmente (nK). En los experimentos realizados actualmente, la condensación de Bose-Einstein de gases atómicos se logra mediante la técnica de enfriamiento evaporativo como etapa final. Este método consiste en dejar escapar del confinamiento a las partículas más energéticas del gas, de tal manera que las partículas que quedan confinada tengan en promedio menor energía, lo que da lugar a un enfriamiento. En la Fig. (A.3) se ve una representación esquemática del enfriamiento evaporativo, la trampa armónica tiene una profundidad inicial V_i la cual es reducida a una profundidad final V_f dejando escapar a los átomos más energéticos. En la práctica, usando la técnica de enfriamiento evaporativo es posible alcanzar temperaturas del orden de nanokelvin.

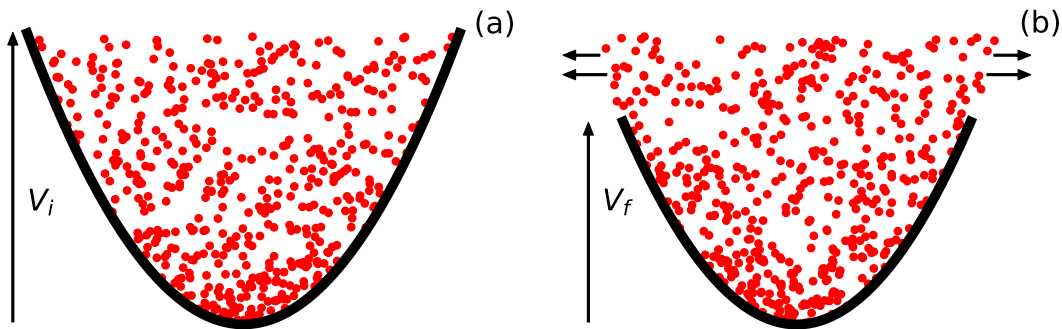


Figura A.3: Representación esquemática del enfriamiento evaporativo. (a) la trampa armónica tiene una profundidad inicial V_i . (b) se reduce la profundidad de la trampa dejando escapar a los átomos.

A.2. Confinamiento

A.2.1. Potenciales ópticos

En lo subsiguiente se presenta los conceptos básicos del confinamiento de átomos neutros en potenciales dipolares ópticos que resultan de la interacción con luz. Por simplicidad, para derivar las ecuaciones principales se considera un tratamiento semi-clásico [45]. Como a continuación se muestra, la fuerza dipolar óptica surge como resultado de la interacción entre un momento dipolar atómico inducido y el campo eléctrico que produce el dipolo. Cuando un átomo es iluminado con luz láser, el campo eléctrico del haz \mathbf{E} induce un momento dipolar atómico \mathbf{p} que oscila con la misma frecuencia ω del campo eléctrico:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \hat{\mathbf{e}}E(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \text{c.c.} \\ \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) &= \hat{\mathbf{e}}p(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \text{c.c.},\end{aligned}\tag{A.4}$$

donde c.c indica complejo conjugado, $\hat{\mathbf{e}}$ es el vector unitario de polarización, p es la amplitud del momento dipolar el cual se relaciona con la amplitud del campo eléctrico E de la siguiente forma:

$$p = \alpha E,\tag{A.5}$$

siendo α la polarizabilidad compleja del átomo la cual puede depender de la frecuencia ω . El potencial de interacción del momento dipolar inducido \mathbf{p} en el campo eléctrico \mathbf{E} es:

$$U_{\text{dip}} = -\frac{1}{2}\langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \rangle = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I(\mathbf{r}),\tag{A.6}$$

donde $\langle \dots \rangle$ indican promedio en el tiempo sobre los términos oscilantes del campo, $I = 2\epsilon_0 c |E(\mathbf{r})|^2$ es la intensidad de este último. El factor 1/2 en la Ec. (A.4) es producto de que el dipolo es inducido por el mismo campo con el que interactúa. La energía potencial del átomo en el campo es entonces proporcional a la intensidad I y a la parte real de la polarizabilidad. Es importante notar que la dependencia espacial de U_{dip} está determinada por como varía la intensidad del campo eléctrico. La fuerza dipolar \mathbf{F}_{dip} resulta del gradiente del potencial de interacción U_{dip} :

$$\mathbf{F}_{\text{dip}} = -\nabla U_{\text{dip}} = \frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) \nabla I(\mathbf{r}).\tag{A.7}$$

Con el fin de llevar la expresión del potencial dipolar U_{dip} en terminos de la frecuencia del láser ω y la frecuencia de transición óptica del átomo ω_0 , se sustituye la polarización atómica efectiva del modelo de Lorentz [44]. En este modelo se aproxima al electrón (masa m_e y carga elemental $-e$) como elásticamente ligado al núcleo con una frecuencia ω_0 . Tras resolver la ecuación clásica de movimiento del electrón se obtiene la siguiente expresión para la polarizabilidad:

$$\alpha = \frac{e^2}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_\omega},\tag{A.8}$$

donde $\Gamma_\omega = e^2\omega^2/(6\pi\varepsilon_0m_e c^3)$ es la tasa de amortiguamiento clásica debido a la pérdida de energía por radiación. La Ec. (A.8) puede reescribirse como:

$$\alpha = 6\pi\varepsilon_0c^3 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i(\omega^3/\omega_0^2)\Gamma} \quad (\text{A.9})$$

donde se ha definido la tasa de amortiguamiento clásico en la transición atómica como $\Gamma = \Gamma_{\omega_0} = (\omega_0/\omega)^2\Gamma_\omega$. Al tomar la parte real de la Ec. (A.9) y sustituirla en la Ec. (A.6) se deriva la siguiente expresión para U_{dip} :

$$U_{\text{dip}} = -\frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\mathbf{r}). \quad (\text{A.10})$$

En la mayoría de los experimentos, el láser se sintoniza relativamente cerca de la resonancia atómica, de tal forma que la desintonización $\Delta = \omega - \omega_0$ satisface $|\Delta| \ll \omega_0$. En este escenario el término con denominador $\omega + \omega_0$ en la Ec. (A.10) puede despreciarse y se puede establecer $\omega/\omega_0 \approx 1$, estas aproximaciones simplifican la expresión de U_{dip} ha:

$$U_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I(\mathbf{r}). \quad (\text{A.11})$$

De acuerdo a la última expresión cuando ω está por debajo de la frecuencia atómica ($\Delta < 0$ desintonización al rojo) el potencial dipolar es negativo y por ende los átomos se ven atraídos al campo de luz. En este caso, los mínimos del potencial se encuentran en posiciones donde la intensidad I es máxima. Cuando ω es mayor que la frecuencia de resonancia ($\Delta > 0$ desintonización al azul) el potencial dipolar repele los átomos del campo de luz y los mínimos de U_{dip} corresponden a los mínimos de la intensidad del láser.

A.2.2. Redes ópticas

Una red óptica es un potencial periódico de confinamiento que se genera como resultado del patrón de interferencia de un par o más de rayos láseres contrapropagantes. La onda estacionaria que se genera tiene período $\lambda_L/2$, siendo λ_L la longitud de onda del láser, y de acuerdo a lo establecido la subsección anterior, es capaz de confinar átomos neutros. El potencial de red óptica más simple posible es el formado por la superposición de dos haces contrapropagantes. Si se considera que los láseres tienen un número de onda $k_L = 2\pi/\lambda_L$ y frecuencia ω_L , entonces el traslape de los campos eléctricos de los haces puede expresarse como:

$$E(z, t) = E_0 \cos(k_L z - \omega t) + E_0 \cos(k_L z + \omega t) = 2E_0 \cos(k_L z) \cos(\omega t) \quad (\text{A.12})$$

Tomando el promedio temporal del modulo cuadrado de la Ec. (A.12) se obtiene:

$$\langle |E(z, t)|^2 \rangle = 2E_0^2 \cos^2(k_L z). \quad (\text{A.13})$$

Como la intensidad es proporcional al modulo cuadrado del campo eléctrico se tiene que el potencial óptico tiene la siguiente forma funcional:

$$U(z) = U_0 \cos^2(k_L z), \quad (\text{A.14})$$

siendo $U_0 \propto E^2$ la profundidad del potencial óptico el cual puede variarse al modificar la intensidad de los láseres. En la práctica, los láseres utilizados en experimentos no son ondas planas sino que tienen un perfil gaussiano en las direcciones ortogonales al vector de onda. Por este motivo, el potencial que se genera es en realidad el siguiente [41]:

$$U(z, r) = U_0 e^{-2r^2/w^2(z)} \cos^2(k_L x), \quad (\text{A.15})$$

donde $w(z)$ es conocido como la cintura del haz. Potenciales ópticos en dos o tres dimensiones pueden ser creados usando más pares de láseres contrapropagantes. Además, las redes ópticas se pueden generar con diferentes geometrías (triangular, hexagonal, kagome) [11, 41, 42] o bien, hacer que el confinamiento dependa del espín de las partículas [41].

A.2.3. Trampa de Penning

La trampa de Penning fue inventada por el físico Hans Dehmelt con el propósito de realizar mediciones de precisión del factor g de electrones utilizando un solo electrón atrapado. La trampa de Penning utiliza campos eléctricos y magnéticos estáticos para atrapar partículas cargadas en las tres dimensiones espaciales. Un fuerte campo magnético uniforme a lo largo del eje z confina la partícula radialmente, mientras que un débil campo eléctrico cuadrupolar [168] proporciona una fuerza restauradora lineal en la dirección axial [44, 169]. El campo eléctrico hace que las partículas cargadas oscilen armónicamente a lo largo del eje de la trampa (axial). El campo magnético en combinación con el campo eléctrico hace que las partículas se muevan en el plano radial con un movimiento que traza una epitrocoide [169]. Debido a que solo se aplican campos estáticos, las trampas de Penning tienen la ventaja de no exhibir micromovimiento ni calentamiento resultante de las partículas cargadas debido a campos dinámicos [44].

A.2.4. Trampa de Paul

La trampa de Paul fue inventada por el físico Wolfgang Paul con el principal propósito de realizar mediciones espectroscópicas de iones atrapados [44]. La trampa de Paul es un ejemplo inequívoco de estabilización dinámica. Utiliza la misma configuración de campo eléctrico estático de cuadrupolo de la trampa de Penning. Sin embargo, como no es posible crear una configuración estática de campos eléctricos que atrape partículas cargadas en las tres direcciones, la trampa de Paul requiere de un campo oscilante en el tiempo que produce una fuerza de confinamiento promedio en las tres direcciones. El campo en el centro de la trampa en presencia de un campo DC es un punto silla, con una fuerza hacia al centro (fuerza de confinamiento) en una dirección pero fuera de este (fuerza desestabilizadora) en la dirección ortogonal (ver Fig. (A.4)). No obstante, la partícula cargada puede quedar

atrapada de manera estable si el punto silla se gira lo suficientemente rápido como para que la partícula no tenga suficiente tiempo para escapar, lo que se puede lograr al tener un potencial oscilatorio. La rotación del punto silla crea un potencial efectivo en el tiempo que se comporta como un potencial armónico en todas las direcciones.

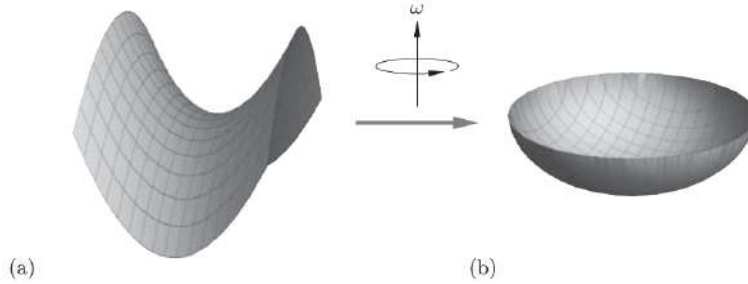


Figura A.4: (a) Potencial silla de montar creado por un campo eléctrico estable, este confina a una partícula cargada en una dirección pero deconfina en las dos ortogonales. (b) Potencial efectivo en el tiempo cuando el potencial de silla de montar en (a) oscila con una frecuencia ω más grande que el inverso del tiempo característico del movimiento de la partícula cargada. Figura extrahida de [44].

A.3. Potencial speckle

Una forma de crear potenciales desordenados en experimentos con gases atómicos ultrafríos es mediante el uso de potenciales tipo speckle. De forma concisa, un patrón speckle se forma usando un rayo láser monocromático, el cual se hace incidir a una placa de vidrio esmerilado para después ser enfocado al gas atómico por medio de una lente convergente. La placa de vidrio esmerilado transmite el láser sin alterar de manera significativa su intensidad, sin embargo, imprime una fase aleatoria a cada punto del frente de onda que emerge. De esta forma, el haz que llega a la lente y por ende a los átomos, interfiere constructiva y destructivamente, creando así un potencial con cimas y valles de forma aleatoria, tal y como se ejemplifica en la Fig. (A.5).

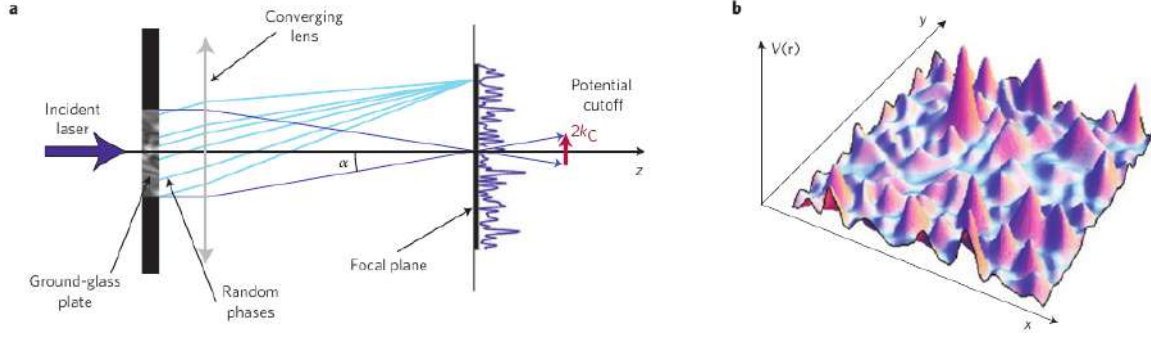


Figura A.5: (a) Configuración óptica de cómo se genera un potencial desordenado mediante la técnica de speckle. (b) Representación en dos dimensiones de un potencial speckle o desordenado. Figura extraída de [170].

A.4. Resonancias de Feshbach

De forma general, una resonancia de Feshbach en una colisión de dos partículas ocurre cuando un estado ligado en un canal cerrado se acopla resonantemente con el continuo de estados de dispersión de un canal abierto [41]. Las resonancias de Feshbach se han convertido en una herramienta crucial para sintonizar la magnitud y signo de las interacciones a través de la variación de un campo magnético [171, 172]. En lo subsecuente se discutirá de forma breve la física detrás de las resonancias de Feshbach. Considerese un par de átomos alcalinos con el electrón de valencia en el estado de momento angular orbital nulo. La proyección en el eje de cuantización del electrón de cada átomo se asume opuesta, por lo que los átomos se pueden denotar como \uparrow y \downarrow . El potencial de interacción de los átomos dependerá del acoplamiento de su espín. Por lo general, se denota con V_T al potencial en el estado triplete y V_s al asociado al singlete. Naturalmente, como se observa en la Fig. (A.6), V_T y V_s exhiben el mismo comportamiento de potencial de van der Waals a largas distancias, pero difieren considerablemente a distancias cortas, con una profundidad mayor para el potencial singlete que para el triplete. En concordancia con lo manifestado al inicio de esta subsección, el acoplamiento en el estado singlete corresponde a un canal de dispersión, usualmente llamado cerrado, mientras que el acoplamiento en el triplete es conocido como el canal abierto [171, 172]. Nótese que si bien el potencial de interacción depende del acoplamiento del espín, este no lo modifica, es decir, el acoplamiento del espín es el mismo antes y después de la colisión. Para que los canales se mezclen es necesario considerar que cada átomo tiene un núcleo con espín I que interactúa con el espín del electrón de valencia via la interacción hiperfina:

$$\hat{H}_{hf} = \frac{\alpha_{hf}}{\hbar^2} \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad (\text{A.16})$$

donde α_{hf} es la constante hiperfina [41]. Esta interacción hiperfina acopla los estados singletes y triplete. Además, en presencia de un campo magnético, los diferentes estados internos de los átomos \uparrow y \downarrow tienen un cambio de Zeeman diferente. En un experimento con gases atrapados magnéticamente, la diferencia de energía entre estos estados es, por lo tanto,

accesible experimentalmente. Es decir, la diferencia de energía entre los potenciales V_s y V_T es sintonizable (ver Fig. (A.6)). Juntando las piezas se tiene: dos átomos en el canal abierto colisionan a energías muy pequeñas $E \approx 0$, a través del campo magnético se ajusta la profundidad del potencial en el canal cerrado, de tal manera que uno de los estados ligados de este canal este en resonancia con la energía incidente de los átomos, como estos últimos tienen estructura interna, durante la colisión pueden modificar su acoplamiento de espín y por ende terminar siendo transferidos a un estado cuasi-ligado. La formación de estado débilmente ligado, da lugar a una resonancia de tipo Breit-Wigner [44] en la sección eficaz de dispersión

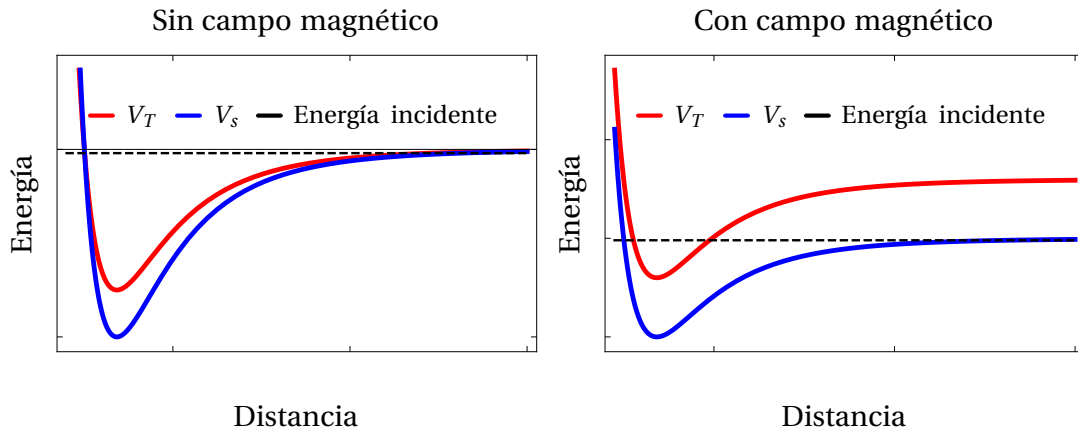


Figura A.6: Potenciales asociados al singlete V_s y el triplete V_T en ausencia y presencia de campo magnético.

Apéndice B

Deducción del Hamiltoniano de Aubry-André

El punto de partida es el Hamiltoniano unidimensional que describe partículas bosónicas con masa m confinadas en un potencial externo $V_{\text{ext}}(x)$. La interacción entre los bosones está descrita por un potencial de contacto, el cual se escribe en términos de la amplitud de dispersión de onda s . La expresión matemática del Hamiltoniano mencionado es la siguiente:

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{ext}}(x) \right) \hat{\psi}(x) \\ & + \frac{1}{2} \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x),\end{aligned}\tag{B.1}$$

donde $\hat{\psi}^\dagger(x)$ y $\hat{\psi}(x)$ son los operadores de campo de creación y aniquilación bosónica, los cuales satisfacen las reglas de conmutación subsecuentes:

$$\begin{aligned}[\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(x')] &= [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')] = 0 \\ [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}(x')] &= \delta(x - x').\end{aligned}\tag{B.2}$$

El potencial externo $V_{\text{ext}}(x)$ en la Ec. (B.1) está dado por la superposición de dos redes ópticas $V_{\text{ext}}(x) = V_p(x) + V_s(x)$, las cuales se denotarán por principal $V_p(x)$ y secundaria $V_s(x)$. La red óptica principal $V_p(x) = s_1 E_{R_1} \sin^2(k_1 x)$, se utiliza para crear el entorno de amarre fuerte donde las partículas se moverán, mientras que la secundaria $V_s(x) = s_2 E_{R_2} \sin^2(k_2 x)$ tiene el propósito de introducir la cuasiperiodicidad. La superposición de las dos redes ópticas da lugar al siguiente potencial bicromático:

$$\begin{aligned}V_{\text{ext}}(x) &= V_p(x) + V_s(x) = s_1 E_{R_1} \sin^2(k_1 x) + s_2 E_{R_2} \sin^2(k_2 x) \\ &= s_1 E_{R_1} \sin^2(k_1 x) + s_2 E_{R_1} \beta^2 \sin^2(\beta k_1 x + \varphi),\end{aligned}\tag{B.3}$$

donde $k_i = 2\pi/\lambda_i$ ($i = 1, 2$) son los vectores de onda asociados a la longitud de onda λ_i de la red óptica, s_i es la profundidad de la red, $E_{R_i} = \hbar^2/(2m\lambda_i^2)$ es la energía de retroceso, φ es una fase arbitraria y $\beta = \lambda_1/\lambda_2$ es el radio entre las longitudes de onda de las redes

ópticas. Cuando $s_2 \ll s_1$ y β es un número incommensurable, la red secundaria no altera considerablemente las posiciones de los mínimos que genera la red óptica principal. En su lugar, la introducción de la red óptica secundaria tiene el efecto de alterar la profundidad energética de cada sitio. Para el caso de una sola partícula en ausencia de la red óptica secundaria $s_2 = 0$, los eigenestados del Hamiltoniano en la Ec. (B.1) son funciones de onda de Bloch [1]. Como es bien conocido, combinaciones lineales de los estados de Bloch dan lugar a las funciones de Wannier $w_\nu(x - x_i)$, las cuales tienen la característica de estar localizadas en el sitio i de la red. Dado que se considera átomos a temperaturas muy cercanas al cero absoluto, la suposición de que las energías involucradas en el sistema son más pequeñas en comparación con la energía requerida para permitir poblaciones de segunda y más alta banda está bien justificada. Esta suposición permite ignorar el índice de banda ν en las funciones de Wannier y tener en cuenta solamente poblaciones en la primera banda, es decir en la banda de mínima energía. Para escribir el Hamiltoniano en la Ec. (B.1) en términos de operadores de creación y aniquilación de estados de Wannier, es conveniente expandir los operadores de campo $\hat{\psi}^\dagger(x)$ y $\hat{\psi}(x)$ en términos de esta base:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(x) &= \sum_i \hat{b}_i w(x - x_i) \\ \hat{\psi}^\dagger(x) &= \sum_i \hat{b}_i^\dagger w^*(x - x_i),\end{aligned}\tag{B.4}$$

Con \hat{b}_i^\dagger y \hat{b}_i los operadores de creación y aniquilación de una partícula en el estado de Wannier del sitio i , respectivamente. Como se mencionó previamente, cuando $s_2 \ll s_1$ la red secundaria no altera significativamente la posición de los mínimos generados por la red primaria, esta suposición permite sustituir el desarrollo de los operadores de campo en la Ec. (B.4) en el Hamiltoniano de la Ec. (B.1). Después de álgebra directa, se obtiene el siguiente resultado:

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} J_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_{i,j} \Delta_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i + \sum_{i,j,k,l} U_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l,\tag{B.5}$$

donde se ha definido las siguientes constantes:

$$\begin{aligned}J_{ij} &= - \int dx w^*(x - x_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + s_1 E_{R_1} \sin^2(k_1 x) \right) w(x - x_j) \\ \Delta_{ij} &= s_2 E_{R_1} \beta^2 \int dx w^*(x - x_i) \sin^2(\beta k_1 x + \varphi) w(x - x_j) \\ U_{ijkl} &= \frac{1}{2} \frac{4\pi a_s \hbar^2}{2m} \int dx w^*(x - x_i) w^*(x - x_j) w(x - x_k) w(x - x_l).\end{aligned}\tag{B.6}$$

El primer término describe costo energético del átomo para saltar del sitio i al sitio j con $i \neq j$. Notese que el término de tunelaje J_{ij} es proporcional al traslape entre funciones de Wannier centradas en sitios diferentes. En la aproximación de amarre fuerte, este traslape es esencialmente distinto de cero para primeros vecinos, es decir, cuando $j = i \pm 1$. Por esta razón, se puede despreciar los términos de tunelaje de segundos y vecinos superiores. Dado

que la red óptica principal es invariante ante traslaciones de longitud $a = \lambda_1/2$, la cantidad J_{ij} resulta ser independiente del sitio i , es decir, $J_{ij} = J$. El término J_{ii} representa un corrimiento en energía el cual adquiere el mismo valor para cada sitio, por tal motivo, se desprecia del Hamiltoniano. El segundo término en la Ec. (B.6) es el responsable de la cuasiperiodicidad, para llevarlo a la expresión usual del Hamiltoniano de Aubry-André, primero se hace uso de la identidad trigonométrica $\sin^2(\beta k_1 x + \varphi) = (1 - \cos(2\beta k_1 x + \varphi))/2$ con $\varphi' = 2\varphi$. Insertando esta relación en la segunda igualdad de la Ec. (B.6) se obtiene:

$$\Delta_{ij} = -\frac{s_2 E_{R_1} \beta^2}{2} \int dx w^*(x - x_i) \cos(2\beta k_1 x + \varphi') w(x - x_j), \quad (\text{B.7})$$

donde se ha despreciado el término constante. Nuevamente, para redes ópticas lo suficientemente profundas, la contribución dominante en la Ec. (B.7) proviene de los términos $i = j$, los cuales corresponden a una variación de energía en el sitio. Debido a que depende de i no puede omitirse tal y como se hizo con el término constante de sitio a sitio. Haciendo el cambio de variable $y = x - x_i$, se obtiene lo siguiente:

$$\Delta_{ii} = -\frac{s_2 E_{R_1} \beta^2}{2} \cos(2\pi\beta x_i + \varphi') \int dy \cos(2\beta k_1 y) |w(y)|^2. \quad (\text{B.8})$$

Usando la identidad trigonométrica:

$$\begin{aligned} \cos(2\beta k_1 y + 2\beta k_1 x_i + \varphi') &= \cos(2\pi\beta i + \varphi') \cos(2\beta k_1 y) \\ &\quad - \sin(2\pi\beta i + \varphi') \sin(2\beta k_1 y) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

y argumentos de simetría para identificar que la integral con $\sin(2\beta k_1 y)$ se anula se obtiene el término cuasiperiódico usual:

$$\Delta_{ij} = \Delta \cos(2\pi\beta x_i + \phi) \delta_{ij}, \quad (\text{B.10})$$

donde $\phi = \varphi' + \pi$ y Δ dado de la siguiente forma:

$$\Delta = \frac{s_2 E_{R_1} \beta^2}{2} \int dy \cos(2\beta k_1 y) |w(y)|^2. \quad (\text{B.11})$$

La contribución asociada a la interacción entre partículas también puede ser simplificada haciendo uso de la aproximación de amarre fuerte. El término dominante en U_{ijkl} corresponde al caso donde los cuatro índices son iguales $i = j = k = l$, el cual da lugar a una interacción en el sitio donde los átomos solo interactúan cuando se encuentran en el mismo sitio, la magnitud de la interacción toma la siguiente forma:

$$U = U_{iiii} = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{2m} \int dx |w(x)|^4. \quad (\text{B.12})$$

Recopilando todos los paso anteriores se obtiene el Hamiltoniano de Bose-Hubbard en presencia de una modulación cuasiperiódica,

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) \hat{n}_i + U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (\text{B.13})$$

donde la notación $\langle i, j \rangle$ indica suma a primeros vecinos y $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ es el operador de número en el sitio i . Para obtener el Hamiltoniano de Aubry-André se restringe al caso de una partícula, al considerar $U = 0$ en el Hamiltoniano en la Ec. (B.13) se obtiene el célebre Hamiltoniano de Aubry-André:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{b}_i^\dagger b_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) \hat{n}_i. \quad (\text{B.14})$$

Apéndice C

Deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii

En este apéndice se presentará una deducción simplificada de la ecuación de Gross-Pitaevskii y se expondrá de forma breve tanto la reducción dimensional como los métodos numéricos empleados para solucionar dicha ecuación. Por simplicidad, se considerará primero el caso de un condensado de Bose-Einstein escalar, posteriormente se mencionan los resultados concernientes a una mezcla de pseudo-espín 1/2. El punto de partida es el Hamiltoniano en tres dimensiones que describe partículas bosónicas con masa m confinadas en un potencial armónico $V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$ a temperatura nula $T = 0$. La interacción entre las partículas está descrita por un potencial de contacto, el cual se escribe en términos de la longitud de dispersión de onda s denotada por a . La expresión matemática del Hamiltoniano descrito es la siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \\ & + \frac{1}{2} \frac{4\pi \hbar^2 a}{m} \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

donde $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$ y $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ son los operadores de campo de creación y aniquilación los cuales satisfacen las reglas de conmutación bosónicas:

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}')] &= [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}')] = 0 \\ [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x}')] &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

La ecuación dinámica que genera el Hamiltoniano en la Ec. (C.1) se determina a partir de la ecuación de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), H], \quad (\text{C.3})$$

tras algo de álgebra la Ec. (C.3) resulta en la siguiente expresión:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) + g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t), \quad (\text{C.4})$$

donde se ha definido el parámetro de interacción $g = 4\pi\hbar^2 a/m$. En el esquema de campo medio, los operadores de campo $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t)$ y $\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)$ son aproximados por su valor esperado en el estado base:

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) &= \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \rangle_0 = \Psi^*(\mathbf{x}, t) \\ \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) &= \langle \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \rangle_0 = \Psi(\mathbf{x}, t)\end{aligned}\tag{C.5}$$

Nótese que en las segundas igualdades de la Ec. (C.5), Ψ representa una función y no un operador. Al sustituir la aproximación de campo medio en la Ec. (C.4), se obtiene la célebre ecuación dinámica de Gross-Pitaevskii:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right) \Psi(\mathbf{x}, t) + g |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \Psi(\mathbf{x}, t),\tag{C.6}$$

La expresión anterior es una ecuación diferencial parcial no lineal que describe la dinámica de un condensado de Bose-Einstein débilmente interactuante a temperatura nula. Las condiciones de aplicabilidad de la Ec. (C.6) están fundamentadas en cuatro principales aspectos. El primero de ellos atañe al número de partículas, el cual debe de ser suficientemente macroscópico para que el concepto de condensación de Bose-Einstein tenga sentido. Segundo, las interacciones deben ser débiles, este enunciado expresa que si $d = n^{-1/3} = (V/N)^{1/3}$ es la distancia promedio entre las partículas que componen el gas, se debe cumplir que $a \ll d$. Tercero, el gas debe ser diluido, es decir si r_0 es el rango del potencial de interacción, entonces es necesario que $r_0 \ll d$. Por último, la ecuación de Gross-Pitaevskii es estrictamente válida a temperatura nula $T = 0$. La segunda y cuarta condición permiten despreciar las fluctuaciones cuánticas y térmicas del gas y por ende poder aproximar el operador $\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)$ por la función $\Psi(\mathbf{x}, t)$. La ecuación dependiente del tiempo de Gross-Pitaevskii admite soluciones estacionarias, donde la función de onda del condensado $\Psi(\mathbf{x}, t)$ evoluciona en el tiempo de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}) e^{-i\mu t/\hbar},\tag{C.7}$$

siendo μ el potencial químico del gas. Al sustituir la Ec. (C.7) en la Ec. (C.6), se obtiene la ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right) \phi(\mathbf{x}) + g |\phi(\mathbf{x})|^2 \phi(\mathbf{x}) = \mu \phi(\mathbf{x}).\tag{C.8}$$

En la práctica, un condensado de Bose en dos dimensiones, estrictamente en cuasi-2D, se puede obtener a partir de un gas en 3D confinado fuertemente en la dirección transversal. En otras palabras si $(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ es la tripleta de frecuencias empleada para confinar el condensado, el régimen cuasi-2D es posible cuando la frecuencia transversal ω_z es mucho más grande que las frecuencias en el plano ω_x, ω_y , las cuales por simplicidad se consideran iguales $\omega_r = \omega_x = \omega_y$ y se denotan por una única cantidad, llamada frecuencia radial ω_r . En la Fig. (C.1-a y C.1-b) se ejemplifica el perfil de densidad de un gas de Bose cuando la tripleta de frecuencias son iguales y cuando la frecuencia tranversal es mucho mayor que la frecuencia

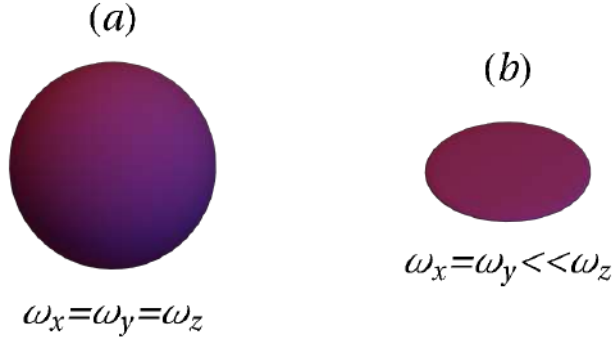


Figura C.1: Representación esquemática de un condensado de Bose-Einstein cuando: (a) la tripleta de frecuencias son iguales y (b) cuando la frecuencia transversal es mucho más grande que las frecuencias en el plano.

radial, respectivamente. Cuando $\omega_z \gg \omega_r$, $ng \ll \hbar\omega_z$ y la temperatura del gas T satisface que $\hbar\omega_z \gg k_B T$, el tiempo característico de la dinámica transversal es mucho mayor que el asociado al movimiento longitudinal [155]. Esta disparidad motiva a emplear una aproximación de tipo Bohr-Oppenheimer en los grados de libertad del gas bosónico, es decir, considerar que para los tiempos característicos del movimiento longitudinal, la dinámica transversal está, para todo propósito práctico, congelada. Dentro de esta aproximación, la función de onda tridimensional de un condensado se separa de la siguiente forma:

$$\Psi(x, y, z; t) \approx \phi_0^{HO}(z)\Psi_{2D}(x, y; t), \quad (\text{C.9})$$

donde $\phi_0^{HO}(z) = (\frac{m\omega_z}{\pi\hbar})^{1/4} e^{-m\omega_z z^2/2\hbar}$ es el estado base del oscilador armónico en la dirección transversal y $\Psi_{2D}(x, y; t)$ es la función que describe la dinámica del condensado en el plano. Al sustituir la aproximación anterior en la Ec. (C.6) e integrar los grados de libertad transversales, se obtiene la ecuación efectiva de Gross-Pitaevskii en 2D:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{2D}(x, y; t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\perp}^2 \Psi_{2D}(x, y; t)}{2m} + \frac{1}{2} \omega_r^2 (x^2 + y^2) \Psi_{2D}(x, y; t) + \frac{1}{2} \hbar\omega_z \Psi_{2D}(x, y; t) + \frac{g}{\sqrt{2\pi}\ell_z} |\Psi_{2D}(x, y; t)|^2 \Psi_{2D}(x, y; t), \quad (\text{C.10})$$

donde $\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ es el Laplaciano en dos dimensiones y $\ell_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ es la longitud natural del oscilador armónico transversal. De la expresión anterior se observa que el acoplamiento de interacción se rescala de la siguiente forma $g \rightarrow g/\sqrt{2\pi}\ell_z$. La ecuación independiente del tiempo que genera la Ec. (C.10) se muestra a continuación:

$$-\frac{\hbar^2 \nabla_{\perp}^2 \phi_{2D}(x, y)}{2m} + \frac{1}{2} \omega_r^2 (x^2 + y^2) \phi_{2D}(x, y) + \frac{g}{\sqrt{2\pi}\ell_z} |\phi_{2D}(x, y)|^2 \phi_{2D}(x, y) = (\mu + \hbar\omega_z/2) \phi_{2D}(x, y; t) = \mu' \phi_{2D}(x, y; t), \quad (\text{C.11})$$

Las Ecs. (C.10) y (C.11) corresponden a la reducción dimensional de la ecuación original de Gross-Pitaevskii, como se mencionó al hacer este proceso el coeficiente de interacción debe de reescalarsse apropiadamente. Para el caso de un condensado de Bose-Einstein de dos componentes hiperfinas $|\uparrow\rangle = |F = 1, m_F = -1\rangle$ y $|\downarrow\rangle = |F = 1, m_F = 1\rangle$ de ^{87}Rb , se tiene que el Hamiltoniano depende de dos operadores de campo, cada uno asociado a una componente hiperfina, la expresión matemática de dicho Hamiltoniano es la siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha} \int d^3x \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} \int d^3x g_{\alpha, \alpha'} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

donde ahora los coeficientes de interacción dependen si la colisión es entre átomos con la misma componente hiperfina $g_{\uparrow, \uparrow}$ y $g_{\downarrow, \downarrow}$ o bien entre distintas proyecciones de pseudo-espín $g_{\uparrow, \downarrow}$ y $g_{\downarrow, \uparrow}$. Tras determinar las ecuaciones de movimiento para cada operador de campo, hacer la aproximación de campo medio y la reducción dimensional 3D-2D, se obtiene las ecuaciones dinámicas bidimensionales de Gross-Pitaevskii para la mezcla:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_{\uparrow}}{\partial t} &= [\hat{H}_0 + g_{\uparrow, \uparrow} |\psi_{\uparrow}|^2 + g_{\uparrow, \downarrow} |\psi_{\downarrow}|^2] \psi_{\uparrow} \\ i\hbar \frac{\partial \psi_{\downarrow}}{\partial t} &= [\hat{H}_0 + g_{\downarrow, \downarrow} |\psi_{\downarrow}|^2 + g_{\downarrow, \uparrow} |\psi_{\uparrow}|^2] \psi_{\downarrow}, \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

donde ψ_{\uparrow} y ψ_{\downarrow} son las funciones de onda que representan a las componentes hiperfinas $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$, respectivamente, $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 + V_{\text{ext}}(x, y)$, con $\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ el Laplaciano en dos dimensiones, es la parte no interactuante de la mezcla. Nótese que se ha omitido el término $\hbar\omega_z/2$ puesto que al ser una constante no tiene un rol relevante en la dinámica. Adicionalmente, por simplicidad se ha omitido el subíndice 2D. De manera análoga al caso escalar, los acoplamientos de interacción intra e interespecies deben de reescalarsse debido a que las colisiones tienen lugar en un entorno cuasi-bidimensional. El factor de escalamiento es el mismo que el determinado en el caso escalar, es decir:

$$g_{\sigma, \sigma'} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{\sigma, \sigma'}}{m} \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell_z}}, \quad (\text{C.14})$$

siendo $a_{\sigma\sigma'}$ las longitudes de dispersión de la colisión entre átomos con componente hiperfina σ y σ' . Tras sustituir la propuesta estacionaria (C.7) para la mezcla se obtiene las ecuaciones estacionarias del gas de Bose de dos componentes:

$$\begin{aligned} \mu\psi_{\uparrow} &= [\hat{H}_0 + g_{\uparrow, \uparrow} |\psi_{\uparrow}|^2 + g_{\uparrow, \downarrow} |\psi_{\downarrow}|^2] \psi_{\uparrow} \\ \mu\psi_{\downarrow} &= [\hat{H}_0 + g_{\downarrow, \downarrow} |\psi_{\downarrow}|^2 + g_{\downarrow, \uparrow} |\psi_{\uparrow}|^2] \psi_{\downarrow}, \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Como puede observarse, el potencial químico es el mismo para cada componente hiperfina ya que se está suponiendo que en todo momento la mezcla está balanceada. Es decir, existe

un mismo número de átomos de cada proyección de pseudo-espín. Las Ecs. (C.12) y (C.14) fueron resueltas numéricamente para obtener la dinámica de los dominios ferromagnéticos del capítulo 4. En particular, para encontrar los estados estacionarios de la mezcla se utilizó el método de propagación en tiempo imaginario [173]. Este método consiste en hacer la sustitución $\tau \rightarrow it$ en las Ec. (C.13) de donde se obtiene:

$$\begin{aligned}\hbar \frac{\partial \psi_{\uparrow}}{\partial \tau} &= -[\hat{H}_0 + g_{\uparrow,\uparrow}|\psi_{\uparrow}|^2 + g_{\uparrow,\downarrow}|\psi_{\downarrow}|^2]\psi_{\uparrow} = -\hat{H}_{\uparrow}\psi_{\uparrow} \\ \hbar \frac{\partial \psi_{\downarrow}}{\partial \tau} &= -[\hat{H}_0 + g_{\downarrow,\downarrow}|\psi_{\downarrow}|^2 + g_{\downarrow,\uparrow}|\psi_{\uparrow}|^2]\psi_{\downarrow} = -\hat{H}_{\downarrow}\psi_{\downarrow},\end{aligned}\tag{C.16}$$

esta ecuación es reminiscente a la ecuación de difusión, la cual es utilizada para modelar la propagación de calor. En el caso que \hat{H}_0 no dependa explícitamente de τ , la solución formal de la Ec. (C.16) se escribe como:

$$\begin{aligned}\psi_{\uparrow}(\tau) &= e^{-\hat{H}_{\uparrow}\tau/\hbar}\psi_{\uparrow}(\tau = 0) \\ \psi_{\downarrow}(\tau) &= e^{-\hat{H}_{\downarrow}\tau/\hbar}\psi_{\downarrow}(\tau = 0),\end{aligned}\tag{C.17}$$

donde $\psi_{\uparrow}(\tau = 0)$ y $\psi_{\downarrow}(\tau = 0)$ son semillas o adivinanzas iniciales del estado estacionario. De acuerdo a la cerradura de las eigenfunciones de un operado Hermitiano, $\psi_{\uparrow}(\tau = 0)$ y $\psi_{\downarrow}(\tau = 0)$ pueden expandirse en términos de los eigenestados de la Ec. (C.15):

$$\begin{aligned}\psi_{\uparrow}(\tau = 0) &= \sum_{\ell} c_{\ell\uparrow}\phi_{\ell\uparrow} \\ \psi_{\downarrow}(\tau = 0) &= \sum_{\ell} c_{\ell\downarrow}\phi_{\ell\downarrow},\end{aligned}\tag{C.18}$$

al sustituir la expansión anterior en la Ec. (C.17) se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}\psi_{\uparrow}(\tau) &= \sum_{\ell} c_{\ell\uparrow}e^{-E_{\ell\uparrow}\tau/\hbar}\phi_{\ell\uparrow} \\ \psi_{\downarrow}(\tau) &= \sum_{\ell} c_{\ell\downarrow}e^{-E_{\ell\downarrow}\tau/\hbar}\phi_{\ell\downarrow},\end{aligned}\tag{C.19}$$

de acuerdo a esta última expresión cuando $\tau \rightarrow \infty$ la única componente que no se suprime es la asociada al estado de mínima energía, es decir, al propagar en tiempo imaginario la ecuación dinámica de Gross-Pitaevskii se obtiene la solución de las ecuaciones estacionarias. Es importante clarificar que al ser una ecuación de tipo difusivo la propagación en tiempo imaginario no conserva la norma de la función de onda por lo que, al utilizar un método numérico de propagación se debe, manualmente, imponer o normalizar la función de onda. A continuación se expondrá los métodos numéricos empleados para resolver la ecuación estacionaria y dinámica de Gross-Pitaevskii. Por simplicidad se expondrá el caso de la ecuación de Gross-Pitaevskii escalar. Para obtener el estado estacionario ϕ se utilizó el método de

paso dividido [160, 161] o también llamado, por su nombre en inglés, split-step. En general, este método se aplica a ecuaciones diferenciales con la siguiente forma:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = [\hat{\mathcal{L}} + \hat{\mathcal{N}}(\Psi, \tau)]\Psi, \quad (\text{C.20})$$

donde $\hat{\mathcal{L}}$ es un operador diferencial lineal y $\hat{\mathcal{N}}$ es uno no lineal. Bajo la suposición que tanto $\hat{\mathcal{L}}$ como $\hat{\mathcal{N}}$ no dependen de τ explícitamente, la solución general de la Ec. (C.16) puede escribirse como:

$$\Psi(\tau) = e^{(\hat{\mathcal{L}} + \hat{\mathcal{N}})\tau} \Psi(0), \quad (\text{C.21})$$

siendo $\Psi(\tau = 0)$ la condición inicial de la evolución temporal. De la regla de composición, el operador $e^{(\hat{\mathcal{L}} + \hat{\mathcal{N}})\tau}$ puede escribirse como un producto del mismo operador evaluado en rebanadas de tiempo $\delta\tau = \tau/N$:

$$e^{(\hat{\mathcal{L}} + \hat{\mathcal{N}})\tau} = \prod_{j=1}^N e^{(\hat{\mathcal{L}} + \hat{\mathcal{N}})\delta\tau} \quad (\text{C.22})$$

La expresión anterior es exacta y en caso de poder evaluarse no habría necesidad de requerir métodos aproximados. En el caso particular de la ecuación de Gross-Pitaevskii, $\hat{\mathcal{L}}$ representa la energía cinética del gas, mientras $\hat{\mathcal{N}}$ es la no linealidad o interacción efectiva de las partículas:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}} &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_{\perp}^2}{2m} + V_{\text{ext}}(x, y) \right) \\ \hat{\mathcal{N}} &= g|\psi(\mathbf{x}, t)|^2, \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

dado que no existe una base en común que diagonalice por separado a $\hat{\mathcal{L}}$ y $\hat{\mathcal{N}}$, el costo computacional de evaluar la exponenciación de la suma de los operadores es sumamente grande y en algunos casos imposible. Por tal motivo es necesario recurrir a métodos aproximados. En el esquema de paso dividido, el operador $e^{(\hat{\mathcal{L}} + \hat{\mathcal{N}})\delta\tau}$ se puede aproximar a segundo orden en $\delta\tau$ de la siguiente forma:

$$e^{(\hat{\mathcal{L}} + \hat{\mathcal{N}})\delta\tau} \approx e^{\delta\tau \hat{\mathcal{L}}/2} e^{\delta\tau \hat{\mathcal{N}}} e^{\delta\tau \hat{\mathcal{L}}/2} + \mathcal{O}(\delta\tau^3), \quad (\text{C.24})$$

donde $\mathcal{O}(\delta\tau^3)$ hace referencia que el error del método es cúbico con respecto a la rebanada temporal. De acuerdo a la Ec. (C.24), la evolución de τ a $\tau + \delta\tau$ se puede aproximar como:

$$\Psi(\tau + \delta\tau) \approx e^{\delta\tau \hat{\mathcal{L}}/2} e^{\delta\tau \hat{\mathcal{N}}} e^{\delta\tau \hat{\mathcal{L}}/2} \Psi(\tau). \quad (\text{C.25})$$

La utilidad de utilizar la aproximación de paso dividido subyace en el hecho que, la evaluación por separado de los operadores $e^{\delta\tau \hat{\mathcal{L}}}$ y $e^{\delta\tau \hat{\mathcal{N}}/2}$ es mucho menos costosa puesto que se conoce de antemano que el operador $e^{\delta\tau \hat{\mathcal{L}}}$ es diagonal en espacio de momentos, mientras que $e^{\delta\tau \hat{\mathcal{N}}/2}$ puede representarse fácilmente en el espacio de posiciones. Ya que se ha establecido el método

de paso dividido se explicará su aplicación en la práctica. Todos los cálculos numéricos se realizaron en una malla cuadrada de longitud $L = 40a$ y un número de puntos tanto en la dirección x como y de $N_x = N_y = 512$. De esta forma, la función de onda Ψ es representada por una matriz de tamaño $N_x \times N_y$ y cuyas entradas se denotan por $\Psi_{i,j}$. Para indicar el paso temporal se utiliza el superíndice n , de tal forma que $\Psi_{i,j}^n = \Psi_{i,j}(\tau = n\delta\tau)$. La evolución en tiempo imaginario necesita de una propuesta o semilla inicial de la matriz $\Psi_{i,j}^0$, en este trabajo siempre se utilizó como semilla un perfil Gaussiano con ruido aleatorio, en la Fig. (C.2) puede verse un ejemplo de la semilla $\Psi_{i,j}^0$. La evaluación numérica de la expresión en

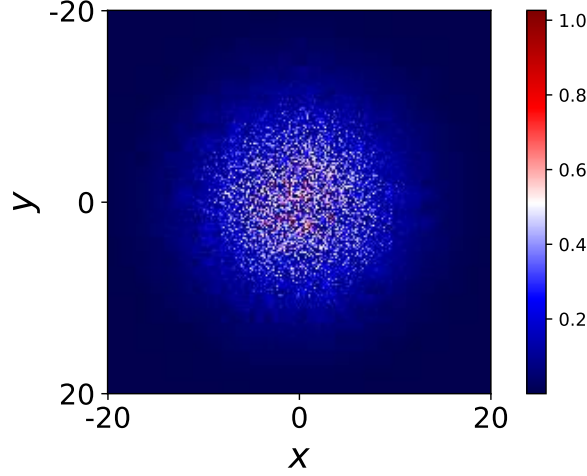


Figura C.2: Adivinanza de la matriz $\Psi_{i,j}^0$ utilizada para la propagación en tiempo imaginario.

la Ec. (C.25) fue implementada de la siguiente forma:

$$\Psi_{ij}^{n+1} = \mathcal{F}\mathcal{F}\mathcal{T}^{-1}\left[e^{-\delta\tau(k_x^2+k_y^2)/2}\mathcal{F}\mathcal{F}\mathcal{T}\left[e^{\delta\tau(V_{ij}+g|\Psi_{ij}^n|^2)}\mathcal{F}\mathcal{F}\mathcal{T}^{-1}\left[e^{-\delta\tau(k_x^2+k_y^2)/2}\mathcal{F}\mathcal{F}\mathcal{T}\left[\Psi_{ij}^n\right]\right]\right]\right] \quad (\text{C.26})$$

De forma textual, primero se calcula la transformada de Fourier del perfil Ψ_{ij}^n , posteriormente se multiplica por la exponenciación de la representación del Laplaciano en el espacio de Fourier, al resultado de esta multiplicación se le aplica la transformada de Fourier inversa para regresar al espacio de posiciones. En esta representación se multiplica el resultado previo por la exponencial de la suma del potencial de confinamiento $V_{ij} = V(x_i, y_j)$ y la interacción efectiva $g|\Psi_{ij}^n|^2$, enseguida se evalúa la transformada de Fourier de la multiplicación anterior, nuevamente se aplica la exponencial de la representación del Laplaciano en el espacio de Fourier, por último se usa la transformada de Fourier inversa para regresar el resultado al espacio de posiciones. Nótese que de acuerdo con la Ec. (C.25) la exponenciación del Laplaciano contiene un factor de $1/2$ extra. Como se mencionó previamente, la evolución en tiempo imaginario no conserva la norma de la función de onda por lo que a cada paso temporal $n \rightarrow n+1$ es necesario normalizar la matriz resultante Ψ_{ij}^{n+1} . El número de pasos en tiempo imaginario se determina a partir de dos criterios. El primero de ellos está asociado a la convergencia del potencial químico, es decir, en cada paso n se determina μ de la siguiente

expresión:

$$\mu^{n+1} = \sum_{ij} \Psi_{ij}^{n+1*} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_{\perp}^2}{2m} + V_{ij} + g|\Psi_{ij}^{n+1}|^2 \right) \Psi_{ij}^{n+1} \times (dxdy) \quad (\text{C.27})$$

donde $dy = L/512 \approx 0.07$ y $dx = L/512 \approx 0.07$ son los elementos diferenciales del grid numérico en la dirección y y x , respectivamente. Posterior a calcular el potencial químico μ^{n+1} , se compara con el calculado con el paso inmediato anterior, es decir, μ^n y se verifica si la diferencia es menor a una tolerancia ϵ :

$$\frac{|\mu^n - \mu^{n+1}|}{|\mu^{n+1}|} < \epsilon \approx 10^{-6}, \quad (\text{C.28})$$

si esto se cumple, la evolución temporal se detiene puesto que se tiene una aproximación razonable al estado estacionario. En caso contrario se continua la dinámica en tiempo imaginario hasta que se satisfaga este criterio de convergencia. El segundo y último criterio de convergencia está asociado a diferentes realizaciones de la semilla inicial Ψ_{ij}^0 , es decir diferente ruido aleatorio en la condición inicial. De manera simultánea se determina la evolución en tiempo imaginario de dos distintas adivinanzas Ψ_{ij}^0 , Φ_{ij}^0 , la dinámica concluye cuando se satisface el siguiente criterio:

$$\frac{\|\Psi_{ij}^n - \Phi_{ij}^n\|}{\|\Psi_{ij}^n\|} < \epsilon \approx 10^{-6}, \quad (\text{C.29})$$

es decir, cuando dos condiciones iniciales independientes convergen simultáneamente a una misma función de onda. La notación $\|\cdot\|$ denota la norma de Frobenius. Con los criterios de convergencia mencionados se concluye la discusión de los métodos numéricos empleados para obtener el estado estacionario de la ecuación de Gross-Pitaevskii.

La evolución en tiempo real se implementó usando Runge-Kutta de cuarto orden, el cual se aplica a ecuaciones diferenciales de tipo $\dot{y}(t) = f(t, y(t))$. De manera análoga al estado estacionario se expondrá el método de Runge-Kutta para el caso de un condensado escalar. En este escenario se tiene las siguientes correspondencias:

$$\begin{aligned} y &\rightarrow \dot{\Psi} \\ f(t, y(t)) &\rightarrow -i \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext} + g|\Psi|^2 \right] \Psi, \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

donde la notación $\dot{\Psi}$ denota derivación en el tiempo. De acuerdo a la Ec. (C.30), f no depende explícitamente de t . Al igual que en el caso estacionario, la función de onda se representa por una matriz cuadrada de 512×512 y el tiempo de evolución en rebanadas discretas $t = ndt$. De esta forma, $\Psi(x, y, t)$ es representada por Ψ_{ij}^n . El esquema de Runge-Kutta de cuarto orden requiere de la evaluación de las siguientes cantidades:

$$\begin{aligned} k_1^n &= f(\Psi_{ij}^n) \\ k_2^n &= f(\Psi_{ij}^n + k_1^n dt/2) \\ k_3^n &= f(\Psi_{ij}^n + k_2^n dt/2) \\ k_4^n &= f(\Psi_{ij}^n + k_3^n dt). \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

Una vez que se ha calculado los factores k' s, la evolución en el tiempo se determina por la siguiente expresión:

$$\Psi_{ij}^{n+1} = \Psi_{ij}^n + \frac{dt(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)}{6}. \quad (\text{C.32})$$

El algoritmo se comienza dando la condición inicial de la evolución Ψ_{ij}^0 , se evalúan los coeficientes k usando un paso temporal de $dt = 10^{-3}$. El Laplaciano de la función de onda se computó usando FFT, tal y como se describió en el método para el estado estacionario. Tras la evaluación de k_1 , k_2 , k_3 y k_4 se sustituye lo obtenido en la Ec. (C.32) para obtener Ψ_{ij}^1 . El procedimiento mencionado se repite hasta llegar al tiempo deseado de evolución $t_f = mdt$ donde m es el número de veces que se itera el método de Runge-Kutta de cuarto orden. Durante la evolución en el tiempo se monitoreó que en todo momento la norma de la función de onda se conservara. De igual forma, tras obtener el perfil final Ψ_{ij}^m se procedió a calcular la dinámica en sentido inverso, es decir, de $t_f = mdt$ a $t_i = 0$, de esta forma se computó $\|\Psi_{ij}^0 - \Psi_{ij}^{0 \rightarrow m \rightarrow 0}\|$, donde $\Psi_{ij}^{0 \rightarrow m \rightarrow 0}$ indica el perfil que se evolucionó dos veces. Si la norma de Frobenius de la diferencia entre Ψ_{ij}^0 y $\Psi_{ij}^{0 \rightarrow m \rightarrow 0}$ es menor a cierta tolerancia, entonces la evolución es reversible y por ende se respeta esta simetría, la cual está presente en la ecuación dinámica de Gross-Pitaevskii. Para concluir este apéndice, es importante mencionar que la implementación de los métodos numéricos expuestos se realizó usando una GPU (Graphics Processors Unit) Nvidia GTX 1080 de 8 GB. Los algoritmos en paralelo fueron escritos utilizando el ambiente PYCUDA¹, una librería que vincula el entorno de CUDA, escrito en C++, con el de Python. El uso de la tarjeta GPU permitió reducir drásticamente el tiempo total de cómputo. Por ejemplo, un cálculo que demora alrededor de 24 hrs en una GPU, tardaría de 2 a 3 semanas en un procesador en serie [155].

¹La documentación de PYCUDA puede encontrarse en <https://documen.tician.de/pycuda/>

Bibliografía

- [1] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, Solid state physics, Saunders College Publishing, Fort Worth, (1976).
- [2] F. Han, A modern course in the quantum theory of solids, World Scientific Publishing, Singapore, (2013).
- [3] P. W. Anderson, [Phys. Rev. **109**, 1492 \(1958\)](#).
- [4] F. Evers y A. D. Mirlin, [Rev. Mod. Phys. **80**, 1355 \(2008\)](#).
- [5] K. Slevin y T. Ohtsuki, [Phys. Rev. Lett. **78**, 4083 \(1997\)](#).
- [6] K. Slevin y T. Ohtsuki, [Phys. Rev. Lett. **82**, 382 \(1999\)](#).
- [7] S. M. Girvin y K. Yang, Modern condensed matter physics, Cambridge University Press, New York, (2019).
- [8] P. A. Mello y N. Kumar, Quantum transport in mesoscopic systems: complexity and statistical fluctuations, Oxford University Press, New York, (2010).
- [9] I. M. Georgescu, S. Ashhab y F. Nori [Rev. Mod. Phys. **86**, 153 \(2014\)](#).
- [10] R. Feynman, [International Journal of Theoretical Physics **21**, 467-488 \(1982\)](#).
- [11] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, y I. Bloch, [Nature **415**, 39-44 \(2002\)](#).
- [12] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn, y D. S. Jin, [Nature **424**, 47-50 \(2003\)](#).
- [13] M. Greiner, C. A. Regal, y D. S. Jin, [Nature **426**, 537-540 \(2003\)](#).
- [14] M. Greiner, C. A. Regal, y D. S. Jin, [Phys. Rev. Lett. **94**, 070403 \(2005\)](#).
- [15] Y.-J. Lin, R. L. Compton, K. Jiménez-García, J. V. Porto, y I. B. Spielman, [Nature **462**, 628-632 \(2009\)](#).
- [16] N. Goldman, G. Juzeliūnas, P. Öhberg, y I. B. Spielman, [Rep. Prog. Phys. **77**, 126401 \(2014\)](#).

- [17] M. Schreiber, S. S. Hodgman, P. Bordia, H. P. Lüschen, M. H. Fischer, R. Vosk, E. Altman, U. Schneider, y I. Bloch, *Science* **349**, 842-845 (2015).
- [18] J.-Y. Choi, S. Hild, J. Zeiher, P. Schauß, A. Rubio-Abadal, T. Yefsah, V. Khemani, D. A. House, I. Bloch, y C. Gross, *Science* **352**, 1547-1552 (2016).
- [19] J. Nilly, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Nouyer y A. Aspect, *Nature* **453**, 891-894 (2008).
- [20] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno y M. Inguscio, *Nature* **453**, 895-898 (2008).
- [21] D. Jaksch y P. Zoller, *Annals of physics* **315**, 52-79 (2005).
- [22] I. Bloch, J. Dalibard, y S. Nascimbène, *Nature Physics* **8**, 267-276 (2012).
- [23] K.-K. Ni, S. Ospelkaus, M. H. De Miranda, A. Peer, B. Neyenhuis, J. J. Zirbel, S. Kotochigova, P. S. Julienne, D. S. Jin y J. Ye, *Science* **322**, 231-235 (2008).
- [24] B. Yan, S. A. Moses, B. Gadway, J. Covey, K. R. A. Hazzard, A. M. Rey, D. S. Jin y J. Ye, *Nature* **501**, 521-525 (2013).
- [25] R. Blatt y C. F. Roos, *Nature Physics* **8**, 277-284 (2012).
- [26] B. P. Lanyon, C. Hempel, D. Nigg, M. Müller, R. Gerritsma, F. Zähringer, P. Schindler, J. T. Barreiro, M. Rambach, G. Kirchmair, M. Hennrich, P. Zoller, R. Blatt, y C. F. Ross, *Science* **334**, 57-61 (2011).
- [27] A. Browaeys y T. Lahaye, *Nature Physics* **16**, 132-142 (2020).
- [28] M. Saffman, T. G. Walker, y K. Mølmer, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2313 (2010).
- [29] A. Aspuru-Guzik y P. Walther, *Nature Physics* **8**, 285-291 (2012).
- [30] A. Peruzzo, M. Lobino, J. C. F. Matthews, N. Matsuda, A. Politi, K. Poulios, X.-Q. Zhou, Y. Lahini, N. Ismail, K. Wörhoff, Y. Bromberg, Y. Silberberg, M. G. Thompson, y J. L. O'Brien, *Science* **329**, 1500-15003 (2010).
- [31] J. Q. You y F. Nori, *Physics Today* **58**, 42-47 (2005).
- [32] J. Clarke y F. K. Wilhelm, *Nature* **453**, 1031-1042 (2008).
- [33] T. Byrnes, N. Y. Kim, K. Kusudo, y Y. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **78**, 075320 (2008).
- [34] T. Hensgens, T. Fujita, L. Janssen, X. Li, C. J. Van Diepen, C. Reichl, W. Wegscheider, S. Das Sarma, y L. M. K. Vandersypen, *Nature* **548**, 70-73 (2017).
- [35] S. F. Caballero-Benitez y I. B. Mekhov, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 243604 (2015).

- [36] C. Maschler, I. B. Mekhov, H. Ritsch, [Eur. Phys. J. D](#) **46**, 545-560 (2008).
- [37] S. Schiffer, J. Wang, X.-J. Liu y H. Hu, [Phys. Rev. A](#) **100**, 063619 (2019).
- [38] D. A. Abanin, E. Altman, I. Bloch y M. Serbyn, [Rev. Mod. Phys.](#) **91**, 021001 (2019).
- [39] A. Safavi-Naini, M. L. Wall, O. L. Acevedo, A. M. Rey y R. M. Nandkishore, [Phys. Rev. A](#) **99**, 033610 (2019).
- [40] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman y E. A. Cornell, [Science](#) **269**, 198-201 (1995).
- [41] I. Bloch, J. Dalibard y W. Zwerger, [Rev. Mod. Phys.](#) **80**, 885 (2008).
- [42] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, Ultracold atoms in optical lattices: simulating quantum many-body systems, Oxford University Press, United Kingdom, (2012).
- [43] H. J. Metcalf, P. van der Straten, Laser cooling and trapping, Springer, New York, (1999).
- [44] V. Natarajan, Modern atomic physics, CRC press Taylor and Francis Group, Boca Raton, (2018).
- [45] R. Grimm, M. Weidemüller y Y. B. Ovchinnikov, [Advances in atomic, molecular, and optical physics](#) **42**, 95-170 (2000).
- [46] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, [Phys. Rev. B](#) **40**, 546 (1989).
- [47] J. Hubbard, [Proceedings of the Royal Society A](#) **276**, 1365 (1963).
- [48] M. Aidelsburger, M. Lohse, C. Schweizer, M. Atala, J. T. Barreiro, S. Nascimbene, N. R. Cooper, I. Bloch y N. Goldman, [Nature Physics](#) **11**, 162-166 (2015).
- [49] K. Wintersperger, C. Braun, F. Nur Ünal, A. Eckardt, M. Di Liberto, N. Goldman, I. Bloch y M. Aidelsburger, [Nature Physics](#) **16**, 1058-1063 (2020).
- [50] M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler y I. Bloch, [Nature Physics](#) **9**, 795-800 (2013).
- [51] R. A. Hart, P. M. Duarte, T.-L. Yang, X. Liu, T. Paiva, E. Khatami, R. T. Scalettar, N. Trivedi, D. A. Huse y R. G. Hulet, [Nature](#) **519**, 211-214 (2015).
- [52] A. Schirotzek, C.-H. Wu, A. Sommer y M. W. Zwierlein, [Phys. Rev. Lett.](#) **102**, 230402 (2009).
- [53] N. B. Jørgensen, L. Wacker, K. T. Skalmstang, M. M. Parish, J. Levinsen, R. S. Christensen, G. M. Bruun y J. J. Arlt, [Phys. Rev. Lett.](#) **117**, 055302 (2016).

- [54] J. J. Zirbel, K.-K. Ni, S. Ospelkaus, J. P. D’Incao, C. E. Wieman, J. Ye y D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 143201 (2008).
- [55] J. J. Zirbel, K.-K. Ni, S. Ospelkaus, T. L. Nicholson, M. L. Olsen, P. S. Julienne, C. E. Wieman, J. Ye y D. S. Jin, *Phys. Rev. A* **78**, 013416 (2008).
- [56] J. W. Park, S. A. Will y M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 205302 (2015).
- [57] R. V. Krems, *Physical Chemistry Chemical Physics* **10**, 4079 (2008).
- [58] E. R. Hudson, C. Ticknor, B. C. Sawyer, C. A. Taatjes, H. J. Lewandowski, J. R. Bochinski, J. L. Bohn y J. Ye, *Phys. Rev. A* **73**, 063404 (2006).
- [59] D. Demille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002).
- [60] A. André, D. Demille, J. M. Doyle, M. D. Lukin, S. E. Maxwell, P. Rabl, R. J. Schoelkopf y P. Zoller, *Nature Physics* **2**, 636-642 (2006).
- [61] S. F. Yelin, K. Kirby y R. Côté, *Phys. Rev. A* **74**, 050301(R) (2006).
- [62] B. Gadway y B. Yan, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 152002 (2016).
- [63] V. M. Schäfer, C. J. Ballance, K. Thirumalai, L. J. Stephenson, T. G. Ballance, A. M. Steane, D. M. Lucas, *Nature* **555**, 75-78 (2018).
- [64] P. Richerme, Z.-X. Gong, A. Lee, C. Senko, J. Smith, M. Foss-Feig, S. Michalakis, A. V. Gorshkov y C. Monroe, *Nature* **511**, 198-201 (2014).
- [65] F. Zähringer, G. Kirchmair, R. Gerritsma, E. Solano, R. Blatt y C. F. Roos, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 100503 (2010).
- [66] H. Schmitz, R. Matjeschk, Ch. Schneider, J. Glueckert, M. Enderlein, T. Huber y T. Schaetz, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 090504 (2009).
- [67] L. Lamata, J. Casanova, R. Gerritsma, C. F. Roos, J. J. García-Ripoll y E. Solano, *New J. Phys.* **13**, 095003 (2011).
- [68] T. F. Gallagher, Rydberg atoms, Cambridge University Press, United Kingdom, (1994).
- [69] S. De Léséleuc, V. Lienhard, P. Scholl, D. Barredo, S. Weber, N. Lang, H. P. Büchler, T. Lahaye y A. Browaeys, *Science* **365**, 775-780 (2019).
- [70] J. Zeiher, J.-Y. Choi, A. Rubio-Abadal, T. Pohl, R. van Bijnen, I. Bloch y C. Gross, *Phys. Rev. X* **7**, 041063 (2017).
- [71] R. Samajdar, W. W. Ho, H. Pichler, M. D. Lukin y S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 103601 (2020).

- [72] M. A. Paalanen, T. F. Rosenbaum, G. A. Thomas y R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1896 (1983).
- [73] S. Bogdanovich, M. P. Sarachik y R. N. Bhatt, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 137 (1999).
- [74] D. S. Wiersma, P. Bartolini, A. Lagendijk y R. Righini, *Nature* **390**, 671-673 (1997).
- [75] T. Schwartz, G. Bartal, S. Fishman y M. Segev, *Nature* **446**, 52-55 (2007).
- [76] H. Hu, A. Strybulevych, J. H. Page, S. E. Skipetrov y B. A. van Tiggelen, *Nature Physics* **4**, 945-948 (2008).
- [77] S. Aubry y G. André, *Ann. Israel Phys. Soc.* **3**, 133 (1980).
- [78] M. Yan, H.-Y. Hui, M. Rigol y V. W. Scarola, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 073002 (2017).
- [79] P. G. Harper, *Proc. Phys. Soc. A* **68**, 874 (1955).
- [80] M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1954 (1979).
- [81] X. Deng, S. Ray. S. Sinha, G. V. Shlyapnikov y L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 025301 (2019).
- [82] G. A. Domínguez-Castro y R. Paredes *Phys. Rev. A* **104**, 033306 (2021).
- [83] Z. Xu, X. Xia y S. Chen, *Phys. Rev. B* **104**, 224204 (2021).
- [84] D. J. Thouless, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, 77 (1972).
- [85] D. J. Thouless, *Phys. Rev. B* **28**, 4272 (1983).
- [86] D. R. Grempel, S. Fishman y R. E. Prange, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 833 (1982).
- [87] R. E. Prange, D. R. Grempel y S. Fishman, *Phys. Rev. B* **29**, 6500 (1984).
- [88] M. Kohmoto, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1198 (1983).
- [89] M. J. Stephen y E. Akkermans *Phys. Rev. B* **33**, 3837 (1986).
- [90] S. Y. Jitomirskaya, *Ann. Math.* **150**, 1159 (1999).
- [91] M. Modugno, *New J. Phys.* **11**, 033023 (2009).
- [92] M. Modugno, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 102401 (2010).
- [93] G. A. Domínguez-Castro y R. Paredes, *Eur. J. Phys.* **40**, 045403 (2019).
- [94] L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarrera, C. Fort y M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 130404 (2007).

- [95] H. P. Lüschen, S. Scherg, T. Kohlert, M. Schreiber, P. Bordia, X. Li, S. Das Sarma y I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 160404 (2018).
- [96] J. B. Sokoloff, *Phys. Rev. B* **23**, 6422 (1981).
- [97] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [98] F. Liu, S. Ghosh y Y. D. Chong, *Phys. Rev. B* **91**, 014108 (2015).
- [99] X. Deng, V. E. Kravtsov, G. V. Shlyapnikov y L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 110602 (2018).
- [100] M. Saha, S. K. Mati y A. Purkayastha, *Phys. Rev. B* **100**, 174201 (2019).
- [101] J. P. Covey, L. De Marco, P. L. Acevedo, A. M. Rey y J. Ye, *New J. Phys.* **20**, 043031 (2018).
- [102] A. Szabó y U. Schneider, *Phys. Rev. B* **101**, 014205 (2020).
- [103] D. H. White, T. A. Haase, D. J. Brown, M. D. Hoogerland, M. S. Najafabadi, J. L. Helm, C. Gies, D. Schumayer y D. A. W. Hutchinson, *Nature Communications* **11**, 4942 (2020).
- [104] G. Dufour y G. Orso, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 155306 (2012).
- [105] F. Stellin y G. Orso, *Phys. Rev. Research* **2**, 033501 (2020).
- [106] F. Suzuki, M. Lemeshko, W. H. Zurek y R. V. Krems, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 160602 (2012).
- [107] F. Stellin y G. Orso, *Phys. Rev. B* **102**, 144201 (2020).
- [108] D. Thongjaoayum, S. Flach y A. Andreanov, *Phys. Rev. B* **101**, 174201 (2020).
- [109] T. Chattaraj y R. V. Krems, *Phys. Rev. A* **94**, 023601 (2016).
- [110] Y. Lahini, Y. Bromberg, D. N. Christodoulides y Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 163905 (2010).
- [111] A. Rubio-Abadal, J.-y. Choi, J. Zeiher, S. Hollerith, J. Rui, I. Bloch y C. Gross, *Phys. Rev. X* **9**, 041014 (2019).
- [112] T. Kohlert, S. Scherg, X. Li, H. P. Lüschen, S. D. Sarma, I. Bloch y M. Aidelsburger, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 170403 (2019).
- [113] D. A. Abanin, E. Altman, I. Bloch y M. Serbyn, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 021001 (2019).
- [114] R. Nandkishore y D. A. Huse, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **6**, 15-38 (2015).

- [115] P. Sierant y J. Zakrzewski, [arXiv:2109.13508 \[cond-mat.dis-nn\]](#) (2021).
- [116] X. Deng, G. Masella, G. Pupillo y L. Santos, [Phys. Rev. Lett. **125**, 010401](#) (2020).
- [117] A. Safavi-Naini, M. L. Wall, O. L. Acevedo, A. M. Rey y R. M. Nandkishore, [Phys. Rev. A **99**, 032114](#) (2019).
- [118] T. Botzung, D. Vodola, P. Naldesi, M. Müller, E. Ercolessi y G. Pupillo, [Phys. Rev. B **100**, 155136](#) (2019).
- [119] W. Li, A. Dhar, X. Deng, K. Kasamatsu, L. Barbiero y L. Santos, [Phys. Rev. Lett. **124**, 010404](#) (2020).
- [120] D. Raventós, T. Graß, M. Lewenstein, B. Juliá-Díaz, [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **50**, 113001](#) (2017).
- [121] D.-M. Storch, M. van den Worm y M. Kastner, [New. J. Phys. **17**, 063021](#) (2015).
- [122] K. Winkler, G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. H. Denschlag, A. J. Daley, A. Kantian, H. P. Büchler y P. Zoller, [Nature **441**, 853-856](#) (2006).
- [123] S. Mondal, A. Kshetrimayum y T. Mishra, [Nature **102**, 023312](#) (2020).
- [124] D. Petrosyan, B. Schmidt, J. R. Anglin y M. Fleischhauer, [Phys. Rev. A **76**, 033606](#) (2007).
- [125] M. Valiente y D. Petrosyan, [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **41**, 161002](#) (2008).
- [126] F. Mila y K. P. Schmidt, [arXiv:1005.2495\[cond-mat.str-el\]](#) (2010).
- [127] S. Sarkar y T. Sowiński, [Phys. Rev. A **102**, 043326](#) (2020).
- [128] Y. Lahini, M. Verbin, S. D. Huber, Y. Brombergm R. Pugatch y Y. Silberberg, [Phys. Rev. A **86**, 011603\(R\)](#) (2012).
- [129] N. C. Chávez, F. Mattiotti, J. A. Méndez-Bermúdez. F. Borgonovi y G. L. Celardo, [Phys. Rev. Lett. **126**, 153201](#) (2021).
- [130] G. L. Celardo, R. Kaiser y F. Borgonovi, [Phys. Rev. B **94**, 144206](#) (2016).
- [131] V. E. Kravtsov, O. M. Yevtushenko, P. Snajberk y E. Cuevas, [Phys. Rev. E **86**, 021136](#) (2012).
- [132] E. J. Torres-Herrera, A. M. García-García y L. F. Santos, [Phys. Rev. B **97**, 060303\(R\)](#) (2018).
- [133] R. Ketzmerick, G. Petschel y T. Geisel, [Phys. Rev. Lett. **69**, 695](#) (1992).
- [134] E. J. Torres-Herrera y L. F. Santos, [Ann. Phys. \(Berlin\) **529**, 1600284](#) (2017).

- [135] E. J. Torres-Herrera y L. F. Santos, [Phys. Rev. B](#) **92**, 014208 (2015).
- [136] R. K. Panda, A. Scardicchio, M. Schulz, S. R. Taylor, and M. Žnidarič, [EPL \(Europhysics Letters\)](#) **128**, 67003 (2020).
- [137] J. Šuntajs, J. Bonča, T. Prosen, and L. Vidmar, [Phys. Rev. E](#) **102**, 062144 (2020).
- [138] G. Vidal, [Phys. Rev. Lett.](#) **93**, 040502 (2004).
- [139] G. Vidal, [Phys. Rev. Lett.](#) **91**, 147902 (2003).
- [140] J. Haegeman, J. I. Cirac, T. J. Osborne, I. Pizorn, H. Verschelde, and F. Verstraete, [Phys. Rev. Lett.](#) **107**, 070601 (2011).
- [141] T. Koffel, M. Lewenstein, and L. Tagliacozzo, [Phys. Rev. Lett.](#) **109**, 267203 (2012).
- [142] D. L. Shepelyansky, [Phys. Rev. Lett.](#) **73**, 2607 (1994).
- [143] F. von Oppen, T. Wettig, and J. Müller, [Phys. Rev. Lett.](#) **76**, 491 (1996).
- [144] D. L. Shepelyansky, [Phys. Rev. B](#) **54**, 14896 (1996).
- [145] P. H. Song and D. Kim, [Phys. Rev. B](#) **56**, 12217 (1997).
- [146] P. Mujal, A. Polls, S. Pilati, and B. Juliá-Díaz, [Phys. Rev. A](#) **100**, 013603 (2019).
- [147] L. Pollet, [Comptes Rendus Physique](#) **14**, 712-724 (2013).
- [148] R. Gautier, H. Yao y L. Sanchez-Palencia, [Phys. Rev. Lett.](#) **126**, 110401 (2021).
- [149] D. Johnstone, P. Öhberg y C. W. Duncan, [J. Phys. Rev. A: Math. Theor.](#) **54**, 395001 (2021).
- [150] A. E. Niederle y H. Rieger, [New J. Phys.](#) **15**, 075029 (2013).
- [151] M. Lacki, S. Paganelli, V. Ahufinger, A. Sanpera y J. Zakrzewski, [Phys. Rev. A](#) **83**, 013605 (2011).
- [152] S. van Dijken, [Phys. Rev. X](#) **5**, 011010 (2015).
- [153] F. J. Himpsel, J. E. Ortega, G. J. Mankey y R. F. Willis, [Adv. Phys.](#) **47**, 511 (1998).
- [154] F. J. Himpsel, J. E. Ortega, G. J. Mankey y R. F. Willis, [J. Appl. Phys.](#) **91**, 8462 (2002).
- [155] R. Zamora-Zamora, G. A. Domínguez-Castro, C. Trallero-Giner, R. Paredes y V. Romero-Rochín, [J. Phys. Commun.](#) **3**, 085003 (2019).
- [156] A. Maksymov, P. Sierant y J. Zakrzewski, [Phys. Rev. B](#) **102**, 134205 (2020).

- [157] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne y E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
- [158] S. B. Papp, J. M. Pino y C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 040402 (2008).
- [159] F. Wang, X. Li, D. Xiong y D. Wang, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 015302 (2015).
- [160] P. Muruganandam y S. K. Adhikari, *Comput. Phys. Commun.* **180**, 1888 (2009).
- [161] D. Vudragović, I. Vidanović, A. Balaz, P. Muruganandam y S. K. Adhikari, *Comput. Phys. Commun.* **183**, 2021 (2012).
- [162] R. Zamora-Zamora, M. Lozada-Hidalgo, S. F. Caballero-Benítez y V. Romero-Rochín, *Phys. Rev. A* **86**, 053624 (2012).
- [163] B. Villaseñor, R. Zamora-Zamora, D. Bernal y V. Romero-Rochín, *Phys. Rev. A* **89**, 033611 (2014).
- [164] D. M. Weld, P. Medley, H. Miyake, D. Hucul, D. E. Pritchard y W. Ketterle *Phys. Rev. Lett.* **103**, 245301 (2009).
- [165] J. Guzman, G.-B. Jo, A. N. Wenz, K. W. Murch, C. K. Thomas y D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. A* **84**, 063625 (2011).
- [166] C. V. Parker, L.-C. Ha y C. Chin, *Nature Physics* **9**, 769-774 (2013).
- [167] T. W. Hänsch y A. L. Schawlow, *Optics Communications* **13**, 68-69 (1974)
- [168] J. D. Jackson, Classical electrodynamics 3rd edition, John Wiley & Sons, Inc, USA, (1998).
- [169] L. S. Brown y G. Gabrielse, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 233 (1986).
- [170] L. Sanchez-Palencia y M. Lewenstein, *Nature Physics* **6**, 87-95 (2010).
- [171] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne y E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
- [172] R. A. Duine y H. T. C. Stoof, *Physics Reports* **396**, 115-195 (2004).
- [173] R. H. Landau, M. J. Páez, and C. C. Bordeianu, Computational physics 3rd edition, WILEY-VCH, Germany.

p-Wave Superfluid Phases of Fermi Molecules in a Bilayer Lattice Array

Gustavo Alexis Domínguez-Castro and Rosario Paredes*

The superfluid $p = p_x + ip_y$ phases in an ultracold gas of dipolar Fermi molecules lying in two parallel square lattices in 2D are investigated. As shown by a two-body study, dipole moments oriented in opposite directions in each layer are the key ingredients in our mean-field analysis from which unconventional superfluidity is predicted. The $T = 0$ phase diagram summarizes our findings: stable and metastable superfluid phases appear as a function of both, the dipole–dipole interaction coupling parameter and filling factor. A first-order phase transition, and thus a mixture of superfluid phases at different densities, is revealed from the coexistence curves in the metastable region. The model predicts that these superfluid phases can be observed experimentally at 10 nK in molecules of NaK confined in optical lattices of size $a = 532$ nm. Other routes to reach higher temperatures require the use of subwavelength confinement technique.

energies,^[12–15] together with its partial attractiveness, open the possibility of producing Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) pairing. As recently proposed in refs. [16,17], due to the repulsive core between dipoles situated in a bilayer array, the *s*-wave pairing is suppressed and, instead, *p*-wave or higher partial wave superfluid phases arise in molecules with rotational moments $J = 0$ and $J = 1$.

Current experimental facilities allow the design of ad hoc systems in which the strength and anisotropy of dipole–dipole interactions can be controlled. For instance, very recently the strongly interacting regime in dipolar ¹⁶⁷Er atoms loaded in a 3D optical lattice has been reached.^[18]

In that system, the confinement provided

1. Introduction

Experimental evidence suggests that Cooper pairing in high T_c superconducting materials, in unconventional superconductors and in superfluid ³He, is not in the usual zero angular momentum state, instead, pairs are bound in a *d*-wave, *p*-wave, or higher-order superconducting order parameter.^[1–9] Also from phenomenology, the consensus is that in the particular case of cuprates and ruthenates, the transport with zero viscosity results from the formation of Cooper pairs traveling in planes.^[10,11] Such a frictionless transport, characterized by a non-*s*-wave energy gap, still remains as an open question because the mechanism that replaces the usual electronic pairing through phonons is unknown.

The research for unconventional superfluid phases has attracted the interest of the ultracold Fermi gases community for more than a decade. As is well known, the existent analogies between neutral superfluids and charged superconductors make ultracold atoms and molecules the best candidates to emulate condensed matter systems behavior. In particular, ultracold polar molecules can be used to access the physics of correlated pairs that form unconventional superfluid phases belonging to a 2D domain. The long-range character of dipolar interaction manifested in producing a contribution of all partial waves at low

by the lattice played a fundamental role since associated to it two-body and three-body inelastic collisions were significantly suppressed. This fact suggests that the superfluid transition must also be affected by the presence of the lattice structure. Indeed, within the context of high-temperature superconductors, the role of lattice confinement is essential for describing the transition to the superconducting phase as a function of doping.

With the aim of studying *p*-wave superfluidity, in this manuscript we consider ultracold dipolar Fermi molecules confined in a bilayer array composed of 2D optical lattices having square symmetry. As schematically illustrated in **Figure 1**, the dipole moments of molecules are oriented in opposite directions. The strong tail–tail repulsion between molecules lying in on-site positions in layers *A* and *B* inhibits pairing formation; in contrast, Cooper pairing is favored when molecules locate at different lattice sites. Thus, superfluidity arises as a consequence of the energy saving associated with a reduction of the electrostatic repulsion. An additional aspect that motivates this investigation is that the model proposed here shares similar properties to those exhibited by ruthenate superconductors, which have *p*-wave phases.^[19] The main analogy is that the frictionless transport of pairs traveling in 2D has the same origin; the strong electrostatic repulsion of fermions situated one on top of the other in different layers together with the attractive interaction of fermions located in other site configurations. Thus, besides the physics of superfluidity that can be addressed, our model can also be used to access the physics of unconventional ruthenate superconductors.

This paper is organized as follows. In Section 2 we describe the model, then, based on the analysis for scattered pairs and bound states presented in Section 3, we work in the BCS mean-field

G. A. Domínguez-Castro, Dr. R. Paredes
Instituto de Física
Universidad Nacional Autónoma de México
Apartado Postal 20-364, México D. F. 01000, Mexico
E-mail: rosario@fisica.unam.mx

DOI: 10.1002/andp.201800316

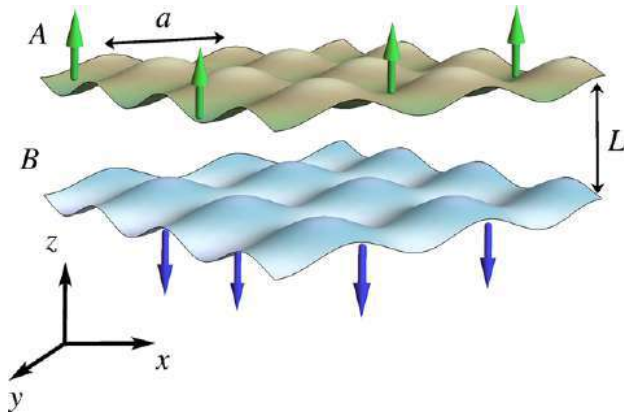


Figure 1. Schematic representation of dipolar Fermi molecules situated in a bilayer array composed of parallel optical lattices in two dimensions.

approach to study unconventional superfluidity in Section 4. As we shall demonstrate, the proposed model predicts a first-order phase transition between superfluid phases at different densities, as a function of the interaction strength. This is obtained from the stability criteria imposed by the second law of thermodynamics, which allows to recognize stable and metastable phases. The physics of the model is summarized in the phase diagram at zero temperature. In Section 5 we determine the superfluid density tensor with the purpose of establishing the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) transition temperature. Finally, we present our conclusions in Section 6.

2. Model

To study the emergence of unconventional superfluidity, we consider polar Fermi molecules placed in two parallel optical lattices in 2D separated by a distance L , being the structure of each layer a square lattice of size a lying in $x - y$ plane, $V_{\text{lat}}(x, y) = \sin^2 \frac{\pi}{a} x + \sin^2 \frac{\pi}{a} y$. Layers will be labeled as A and B . The dipoles are oriented perpendicularly to the layers and in opposite directions in different layers, see Figure 1. As delineated in ref. [17], this type of configuration can be created by setting polar molecules with rotational moments $J = 0$ and $J = 1$ in layers A and B , respectively. Then, applying an ac electric field, oriented perpendicularly to the lattices, gives rise to having effective dipole moments pointing in opposite directions.^[20] In this scenario, the potential of interaction between two molecules situated in different layers is

$$V_{\text{dip}}(r) = -d^2 \frac{(r^2 - 2L^2)}{(r^2 + L^2)^{5/2}} \quad (1)$$

where $-d^2$ is the scalar product of the effective dipole moments in the layers, L and r are the interlayer and intralayer separations, respectively.^[21] Molecules can move through sites in a given layer, but they cannot tunnel between layers. Given the arrangement illustrated in Figure 1, several interactions between pairs can arise, **such interactions being essential to define the possible phases or ordered structures as stripes or checkerboard patterns.**^[22–26] The purpose of this work is to study the p -wave superfluidity emerging from attractive interactions between molecules lying in layers

A and B . Since dipoles are oriented along opposite directions \hat{k} and $-\hat{k}$, and due to the discreteness of positions of the dipoles in the lattices, the election of the interlayer separation is a key parameter to ensure that on-site dipoles repel each other, while being attractive when dipoles in layers A and B are situated at any other configurations. We notice that for $\Lambda < 0.5$, the interaction energy between molecules lying in A and B layers is attractive except for $r = 0$. In this work we shall consider $\Lambda = 0.2$, being a dimensionless quantity defined in terms of the lattice spacing a as $\Lambda = L/a$. In addition to the effective dipole–dipole interaction strength $\chi = m_{\text{eff}} d^2 / a \hbar^2$, with $m_{\text{eff}} = \hbar^2 / 2ta^2$ the effective mass, superfluidity will be analyzed in terms of the filling factor n .

3. Two-Body Physics

Since the robustness of superfluidity lies on the existence of the molecule pair formation, one should warrant on the one hand that such pairs are not bound, but on the contrary, molecules in each pair belong to states in the continuum, and, on the other hand, that pairs contributing to the superposition that defines the many-body superfluid state are energetically favorable, that is, its electrostatic energy is compatible with the condition imposed by minimization of energy.

To get insight into the appropriate values for which the effective dipole–dipole interaction χ tends to form either scattered pairs or true bound state pairs, we examine the physics of two molecules. First, we investigate the bound energies E_B as a function of χ . In Figure 2 we plot the solutions for the binding energy given by the following equation:^[27,28]

$$1 = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \frac{V_{\text{dip}}(\mathbf{q})}{E_B - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}} \quad (2)$$

where $V_{\text{dip}}(\mathbf{q})$ is the Fourier transform of the interaction potential, $V_{\text{dip}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} V_{\text{dip}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, with \mathbf{q} the relative momentum between two molecules lying in layers A and B , and Ω the number of sites. $E_{\mathbf{K},\mathbf{q}} = -4t(\cos(K_x a/2) \cos(q_x a) + \cos(K_y a/2) \cos(q_y a))$, where \mathbf{K} is the center of mass vector in the first Brillouin zone. As one can see from Figure 2, for values of $\chi \lesssim 0.5$ molecules

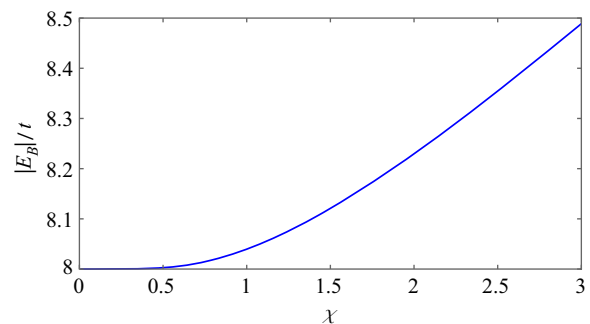


Figure 2. Absolute value of the binding energy of a dimer composed of two dipolar Fermi molecules lying in a bilayer array of squares lattices in 2D. The binding energy $|E_B|$ is plotted as a function of the effective dipole–dipole interaction strength χ . For $\chi \lesssim 0.5$, formation of bound pairs is negligible.

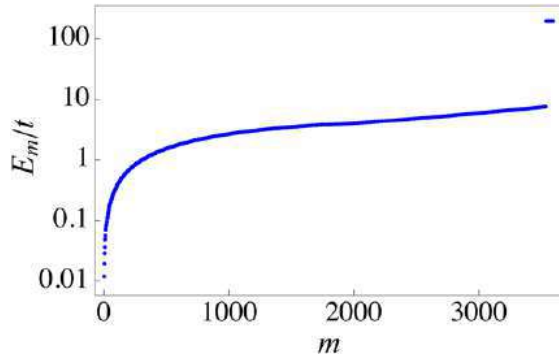


Figure 3. Energy spectrum of scattered pairs in 1D for $\chi = 0.4$ and $N_x = 60$. Each scattered pair is composed of two dipolar Fermi molecules lying in layers A and B. Notice that the energy has been shifted by $4t$ to better appreciate the full spectrum in logarithmic scale.

are not bound, and thus for lower values of χ we are dealing with purely fermionic physics. Notice that we have plotted $|E_B|/t$ and thus dimeric molecular states exist when $|E_B|$ exceeds $8t$.

In addition to the examination of the two-molecule binding energy in 2D, a simple analysis in 1D will allow us to delineate several conclusions for the scattered pairs, and in particular to establish which pairs must be considered in the many-body picture. For this purpose we solve by exact diagonalization the stationary Schrödinger equation

$$H|m\rangle = E_m|m\rangle$$

considering just two molecules, with Hamiltonian

$$H = -t \sum_{(i,j)} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j + h.c.) + \sum_{i,j} V_{dip}(i-j) a_i^\dagger b_j^\dagger b_j a_i \quad (3)$$

where m is a simple label to identify the eigenstates, which are linear superpositions of Fock states $|n_1^A, n_2^A, \dots, n_{\Omega}^A, n_1^B, n_2^B, \dots, n_{\Omega}^B\rangle$, being $n_i^{A/B} = 0$ or 1.

In **Figure 3** we plot the energy spectrum for $\chi = 0.4$ and $N_x = 60$. To better appreciate the full spectrum, the energy has been shifted by $4t$ and plotted in logarithmic scale. As one can see most of the energies lie in the range $[0, 8t]$, while a small set of 60 levels have a large energy $E \sim 200t$. The pairs in the first category are associated with scattered pairs in which one of the molecules occupies a given site in layer A and the other, placed in layer B, can be found in a nearest neighbor position (nn), or next nearest neighbor position (nnn), and so on. By contrast, scattered pairs having $E \sim 200t$ correspond to two molecules situated one on top of the other in layers A and B, that is, they occupy the same site in both layers (see top of **Figure 4**). We shall call this last configurations as on-site. We should stress that the energy necessary to form these types of pairs is huge compared to that required to form scattered pairs of type nn , nnn , or other configurations. This is why in the many-body analysis such pairs in on-site configurations must be neglected. This approximation resembles the one-layer homogeneous case where the hard core repulsive is neglected in the superfluid analysis, but of main importance in suppressing inelastic collisions.^[12,29] As expected, the bottom of the energy spectrum becomes shifted as the value of χ

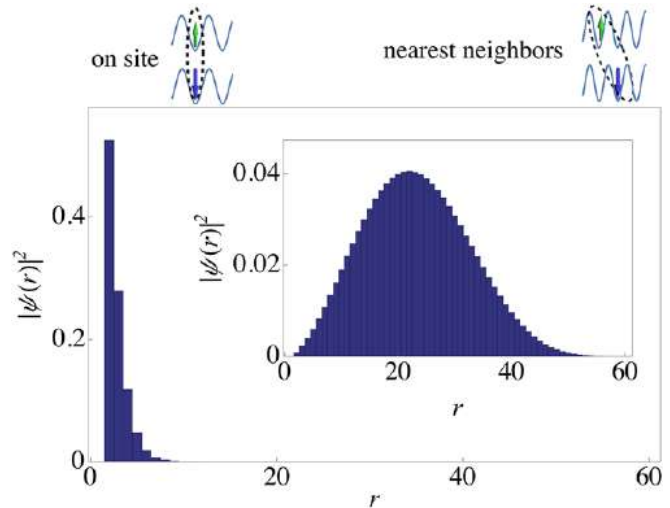


Figure 4. Probability distributions of scattered pairs of molecules situated in on-site ($r = 0$) and not on-site ($r \neq 0$) configurations for $\chi = 1.8$. The inset represents probability distributions for $\chi = 0.4$.

is increased. In fact, as such effective interaction strength grows, scattered pairs transform into localized dimers, resembling bound states. **To illustrate that both bound states and scattered pairs can be formed depending on the value of χ , in Figure 4 we plot a couple of eigenstates of Hamiltonian (3) for $\chi = 1.8$ (main figure) and $\chi = 0.4$ (inset). These eigenstates correspond to the lowest energy of their energy spectrum. As can be appreciated from the main panel of Figure 4, pair configurations beyond $r = 10$ are essentially null for $\chi = 1.8$, while showing that pairs at larger separations exist for $\chi = 0.4$.**

Two main statements can summarize the findings of our two molecule study. The first is that the BCS superfluid state should be investigated considering values of the effective interaction lower than $\chi < 0.5$. The second is that pairs of molecules lying in on-site configurations must be discarded in the N -body analysis since the energy cost of these pairs is two orders of magnitude greater than that associated with pairs in other configurations. One can also justify ignoring on-site pairs as a condition compatible with the minimization energy requirement of the BCS scheme.

4. Bardeen–Cooper–Schrieffer Superfluidity

Our starting point is the many-body Hamiltonian that represents the model depicted in Section 2 and considers the prescriptions, established in the previous section, on dipole–dipole interactions placed in on-site positions. With this in mind, the effective Hamiltonian of this dipolar Fermi system is given by

$$H = -t \sum_{(i,j)} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j + h.c.) + \sum_{i \neq j} V_{dip}(i-j) a_i^\dagger b_j^\dagger b_j a_i - \mu \sum_i (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) \quad (4)$$

here, the nearest neighbor tunneling strength has been identified with the usual label t , operators a_i (a_i^\dagger) and b_i (b_i^\dagger) destroy

(create) Fermi molecules in the lowest band at sites \mathbf{i} in layers A and B , respectively, and μ is the chemical potential. It is important to notice that the effective Hamiltonian (4) has the particle–hole symmetry $(a_i, b_i) \rightarrow (a_i^\dagger, b_i^\dagger)$ and $(a_i^\dagger, b_i^\dagger) \rightarrow (a_i, b_i)$, where the filling factor transform as $n \rightarrow 1 - n$, the nearest neighbor tunneling $t \rightarrow -t$, and the chemical potential as $\mu \rightarrow -\mu + \sum_i V_{dip}(\mathbf{i})$. As described above, due to long-range attractive interactions, molecules in different layers can form pairs at low temperatures, particularly p -wave pairing is the dominant symmetry as a result of Fermi statistics. To study this superfluid pairing state at $T = 0$ we use the self-consistent Hartree–BCS approximation. Due to no interlayer hopping, the Fock contribution to the decoupling of the interaction term is absent. Assuming pairing between \mathbf{k} and $-\mathbf{k}$ states, the mean-field Hamiltonian in momentum representation becomes

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}) + \Delta_{\mathbf{k}}^* b_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \quad (5)$$

where $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + n V_{dip}(\mathbf{k} = 0)$, $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ is the band energy, and $\Delta_{\mathbf{k}}$ is the superfluid order parameter given by

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} V_{dip}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle b_{-\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} \rangle$$

As standard, a Bogoliubov transformation leads us to obtain coupled equations for the energy gap and the number occupation

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} V_{dip}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right) \quad (6)$$

$$n_A = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) \right] \quad (7)$$

where the quasiparticle energy spectrum is $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ and $\beta = 1/(k_B T)$, with k_B the Boltzmann constant. To calculate the energy gap as a function of the effective dipole–dipole interaction χ and the filling factor n , we consider the physics provided by the two-body analysis of the previous section. That is, the N -body problem will be studied for $\chi \in [0, 0.5]$ and $n \in [0, 1]$.

In our calculations we solve self-consistently Equations (6) and (7), considering that each lattice has $\Omega = 121 \times 121$ sites, and equal filling factors $n_A = n_B$ in each layer.

4.1. $p_x + ip_y$ Superfluid Pairing

At $T = 0$ Equations (6) and (7) leads to a gap energy $\Delta_{\mathbf{k}}$ that exhibits an antisymmetric behavior characteristic of $p_x + ip_y$ pairing. For illustration purposes in **Figure 5** we show the obtained energy gap parameter for a coupling strength $\chi = 0.4$, and a filling factor $n = 0.16$. Solid and dashed lines correspond, respectively, to real and imaginary parts of $\Delta_{\mathbf{k}}$, plotted as a function of $k_x a$ and $k_y a$. In the upper figure we plot $\Delta_{\mathbf{k}}$ considering $k_y a = 0$, conversely, lower figure corresponds to $k_x a = 0$. As can be appreciated from these figures our model supports an almost pure $l = 1$ superfluid phase since $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \sin k_x a + i \sin k_y a$. As found

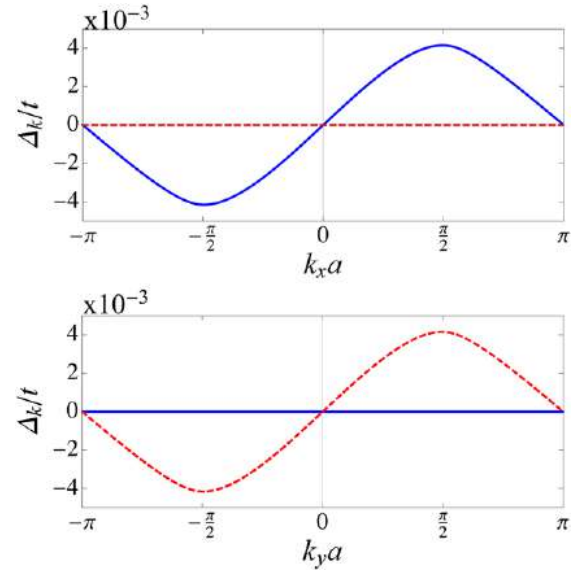


Figure 5. Energy gap parameter $\Delta_{\mathbf{k}}$ as a function of \mathbf{k} for filling factor $n = 0.16$, coupling strength $\chi = 0.4$, and $T = 0$. Upper and lower panels correspond to $k_y a = 0$ and $k_x a = 0$, respectively.

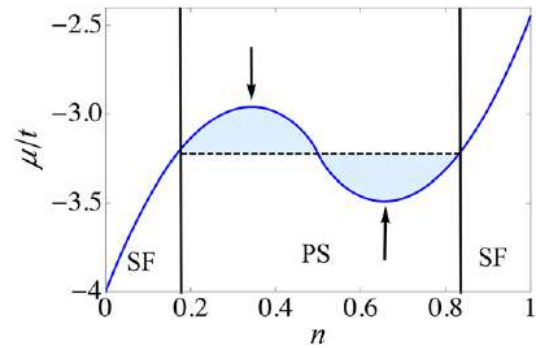


Figure 6. Chemical potential μ versus filling factor n at $T = 0$, and interaction strength $\chi = 0.4$. Black solid line separates stable from metastable p -wave superfluid phases. For values of filling fractions inside the range indicated with black arrows the superfluid is unstable.

by ref. [30] the solution $p_x + ip_y$ is the candidate for the most stable p -wave pairing, in contrast to p_z symmetry. Even more, the $p_x + ip_y$ pairing breaks time-reversal symmetry and it is a class D topological superfluid.^[31,32]

When the interaction strength or the filling factor is large enough, the system becomes unstable toward phase separation. In order to exemplify this behavior in **Figure 6**, we plot the chemical potential as a function of the filling factor n for an interaction strength $\chi = 0.4$, at zero temperature. Here, we should point out that, due to the appearance of logarithmic divergences at half filling, results near $n = 0.5$ must be taken with some caution. Our results can be compared with those made for single layer models^[33,34] where the Pauli exclusion principle prevents particles to occupy the same lattice site. Several conclusions can be made from the information encoded in **Figure 6**. Stability criteria for the compressibility $\kappa = 1/n^2(\partial n/\partial \mu)$ demands $\kappa > 0$, thus, the collection of points having negative derivative in the curve μ versus n cannot exist. Arrows at maximum and

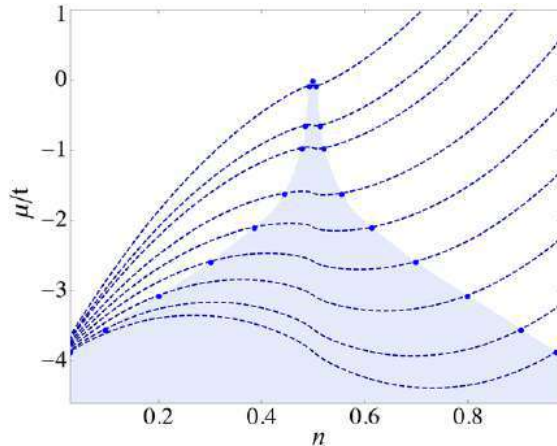


Figure 7. Chemical potential μ as a function of the filling factor n at $T = 0$. Dotted curves correspond to different values of interaction strength χ , the values of this parameter from bottom to top are 0.48, 0.44, 0.38, 0.32, 0.26, 0.2, 0.12, 0.07, and 0.01, respectively. Blue shaded region bounds metastable and unstable states.

minimum values of μ indicate the range of n for which the system is unstable. The phase separation region can be recognized from the Maxwell construction of equal areas, however due to the particle–hole symmetry, such a construction simplifies to determine the filling factor n_1 , which satisfies the following condition, $\mu(n_1) = \mu(n = 0.5) = \mu(1 - n_1)$. Blue shaded region in Figure 6 illustrates Maxwell construction of equal areas. Solid black lines separate stable and metastable SF phases, that is, within the region labeled PS—phase separation—the system becomes a mixture of SF phases at different densities.

4.2. Phase Diagrams

In **Figure 7** we illustrate several “iso-interaction” curves with the purpose of establishing the coexistence curve of our model. That is, values of μ for which the state is composed of superfluids at different densities. The blue shaded region bounds the metastable and unstable states referred before. The iso-interaction curves allow us to distinguish the first-order transition. The behavior of the derivative of the chemical potential with respect to filling factor suggest that a second-order phase transition must occur at half filling and $\chi = 0$, however, as we show below, the phase separation region shrinks at half filling and $\chi \rightarrow 0$, that is phase separation no longer exists in this case.

In **Figure 8** we show the phase diagram of our model as a function of χ and n . There one can observe both, the regions where stable superfluid phases exist, as well as regions where the system is unstable and consequently the superfluid become fragmented in superfluid phases having different densities. At a critical interaction of $\chi \approx 0.494$ the phase separation occurs between $n = 0$ and $n = 1$. When the interaction is above this critical value the system becomes a mixture of $n = 0$ and $n = 1$ densities, and no superfluid phases occur since the stable states are the zero particle or zero hole densities which are the well-known insulating states.

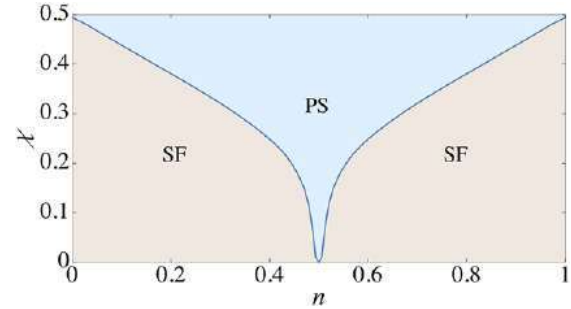


Figure 8. Phase diagram of the p -wave superfluid phases at $T = 0$ in terms of the dimensionless interaction coupling parameter χ and the filling factor n . Brown shaded regions identify stable superfluid phases, while the blue surface indicates the values of χ and n for which the system becomes phase separated and thus a mixture of superfluids at two densities coexist.

5. Berezinskii–Kosterlitz–Thouless Superfluidity

As is well known, in 2D systems no long-range order of conventional type emerges, instead, a BKT finite temperature transition characterized by topological ordering emerges,^[35–37] thus the p -wave superfluid phase predicted by our model must be of this type. To determine the critical temperature at which the dipolar Fermi system becomes a BKT superfluid we proceed as delineated in ref. [38]. By introducing a gauge transformation on the system Hamiltonian written in the space representation, $(a_i^\dagger, a_i), (b_i^\dagger, b_i) \rightarrow (a_i^\dagger e^{i\theta \cdot r_i}, a_i e^{-i\theta \cdot r_i}), (b_i^\dagger e^{i\theta \cdot r_i}, b_i e^{-i\theta \cdot r_i})$, where $\theta = (\frac{\theta_x}{aN_x}, \frac{\theta_y}{aN_y})$, it is possible to recognize that the density separates in both, normal and superfluid components. The superfluid density can be determined as the difference between the normal and superfluid free energies

$$\rho_{\alpha, \alpha'} = \lim_{\Theta \rightarrow 0} \frac{1}{Nt} \frac{F_\Theta - F_0}{\Theta_\alpha \Theta_{\alpha'}} = \frac{1}{Nt} \frac{\partial^2 F_\Theta}{\partial \Theta_\alpha \partial \Theta_{\alpha'}}, \quad \alpha = \{x, y\} \quad (8)$$

then, after performing a series expansion up to second order in θ_x and θ_y one can find the final expression for the superfluid density tensor

$$\rho_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{a^2 \Omega} \sum_{\mathbf{k}} \left(n(\mathbf{k}) \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha \partial k_{\alpha'}} - Y(\mathbf{k}) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_{\alpha'}} \right) \quad (9)$$

where $\alpha, \alpha' = x, y$, $n(\mathbf{k})$ the momentum distribution, and $Y(\mathbf{k}) = \beta \text{sech}^2(\beta E_{\mathbf{k}}/2)/4$ the Yoshida function. Since the off-diagonal matrix elements of the superfluid density tensor are negligible, the superfluid density is approximately given by $\rho \approx (\rho_{xx} + \rho_{yy})/2$. In order to estimate the critical temperature, one has to impose the following BKT condition:^[35–37]

$$\rho(T_{BKT}) = \frac{8}{\pi} k_B T_{BKT} \quad (10)$$

In **Figure 9**, the blue solid line represents the superfluid density as a function of temperature obtained from BCS mean-field scheme, while red dashed line represents the right hand side of Equation (10). We find that the crossing between blue curve and red dashed line takes place at $k_B T_{BKT} = 0.0028t$. For dipolar Fermi molecules of NaK^[39] confined in an optical lattice having

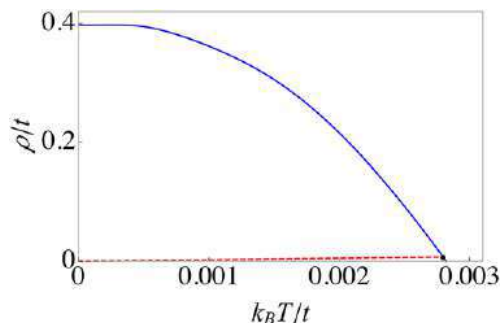


Figure 9. Blue solid line is the superfluid density as a function of temperature obtained from BCS mean-field scheme. The intersection of the red dashed line and blue curve corresponds to the critical temperature at which BKT transition occurs for an effective dipole–dipole interaction strength $\chi = 0.4$ and a filling factor $n = 0.16$.

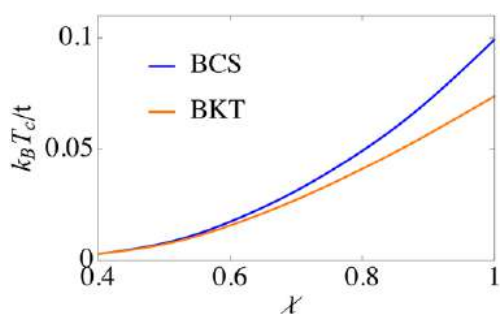


Figure 10. BCS and BKT critical temperatures as a function of the interaction parameter χ for a filling factor $n = 0.16$.

a wavelength $\lambda = 1064$ nm and a lattice depth of $V_0 = 5 E_r$,^[40] the estimated critical transition temperature is $T_{BKT} \approx 0.6$ nK. **One way in which such a low temperature can be raised is by increasing the effective dipole–dipole interaction.** This can be done by externally changing the electric field up to a certain value at which the dipole–dipole moment saturates, that is, reaches its maximum value.^[41] In **Figure 10** we plot the critical temperature as a function of the interaction parameter for both the BCS and BKT schemes. Using the same experimental parameters as above, the critical BKT temperature is $T_{BKT} \approx 10$ nK. It is important to stress here that the blue curve in Figure 10, associated to the BCS regime, must be considered with caution since it corresponds to values of the effective interaction above 0.5.

Another route to achieve higher temperatures is by means of the use of subwavelength lattices,^[42–44] where we may have $L \approx 50$ nm. In this scenario, the critical temperature for a Fermi gas of NaLi molecules, under the same condition $V_0 = 5 E_r$ is about $T_{BKT} \approx 4$ nK.

6. Final Remarks

We have investigated unconventional p -wave superfluidity in a model of dipolar Fermi molecules confined in two parallel optical lattices in 2D, separated at a fixed distance. Associated with the electrostatic interaction of dipole moments of molecules lying perpendicular to the lattice, and oriented in opposite directions in different layers, two types of situations arise in our model:

repulsive interactions for molecules situated at the same lattice site, while attractive interactions are experienced in other cases. The nature of these electrostatic interactions together with the possibility of changing the effective interaction strength, are responsible for the $\mathbf{p} = p_x + ip_y$ superfluid phases emerging in our model. To determine the existence of superfluid phases we first addressed the two-body physics and demonstrated that, depending on the value of the effective interaction coupling between molecules, two-body bound states or scattered states are formed. The many-body physics analyzed within the Hartree–BCS mean-field scheme leads us to conclude that resulting from both long-range and anisotropic characters of dipolar interactions, the energy gap parameter shows an antisymmetric behavior, characteristic of $\mathbf{p} = p_x + ip_y$ phases. The phase diagram at $T = 0$ shows stable and metastable phases, the latter being a mixture of superfluid phases at different densities, thus providing evidence of a first-order phase transition between both superfluids. We also estimate the BKT transition temperature of the $\mathbf{p} = p_x + ip_y$ superfluid phase. **Considering the recent experimental realization of dipolar ultracold Fermi molecules of NaK, our model predicts that the transition can be observed at $T_{BKT} = 0.6$ nK for $\chi = 0.4$ while $T_{BKT} = 10$ nK for $\chi = 1.0$.** Using the recently proposed subwavelength lattice technique yields temperatures around 4 nK for $\chi = 0.4$. Compared with other p -wave proposals, the model discussed here represents a genuine candidate to simulate the physics of the ruthenates, since it contains the strong on-site repulsion, which is an essential ingredient in unconventional superconductivity of those compounds. In addition, both, our model and ruthenate compounds, share the peculiarity of being composed of layered structures. In this context it is important to highlight that current techniques in lattice measurements^[45,46] offer single site resolution which could be an essential tool in detecting unconventional superfluidity. Finally, we should add that this work can be generalized to explore Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) phases as those studied in refs. [47,48] but with the inclusion of the lattice confinement.

Acknowledgements

The authors acknowledge useful discussions with A. Camacho-Guardian and V. Romero-Rochin. G.A.D.-C acknowledges a CONACYT scholarship. This work was partially funded by grants IN105217 DGAPA (UNAM) and 255573 CONACYT.

Conflict of Interest

The authors declare no conflict of interest.

Keywords

p -wave superfluids, ultracold dipolar Fermi gases, unconventional superfluidity

Received: August 21, 2018

Revised: October 31, 2018

Published online:

- [1] A. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **1975**, *48*, 357.
- [2] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, *Rev. Mod. Phys.* **2000**, *72*, 969.
- [3] G. E. Volovik, *Series in Modern Condensed Matter Physics*, World Scientific, Singapore **1992**.
- [4] J. Klinder, *Rev. Mod. Phys.* **2009**, *81*, 1551.
- [5] M. Rice, *Science* **2004**, *306*, 1142.
- [6] G. R. Stewart, *Adv. Phys.* **2017**, *66*, 66.
- [7] E. Talantsev, W. P. Crump, J. L. Tallon, *Ann. Phys.* **2017**, *529*, 1700197.
- [8] A. P. Mackenzie, Y. Maeno, *Rev. Mod. Phys.* **2003**, *75*, 657.
- [9] J. P. Briso, L. Glemor, H. Suderow, A. Huxley, S. Kambe, J. Flouquet, *Physica B* **2000**, *280*, 165.
- [10] A. J. Leggett, *Nat. Phys.* **2006**, *2*, 134.
- [11] J. Orenstein, A. J. Millis, *Science* **2000**, *288*, 468.
- [12] J. Levinsen, N. R. Cooper, G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **2011**, *84*, 013603.
- [13] M. A. Baranov, M. Dalmonte, G. Pupillo, P. Zoller, *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 9.
- [14] Y. Li, C. Wu, *Sci. Rep.* **2012**, *2*, 392.
- [15] A. Boudjemaa, *Phys. Lett. A* **2017**, *381*, 1745.
- [16] A. K. Fedorov, S. I. Matveenko, V. I. Yudson, G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **2017**, *95*, 043615.
- [17] A. K. Fedorov, S. I. Matveenko, V. I. Yudson, G. V. Shlyapnikov, *Sci. Rep.* **2016**, *6*, 27448.
- [18] S. Baier, D. Petter, J. H. Becher, A. Patscheider, G. Natale, L. Chomaz, M. J. Mark, F. Ferlaino, arXiv: 1803.11445v1 [cond-mat.quant-gas], **2018**.
- [19] I. Eremin, D. Manske, S. G. Ovchinnikov, J. F. Annett, *Ann. Phys.* **2004**, *13*, 149.
- [20] A. Micheli, G. Pupillo, H. P. Büchler, P. Zoller, *Phys. Rev. A* **2007**, *76*, 043604.
- [21] M. L. Wall, L. D. Carr, *New J. Phys.* **2009**, *11*, 055027.
- [22] A. F. Ho, M. A. Cazalilla, T. Giamarchi, *Phys. Rev. A* **2009**, *79*, 033620.
- [23] A.-L. Gadsbolle, G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **2012**, *86*, 033623.
- [24] A. C. Potter, E. Berg, D.-W. Wang, B. I. Halperin, E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* **2010**, *105*, 220406.
- [25] A. Camacho-Guardian, R. Paredes, *Phys. Rev. A* **2016**, *94*, 043638.
- [26] E. Akaturk, S. H. Abedinpour, B. Tanatar, *J. Phys. Commun.* **2018**, *2*, 015018.
- [27] A. Camacho-Guardian, G. A. Domínguez-Castro, R. Paredes, *Ann. Phys.* **2016**, *528*, 580.
- [28] P. A. F. Veiga, L. Ioriatti, M. O'Carroll, *Phys. Rev. E* **2002**, *66*, 016130.
- [29] N. R. Cooper, G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **2009**, *103*, 155302.
- [30] P. W. Anderson, P. Morel, *Phys. Rev.* **1961**, *123*, 1911.
- [31] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **2008**, *78*, 195125.
- [32] A. Kitaev, *AIP Conf. Proc.* **2009**, *1134*, 22.
- [33] B. Liu, L. Yin, *Phys. Rev. A* **2012**, *86*, 031603(R).
- [34] J. M. Midtgaard, Z. Wu, G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **2016**, *94*, 063631.
- [35] V. L. Berezinskii, *Sov. Phys. J. Exp. Theor. Phys.* **1972**, *34*, 610.
- [36] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, *J. Phys. C* **1973**, *6*, 1181.
- [37] J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **1974**, *7*, 1046.
- [38] A. Camacho-Guardian, R. Paredes, *Ann. Phys.* **2016**, *528*, 778.
- [39] J. W. Park, S. A. Will, M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **2015**, *114*, 205302.
- [40] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **2008**, *80*, 885.
- [41] P. S. Julienne, T. M. Hanna, Z. Idziaszek, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 19114.
- [42] W. Yi, A. J. Daley, G. Pupillo, P. Zoller, *New J. Phys.* **2008**, *10*, 073015.
- [43] S. Nascimbene, N. Goldman, N. R. Cooper, J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* **2015**, *115*, 140401.
- [44] M. Gullans, T. G. Tiecke, D. E. Chang, J. Feist, J. D. Thompson, J. I. Cirac, P. Zoller, M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **2012**, *109*, 235309.
- [45] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, S. Kuhr, *Nature* **2010**, *467*, 68.
- [46] W. S. Bakr, J. I. Gillen, A. Peng, S. Fölling, M. Greiner, *Nature* **2009**, *462*, 74.
- [47] H. Lee, S. I. Matveenko, D.-W. Wang, G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **2017**, *96*, 061602(R).
- [48] J. M. Midtgaard, G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **2018**, *98*, 013624.

PAPER

The Aubry–André model as a hobbyhorse for understanding the localization phenomenon

To cite this article: G A Domínguez-Castro and R Paredes 2019 *Eur. J. Phys.* **40** 045403

View the [article online](#) for updates and enhancements.



IOP ebooksTM

Bringing you innovative digital publishing with leading voices to create your essential collection of books in STEM research.

Start exploring the collection - download the first chapter of every title for free.

The Aubry–André model as a hobbyhorse for understanding the localization phenomenon

G A Domínguez-Castro  and R Paredes 

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México D. F. 01000, Mexico

E-mail: gustavodomin@estudiantes.fisica.unam.mx

Received 20 December 2018, revised 14 March 2019

Accepted for publication 5 April 2019

Published 18 June 2019



CrossMark

Abstract

We present a thorough pedagogical analysis of the single particle localization phenomenon in a quasiperiodic lattice in one dimension. Beginning with a detailed derivation of the Aubry–André Hamiltonian we describe the localization transition through the analysis of stationary and dynamical observables. Emphasis is placed on both the properties of the model and technical aspects of the performed calculations. In particular, the stationary properties investigated are the inverse participation ratio, the normalized participation ratio and the energy spectrum as a function of the disorder strength. Two dynamical quantities allow us to discern the localization phenomenon, being the spreading of an initially localized state and the evolution of population imbalance in even and odd sites across the lattice. The present manuscript could be useful in bringing advanced undergraduate and graduate students closer to the comprehension of localization phenomena, a topic of current interest in fields of condensed matter, ultracold atoms and complex systems.

Keywords: localization, quantum mechanics, ultracold physics

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

The understanding of electronic mobility in quasiperiodic or disordered media is one of the fundamental issues in the condensed matter domain. Structural disorder, together with the interparticle interactions, intrinsically present in every macroscopic sample, are the responsible ones of the physical behavior and response properties of solids. A material becomes an insulator as a result of either electron–electron or electron–ion interactions. While the study of

electron–electron interactions demands the use of a many-body theory and leads to identification of the Mott insulating phases [1, 2], electron–ion interactions can be addressed, within the single electron theory, and allow one to discern among several types of insulators. Among them are band insulators arising from periodicity in the lattice [3], Peierls insulators associated with lattice distortions [4–7] and Anderson insulators resulting from lattice imperfections or impurities, also known as lattice disorder [8].

The lattice imperfections referred to above, arising from a variety of sources as, for example, substitutional impurities, thermal vibrations, grain boundaries and point defects associated with the formation of the solid, among others, are crucial in determining the mobility of electrons. From a technical point of view, these irregularities translate into on-site energetic variations, which in turn determine the nature of the electronic states. Generally speaking, the wave function of the electrons can be extended or localized. While electron extended states are such that the wave functions have a significant overlap through the lattice sites, localized states are characterized, in contrast, by having negligible overlap between wave functions associated with neighboring sites. Although the localization phenomenon has been extensively investigated, it is up to now a central topic because it still has many open questions to be addressed. For example, the interplay between disorder and dimensionality, and between disorder and interactions. The purpose of this manuscript is to show how the loss of long range order in a 1D homogeneous lattice leads to localized single electrons, and thus causes the absence of its diffusion across the lattice. In other words, we shall focus our attention on the isolated effects that disorder has on producing localization; thus, interparticle interactions are not discussed in this work.

As a first step, the characterization of localization phenomena requires the election of an effective model representing the disorder, and then the use of the standard quantum mechanics techniques to analyze their effects. There are two general schemes from which localization has been envisaged: the Anderson model [8], in which disorder is represented by a random amplitude of the on-site energies; and the Aubry–André model [9, 10], where disorder arises from the superposition of two lattice potentials with incommensurate wavelengths. These models capture the metal-insulator transition in disordered lattices and allow one to characterize such a transition by tracking different properties, as we describe below. Here, we shall use the Aubry–André model as the hobbyhorse for studying and characterizing the influence that disorder has in producing localized states. This model, introduced in 1980, has been shown to be very successful in describing such transitions, not only in the single electron case but when interparticle interactions are considered [11–15]. Localization in a lattice can be recognized through several signatures, either of stationary or dynamical character. What it is important to stress is that localization can be identified as the result of both destructive interference associated with the multiple scattering process of the wave function traveling along the disordered medium, and the spectral properties of the Schrödinger equation [16]. Destruction of wave coherence or loss of mobility can be quantified in terms of several properties that can be extracted from the wave function. The first distinctive signature of localization, identified in the seminal work of Anderson, was the localization length that measures the size of the exponentially localized single particle state as a function of the disorder strength. Here, we concentrate on analyzing the properties enunciated in the following lines. First, we analyze the properties of the Aubry–André model, and then we investigate the inverse participation ratio (IPR) and its opposite, the normalized participation ratio (NPR), that quantify the fraction of sites contributing to the state along the lattice. Next, we investigate the energy spectrum that also allows monitoring the transition to localization. As we shall demonstrate, from the energy spectrum structure, signatures of localized or extended states can be discerned. In addition to these quantities characterizing localization of

the stationary states, there are dynamical parameters that also allow one to track the evolution of a given initial state in the presence of disorder. Among them, the spreading of the initial state and the imbalance between the density probability of even and odd sites in the lattice, as a function of time.

Current experiments with ultracold neutral atoms realized in the laboratory represent the ideal scenario where the spatial quasiperiodicity of the Aubry–André model can be recreated. Optical lattice potentials produced by standing waves resulting from interfering laser fields confine the atoms, and thus emulate the non crystalline environment seen by electrons moving across the ion cores. Nowadays, such large ensembles of fermionic or bosonic atoms loaded in optical lattices offer advantages with respect to experiments performed in real solids. For example, interparticle interactions in ultracold atoms can be tuned externally from the non-interacting regime, to weakly and strongly interacting regimes. This experimental versatility allows one to observe the isolated effects of the lattice seen by the neutral atoms, thus providing insights into the consequences of the quasiperiodic confinement on the localization problem [17]. As a matter of fact, ten years ago, the Aubry–André model was experimentally set in a laboratory for the first time [18].

The aim of the present manuscript is to present a pedagogical description of the Aubry–André model, to understand and characterize the localization phenomenon in 1D. Advanced undergraduate and graduate students should be able to follow this article with no difficulty. Although this material provides the appropriate tools and techniques to address the single particle localization phenomenon only, we believe that the knowledge of this physics sets the reference to the many-body localization phenomenon.

The manuscript is organized in six sections. First, in section 2, considering an ultracold gas of Bose atoms confined in a quasiperiodic potential, we derive the Aubry–André Hamiltonian model, demonstrating how quasiperiodicity of the potential gives rise to a cosine function incommensurate with the underlying periodic tight-binding 1D lattice. Then, in section 3, the properties characterizing the Aubry–André model are delineated, placing special emphasis on the dual structure of the Hamiltonian in the coordinate and momentum representations. Sections 4 and 5 account for the analysis of time-independent and time-dependent properties that characterize the localization transition. Finally, in section 6, a summary of the results is presented.

2. Model

Our starting point is the 1D Hamiltonian operator, describing an ultracold gas of bosonic atoms with mass m , confined in an external potential $V(x)$, and interacting via a contact potential written, as usual, in terms of the s -wave scattering length a_s ,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \hat{\psi}(x) \\ & + \frac{1}{2} \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x), \end{aligned} \quad (1)$$

$\hat{\psi}^\dagger(x)$ and $\hat{\psi}(x)$ are the bosonic creation and annihilation field operators satisfying the usual commutations relations for bosons, $[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')] = \delta(x - x')$. It is important to stress here that the Hamiltonian operator \hat{H} in equation (1) has been written in the standard second quantized notation with the purpose of asserting the quantum character of the system under consideration, and, at the same time, with the aim of emphasizing that the most general

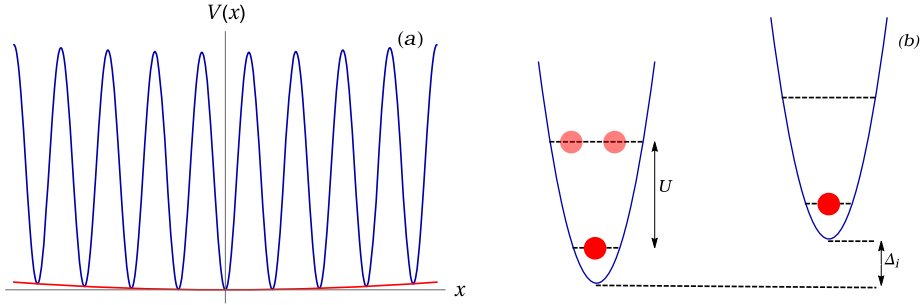


Figure 1. (a) A sketch of the confining potential where the ultracold gas of Bose atoms move $V(x) = V_T(x) + V_{\text{opt}}(x)$. It results from adding both the magnetic harmonic trap $V_T(x)$ and the optical lattice potential $V_{\text{opt}}(x)$. (b) A couple of nearest neighbor wells of (a) in the presence of disorder, the site-to-site energy difference is Δ_i .

expression for the 1D Hamiltonian must include both the non-interacting case (first term of the Hamiltonian \hat{H}), and the interacting contribution associated with particles interacting between pairs (second term of the Hamiltonian \hat{H}). However, the purpose of the present manuscript is to deal with the non-interacting case. Thus, after derivation of the single particle energy Hamiltonian depicted in the next paragraphs, the reader can go directly to the Hamiltonian (14), describing a particle tunneling between adjacent sites j in a non-periodic potential, which as a matter of fact is written in the usual Dirac notation.

The external potential $V(x)$ in equation (1) is given by the superposition $V(x) = V_T(x) + V_{\text{opt}}(x)$, in which $V_T(x)$ is a slowly varying magnetic harmonic trap and, $V_{\text{opt}}(x)$ is an optical lattice potential. Figure 1(a) shows a sketch of the resulting potential $V(x)$. In the presence of disorder, $V_{\text{opt}}(x)$ consists of two optical lattices [19], the main lattice $V_1(x) = s_1 E_{R_1} \sin^2(k_1 x)$, which is used to create a tight-binding environment for the atoms, and a secondary one $V_2(x) = s_2 E_{R_2} \sin^2(k_2 x)$, which introduces an optical disorder [20]. Superimposing both lattices gives rise to the following bichromatic potential:

$$\begin{aligned} V_{\text{opt}}(x) &= V_1(x) + V_2(x) = s_1 E_{R_1} \sin^2(k_1 x) + s_2 E_{R_2} \sin^2(k_2 x + \varphi) \\ &= s_1 E_{R_1} \sin^2(k_1 x) + s_2 E_{R_1} \beta^2 \sin^2(\beta k_1 x + \varphi) \end{aligned} \quad (2)$$

where $k_i = 2\pi/\lambda_i$ ($i = 1, 2$) are the wave vectors, with λ_i the wavelength of the lasers fields, s_i are the heights of the lattices in units of the recoil energy $E_{R_i} = \hbar^2/(2m\lambda_i^2)$, φ is an arbitrary phase and $\beta = \lambda_1/\lambda_2$ is the ratio between the wavelengths. When $s_2 \ll s_1$ and β is an incommensurate number, the secondary lattice does not considerably change the positions of the potential minima generated by the main lattice [21]. Instead, as shown in figure 1(b), it has the effect of shifting the local site energy by an amount Δ_i only.

For single atoms and no net disorder $s_2 = 0$, the eigenstates of equation (1) are Bloch wave functions [22]. As it is well known, an appropriate linear combination of Bloch states yields a Wannier wave function $w_\nu(x - x_i)$, characterized by large probability amplitude around the lattice site i , that is a localized wave function at each site i . Since the atoms under study are at ultracold temperatures, the assumption that the energies involved in the system are smaller compared to the energy required to allow second and higher band populations is well justified. This consideration allows us to drop the band index ν in the Wannier functions and contemplate first band populations only. Having this assumption in mind, it is convenient to expand the field operators $\hat{\psi}(x)$ and $\hat{\psi}^\dagger(x)$ in the Wannier basis:

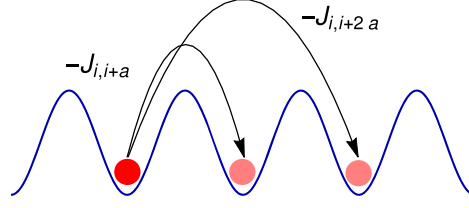


Figure 2. A schematic representation of the hopping of a particle in a lattice.

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(x) &= \sum_i \hat{b}_i w(x - x_i), \\ \hat{\psi}^\dagger(x) &= \sum_i \hat{b}_i^\dagger w^*(x - x_i),\end{aligned}\quad (3)$$

where \hat{b}_i and \hat{b}_i^\dagger are the annihilation and creation operators for a particle in a Wannier state at the lattice site i , respectively. It is worthwhile stressing that the sums in equation (3) run over all lattice sites. As mentioned above, for weak disorder $s_2 \ll s_1$ the minima of the main lattice are not remarkably affected and we can safely substitute the latter expansion of the field operators in equation (1). After some straightforward algebra, one can obtain the following expression for the Hamiltonian (1):

$$\hat{H} = -\sum_{i,j} J_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_{ij} \epsilon_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_{ij} \Delta_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_{i,j,l,v} U_{i,j,l,v} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_v, \quad (4)$$

where we have defined the following constants:

$$\begin{aligned}J_{ij} &= -\int dx w^*(x - x_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + s_1 E_R \sin^2(k_1 x) \right) w(x - x_j) \\ \epsilon_{ij} &= \int dx w^*(x - x_i) V_T(x) w(x - x_j) \\ \Delta_{ij} &= s_2 E_R \beta^2 \int dx w^*(x - x_i) \sin^2(\beta k_1 x + \varphi) w(x - x_j) \\ U_{ijlv} &= \frac{4\pi a_s \hbar^2}{2m} \int dx w^*(x - x_i) w^*(x - x_j) w(x - x_l) w(x - x_v).\end{aligned}\quad (5)$$

The first term in equation (4) describes the energy cost for an atom to hop from site i to site j with $i \neq j$, see figure 2. Note that the hopping probability J_{ij} is proportional to the overlap between the Wannier functions centered at different lattice sites. Within the so-called tight-binding approximation, this overlap is essential only for the nearest neighbors [22], thus we can neglect the tunneling terms between the next nearest neighbors and beyond. Also, since the main lattice potential is invariant under translations by one lattice period, $a = \lambda/2$, the hopping parameter J_{ij} becomes a constant J independent of the lattice site. For the case $i = j$ the J_{ii} term represents an on-site energy shift, which is equal for all sites and thus can be dropped. Analogously to J_{ii} , the second term ϵ_{ii} represents an on-site shift of the energy and thus can be safely neglected. Regarding the contribution of $\epsilon_{i \neq j}$, one should notice that due to the fact that the typical size of the frequencies used to confine ultracold atoms ω_T , are such that [23] $\sqrt{\hbar}/(m\omega_T) \gg \lambda_1/2$, the energy variation associated with $\epsilon_{i \neq j}$ is essentially the same as ϵ_{ii} , see figure 1(a). Therefore, at the same level of approximation, the contribution $\epsilon_{i \neq j}$ can be neglected. The third term in equation (4) is responsible for the optical disorder in the lattice. To deal with it, we first use the trigonometric relation

$\sin^2(\beta k_1 x + \varphi) = (1 - \cos(2\beta k_1 x + \varphi'))/2$ with $\varphi' = 2\varphi$. Inserting this relation into the third equality of equation (5) and dropping the constant term, we obtain

$$\Delta_{ij} = -\frac{s_2 E_{R_1} \beta^2}{2} \int dx w^*(x - x_i) \cos(2\beta k_1 x + \varphi') w(x - x_j). \quad (6)$$

Again, for deep enough lattices, the leading contribution of equation (6) is the $i = j$ term, which corresponds to an on-site energy shift variation. Further, we can make the change of variable $y = x - x_i$, leading to

$$\Delta_{ii} = -\frac{s_2 E_{R_1} \beta^2}{2} \cos(2\pi\beta i + \varphi') \int dy \cos(2\beta k_1 y) |w(y)|^2. \quad (7)$$

Where in the last equation we have identified $x_i \rightarrow i$, we have used the subsequent trigonometric identity:

$$\begin{aligned} \cos(2\beta k_1 y + 2\beta k_1 x_i + \varphi') &= \cos(2\pi\beta i + \varphi') \cos(2\beta k_1 y) \\ &\quad - \sin(2\pi\beta i + \varphi') \sin(2\beta k_1 y), \end{aligned} \quad (8)$$

and symmetric properties to drop the sine integral. Following the above steps we finally get the usual disorder term [19]:

$$\Delta_{ij} = \Delta \cos(2\pi\beta i + \phi) \delta_{ij}, \quad (9)$$

where $\phi = \varphi' + \pi$ and Δ is defined as the following constant parameter:

$$\Delta = \frac{s_2 E_{R_1} \beta^2}{2} \int dy \cos(2\beta k_1 y) |w(y)|^2. \quad (10)$$

The term associated with the interaction energy can also be simplified by taking into account the tight-binding approximation. The dominant term of the overlap of four Wannier functions is due to the term $i = j = l = v$, which corresponds to an on-site interaction, where the atoms only ‘see each other’ whenever they are in the same lattice site:

$$U = U_{i,i,i,i} = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{2m} \int |w(x)|^4 dx. \quad (11)$$

Summarizing all the above approximations, we end with the following interacting Hamiltonian:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) \hat{n}_i + U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (12)$$

where the notation $\langle i, j \rangle$ indicates that the sum runs over the nearest neighbors only and $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ is the number operator at site i . As mentioned in the introduction, one of the most outstanding advantages of the experiments with ultracold atomic gases is the possibility of tuning the strength of the pairwise interactions between atoms, via an external magnetic field. This procedure, called Feshbach resonance [17], allows the experimentalist to prepare a gas of atoms with a zero scattering length a_s , and consequently $U = 0$. Such a non-interacting system constitutes an experimental realization of the non-interacting Harper [10] or Aubry–André [9] model:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) \hat{n}_i. \quad (13)$$

This model, and also the interacting version, have been realized in experiments with ultracold atoms in bichromatic optical lattice potentials [18, 24]. Written in the Dirac notation, the

above Hamiltonian takes the form

$$\hat{H} = -J \sum_j (|w_j\rangle\langle w_{j+1}| + |w_{j+1}\rangle\langle w_j|) + \Delta \sum_j \cos(2\pi\beta j + \phi) |w_j\rangle\langle w_j|. \quad (14)$$

It is important to emphasize that recent investigations [16, 25] pointed out that the Hamiltonian in equation (14) is strictly valid in the extreme tight-binding limit of a very deep main lattice potential.

3. Properties of the Aubry–André model

Having set the Aubry–André Hamiltonian it is worthwhile exposing some basic properties of this model. Beginning with its duality in space and momentum representations, one can transform the Hamiltonian (14) written in the Wannier representation to one in the momentum representation, via the following transformation:

$$|k_s\rangle = \sum_j e^{2\pi i\beta k_s j} |w_j\rangle. \quad (15)$$

After substitution and straightforward algebra, we find the dual Hamiltonian:

$$H = -\frac{\Delta}{2} \sum_s (|k_s\rangle\langle k_{s+1}| + |k_{s+1}\rangle\langle k_s|) + 2J \sum_s \cos(2\pi\beta s) |k_s\rangle\langle k_s|, \quad (16)$$

which resembles the Hamiltonian of equation (14), except that the tunneling rate has changed from $J \rightarrow \Delta/2$ and the disorder strength from $\Delta \rightarrow 2J$. Also, for simplicity we set $\phi = 0$. One can notice that to fully recover the Hamiltonian (14) one must set $\Delta/2 = J$. Now, according to the Heisenberg uncertainty principle, the Hamiltonian (16) has localized states where the first Hamiltonian (14) has extended states, and vice versa. Obviously, the transition from extended to localized states, or from localized to extended states, must take place at the same set of parameters for both Hamiltonians. Since the two representations share the same structure, this means that at the transition point the momentum and space representations of the Aubry–André Hamiltonian look exactly the same. As mentioned above this is accomplished when $\Delta/J = 2$. Furthermore, the localization transition is sensitive to the value of the parameter β [19]. For example, an integer value β would not display any localization transition. To observe such a transition, β must have some degree of incommensurability. One way to achieve this requirement is to choose β as the ratio of two adjacent Fibonacci numbers F_{n-1}/F_n , with F_{n-1} and F_n being two consecutive elements of the Fibonacci sequence. Such a procedure approaches the inverse Golden ratio $\varphi = (\sqrt{5} - 1)/2$ for large enough Fibonacci numbers. Also, one can express β as the ratio of two relative prime numbers $\beta = P/Q$, with P and Q larger than the system size of simulation [26]. However, in experimental realizations, β is restricted to the available laser wavelengths. For example, recent experiments [25] were performed with $\beta = 532/738$. Summarizing, we can state that β must be selected to ensure that the system remains aperiodic within the size of interest [16]. If these requirements are accomplished one would observe that for $\Delta/J = 2$, the wave functions, either that associated with the ground state or those corresponding to the excited states, develop peaks around certain lattice sites; such peaks become a single peak as the disorder amplitude Δ is increased. To complete this section we should mention the relevance of the phase ϕ in equation (14). As can be seen from figure 3, different values of ϕ provide distinct shapes of the confining potential in 1D. Thus, one can say that a given value of ϕ leads to a particular realization of disorder. However, the main purpose of our study is to extract the dominant effects of disordered media, independently of

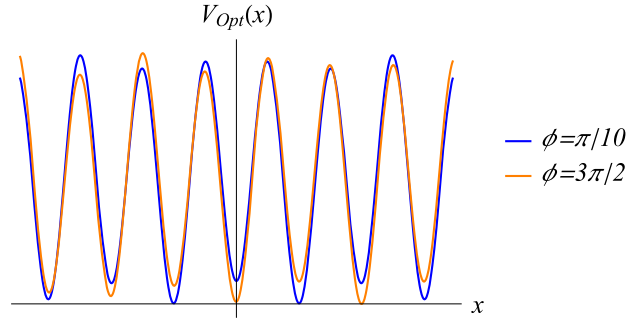


Figure 3. We illustrate two different realizations of the confining potential for different values of the phase ϕ in equation (14).

how the disorder is distributed on the lattice. Hence, to circumvent this apparent difficulty, one has to average over an ensemble of realizations, namely to consider different values of ϕ , until convergence is reached.

4. Time-independent results

In this section, we describe some of the most distinctive single particle time-independent results of the Aubry–André model. In the deep tight-binding approximation, the Wannier functions are highly localized and thus can be represented by the site basis [22], that is, $|w_i\rangle \rightarrow |x_i\rangle$, where $|x_i\rangle$ means that the particle is localized at site i . In this scenario, equation (14) is reduced to the Schrödinger equation $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, with $|\psi\rangle$ being an eigenstate of the one particle Hamiltonian \hat{H} :

$$\hat{H} = -J \sum_i (|x_i\rangle\langle x_{i+1}| + |x_{i+1}\rangle\langle x_i|) + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) |x_i\rangle\langle x_i| \quad (17)$$

By expanding the wave function $|\psi\rangle$ in terms of the site basis $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |x_i\rangle$ and calculating the product $\langle x_j | \hat{H} | \psi \rangle$, we obtain the following difference equation for the coefficients ψ_i :

$$-(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + \frac{\Delta}{J} \cos(2\pi\beta j + \phi) \psi_j = \frac{E}{J} \psi_j, \quad (18)$$

where we have divided by J to have dimensionless equations and at the same time to set the energy scale. It is easy to see that equation (18) can be rewritten in a matrix form $\mathbf{H}\vec{\psi} = \frac{E}{J}\vec{\psi}$ with $\vec{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_\Omega)^T$ being the state vector and \mathbf{H} the Hamiltonian matrix:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \Delta/J \cos(2\pi\beta + \phi) & -1 & \dots & -1 \\ -1 & \Delta/J \cos(4\pi\beta + \phi) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ -1 & 0 & -1 & \Delta/J \cos(2\Omega\pi\beta + \phi) \end{pmatrix}, \quad (19)$$

where Ω is the number of sites in the lattice. In the following calculations we consider $\Omega = 987$ sites, although similar results are found for larger lattice sizes. At this point, it is instructive to state two aspects that were considered in our numerical calculations. The first one is related to the boundary conditions of the problem. As can be seen from the Hamiltonian matrix (19), we take periodic boundary conditions, which means that the 1D

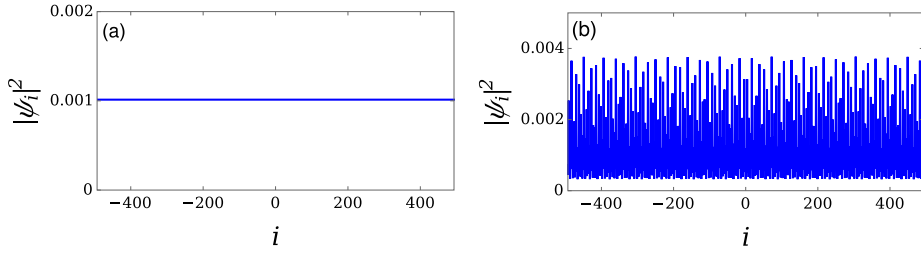


Figure 4. (a) The square of the ground state wave function ψ_i versus the lattice site index i for $\Delta/J = 0$ and $\phi = \pi/5$. (b) The square of the ground state wave function ψ_i versus the lattice site index i for $\Delta/J = 1.5$ and $\phi = \pi/5$.

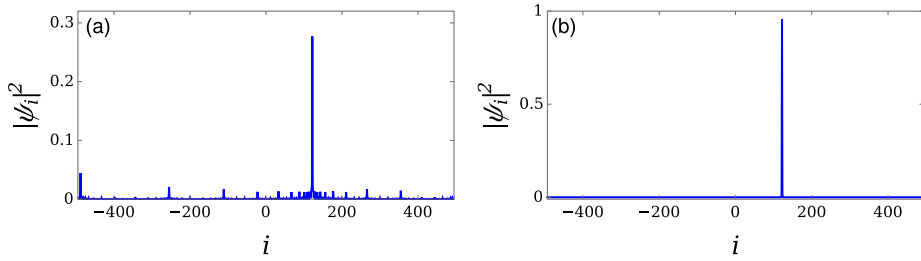


Figure 5. (a) The density profile versus lattice index i for $\Delta/J = 2$ and $\phi = \pi/5$. (b) The density profile as a function of the lattice index i for $\Delta/J = 4$ and $\phi = \pi/5$.

lattice closes itself. Also, for the subsequent calculations we consider $\beta = 610/987 \approx 0.618\,034$.

Now, we are left to find the eigenvalues and eigenvectors of the matrix \mathbf{H} . In the case of vanishing disorder $\Delta/J = 0$, equation (18) is easily solved with the ansatz $\psi_j = e^{ikaj}$, which displays the energy spectrum of a free particle in a 1D lattice $E_k = -2J \cos(ka)$ [3]. In figure 4(a) we plot the ground state density $|\psi_i|^2$ as a function of the lattice site i for zero disorder $\Delta/J = 0$, and for the nonzero disorder $\Delta/J = 1.5$, shown in figure 4(b).

As one would expect, the ground state profile in the absence of disorder is a normalized constant at each site. This means that the particle is completely delocalized in the lattice. For the case $\Delta/J = 1.5$, the density profile of the ground state displays multiple peaks, which indicates the presence of different potential depths across the sites. However, the wave function is still extended over all the lattice.

With the aim of sketching the ground state density for two different values of the disorder amplitude satisfying $\Delta/J \geq 2$, in figure 5 we exhibit two cases: the left one is associated with $\Delta/J = 2$, and the right one corresponds to $\Delta/J = 4$. As can be seen from these density profiles, $\Delta/J = 2$ exhibits the transition from an extended to a localized state, while the case $\Delta/J = 4$ shows that when the disorder amplitude is increased, the localization becomes sharp.

An important quantity that arises in describing the localization transition, and is widely used in the literature, is the IPR. For a normalized state $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |x_i\rangle$, it is defined as

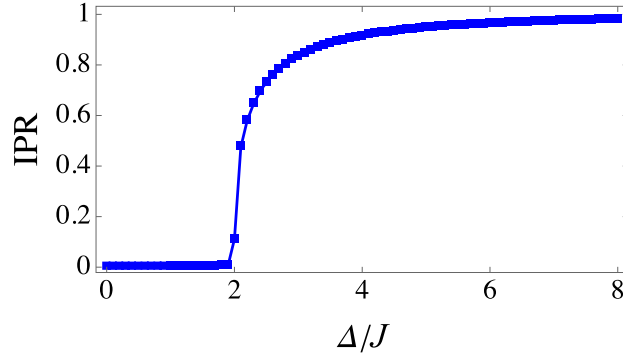


Figure 6. The ground state IPR as a function of the disorder strength Δ/J . We average over 10 realizations of the phase ϕ .

$$\text{IPR}(|\psi\rangle) = \sum_i |\psi_i|^4. \quad (20)$$

The IPR gives us the inverse of the number of sites occupied by the wave function. For example, it approaches zero as $1/\Omega$, for an extended wave function, while it goes to 1 for a localized state on a single lattice site.

The great advantage of using the IPR parameter is that instead of looking at the wave function in each realization, we just have to check a single parameter to confirm the nature of the wave function. In figure 6 we illustrate the IPR associated with the ground state as a function of the disorder strength Δ/J . Each point in this figure corresponds to an average over ten realizations of the phase ϕ , which is set randomly in the interval $\phi \in [0, 2\pi)$. As shown, the IPR parameter becomes different from zero for $\Delta/J = 2$ and it approaches unity as the disorder increases. This peculiar behavior makes the IPR a good parameter for studying the localization transition. Even though the above definition of the IPR is related to the localization in real space, one could extend the idea to momentum space or to a more exotic basis as the Floquet basis in periodic driven optical lattices [27, 28].

Another interesting quantity is the NPR, which plays the opposite role to the IPR parameter [16]. That is, the NPR parameter remains finite for spatially extended states, while approaching zero for a localized one. For a given normalized state $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |x_i\rangle$, the NPR parameter is defined as follows:

$$\text{NPR}(|\psi\rangle) = \frac{1}{\Omega} \frac{1}{\sum_i |\psi_i|^4}. \quad (21)$$

To illustrate the utility of the NPR parameter, first, one should notice that the above definitions for the IPR and NPR parameters are related to a single eigenstate $|\psi\rangle$. However, one can calculate these two quantities for the full eigenstate spectrum, and display the average of the IPR and NPR parameters. In figure 7 we plot such averages as a function of the disorder strength Δ/J . As shown in this figure, for $\Delta/J < 2$ we obtain, as expected, $\text{IPR} = 0$ and $\text{NPR} \neq 0$, while for $\Delta/J > 2$, $\text{IPR} \neq 0$ and $\text{NPR} = 0$. This indicates that the spectrum is either completely delocalized ($\Delta/J < 2$) or completely localized ($\Delta/J > 2$), but not a mixture of both localized and extended states.

We should emphasize that this peculiar behavior of the IPR and NPR curves is a direct consequence of the tight-binding approximation used in deriving the Aubry–André model [16]. Nevertheless, when hopping to the next nearest neighbors is considered, a noticeable

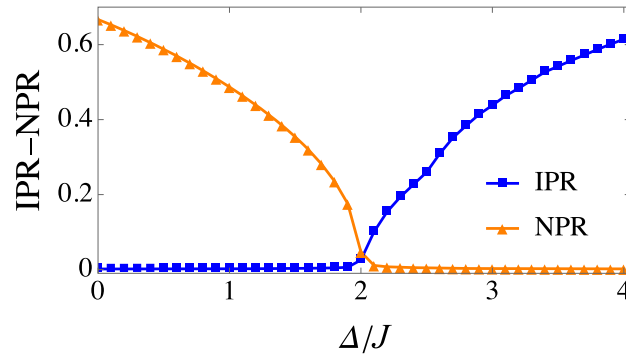


Figure 7. The IPR and NPR of the full spectrum as a function of the disorder strength Δ/J . Each point corresponds to the average of the full spectrum over ten realizations of the phase ϕ .

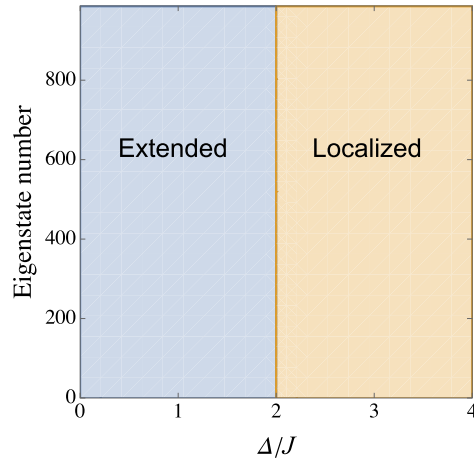


Figure 8. A diagram of the Aubry-André spectrum as a function of the disorder strength Δ/J .

overlap between both curves emerges [16, 29–31]. In such a scenario extended and localized states take place in the same spectrum; the value of the energy that separates localized and delocalized eigenstates is called mobility edge energy. At the transition point $\Delta/J = 2$ all the eigenstates exhibit a multifractal structure [32], a subject which is out of the scope of this work. Summarizing, we can organize the latter result in the diagram shown in figure 8, which displays an absence of a mixture between localized and extended eigenstates in the full spectrum.

To conclude this section, in figure 9 we show the energy spectrum of the Aubry-André model as a function of the parameter β for two different disorder strengths Δ/J . In our calculations we used $\beta \in (0,1)$ such that $\beta = i/\Omega$ with $i = 1, 2, 3, \dots, 986$. This spectrum has been studied in numerous works [33–38], since it displays a very rich structure in both the

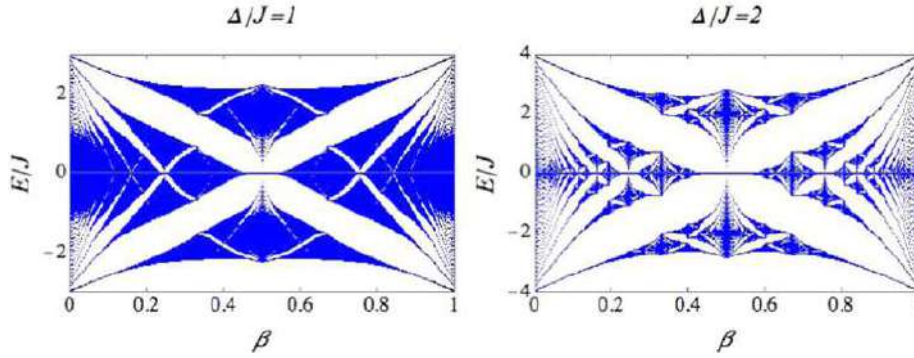


Figure 9. The energy spectrum of the Aubry–André model as a function of β for two different values of Δ/J . At the transition, $\Delta/J = 2$, the spectrum gives rise to the Hofstadter butterfly.

extended and localized regimes. We should stress that strictly speaking only incommensurate values of β lead to localized states.

For values of disorder amplitude above and below the transition point, the energy spectrum structure is completely different from that associated with $\Delta/J = 2$, where it shows the Hofstadter butterfly spectrum [35]. The case $\Delta/J = 2$ has been widely investigated, since it describes the quantum physics of an electron moving on a 2D square lattice in the presence of a transverse magnetic field [10].

5. Time-dependent results

In this section, we discuss the time evolution of a given initial condition, in the presence of disorder. This is one of the ways in which experimentalists measure how much a system is apart from an initially delocalized or extended state [18, 25]. First, we briefly summarize some basic concepts related to the evolution in time of single particle problems. According to quantum mechanics, the time evolution of a ket $|\psi\rangle$ is given by the time-dependent Schrödinger equation:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle. \quad (22)$$

Again, we expand the ket in the site basis $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i(t) |x_i\rangle$ and after substitution in equation (22), we obtain the time-dependent equation for the coefficients $\psi_i(t)$:

$$\frac{d}{dt} \psi_i(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H_{ij} \psi_j(t), \quad (23)$$

where H_{ij} are the matrix elements of \mathbf{H} given in equality (19). Equation (23) represents a system of Ω coupled ordinary differential equations, which can be easily solved using the Runge–Kutta 4 (RK4) method:

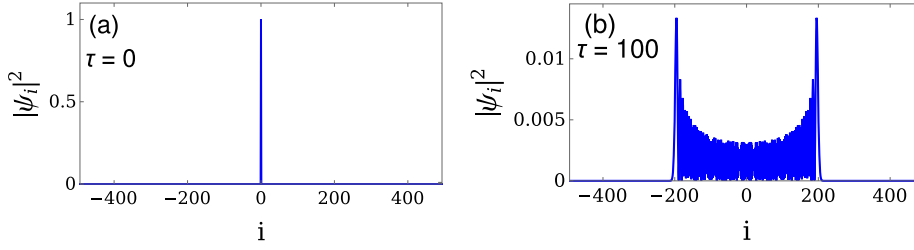


Figure 10. (a) The initial density profile localized in the middle of the lattice. (b) The density profile at time $\tau = 100$ in the absence of disorder.

$$\begin{aligned}
 \vec{k}_1 &= \mathbf{H}(\tau_j) \vec{\psi}(\tau_j) \\
 \vec{k}_2 &= \mathbf{H}(\tau_j + \Delta\tau/2) (\vec{\psi}(\tau_j) + \vec{k}_1/2) \\
 \vec{k}_3 &= \mathbf{H}(\tau_j + \Delta\tau/2) (\vec{\psi}(\tau_j) + \vec{k}_2/2) \\
 \vec{k}_4 &= \mathbf{H}(\tau_j + \Delta\tau) (\vec{\psi}(\tau_j) + \vec{k}_3) \\
 \vec{\psi}(\tau_{j+1}) &= \vec{\psi}(\tau_j) + \frac{\Delta\tau}{6} (\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4),
 \end{aligned} \tag{24}$$

where we have set $\tau = J t/\hbar$ as our dimensionless unit of time. The advantage of using the RK4 method resides on one side in its accuracy $(\Delta\tau)^4$, and on the other side, in the relatively simple way in which the above equations can be implemented. In our calculations, we set $\Delta\tau = 0.01$, which displays conservation of both the norm and the energy within the whole numerical time evolution.

As is well known, the time evolution of an eigenstate of H would give trivial results. Nevertheless, the evolution of an arbitrary state can yield signatures of the presence of disorder. For this reason, we first study the evolution in time of an initially fully localized state in the middle of the lattice $|\psi(\tau = 0)\rangle = |x_0\rangle$. This initial condition mimics ‘designs’ prepared in current experiments performed with ultracold atoms [18]. In figure 10(a) and figure 10(b), we plot the initial density profile and the spreading of such an initial state in the absence of disorder for a time of $\tau = 100$, respectively.

To quantify the spreading of the initial wave function, we determine the root mean square of the displacement (RMSD) in each time step; this latter quantity is defined as

$$\sigma(\tau) = \left[\sum_i i^2 |\psi_i(\tau)|^2 \right]^{1/2}. \tag{25}$$

The RMSD is a measure of the deviation of the position of the particle at time τ with respect to its initial position. In other words, the RMSD measures the portion of the lattice that is ‘explored’ by the particle during a time interval. In figure 11 we plot the RMSD, in logarithmic scale, as a function of the time τ for five different disorder strengths. The shaded area in each curve represents the standard error over ten realizations of random phase ϕ . As one can observe, for zero disorder $\Delta/J = 0$ the wave packet propagates ballistically, that is $\sigma(\tau) \propto \tau$, showing that the RMSD grows linearly in time. Due to the system finite size, the RMSD reaches a maximum value and oscillates around it. For this reason, we let the system evolve until the RMSD reaches its maximum value for zero disorder.

The time dependence of the RMSD can be fitted with a power law ansatz $\sigma(\tau) \propto \tau^\gamma$. This fit must be carried out at intermediate times scales, where one neglects the contribution

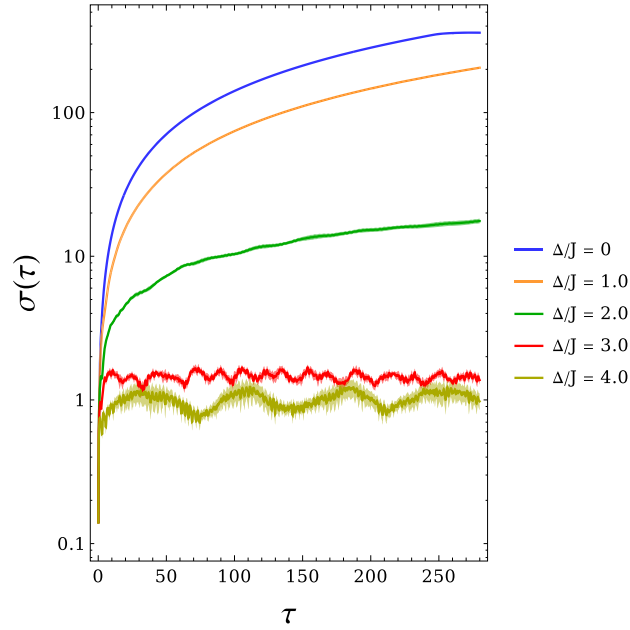


Figure 11. The RMSD $\sigma(\tau)$ as a function of time for different disorder strengths Δ/J . The shaded areas around each curve represent the standard deviation over ten samples of the random phase ϕ .

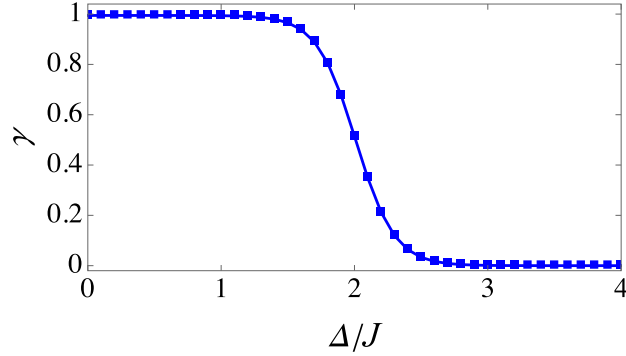


Figure 12. Values of the fitted γ in the time dependence of the RMSD $\sigma(\tau) \propto \tau^\gamma$ as a function of the disorder strength Δ/J .

of the transient behavior at short times and the maximum spreading at later ones [28]. Figure 12 shows the exponent γ of the above fit as a function of the disorder strength Δ/J . This plot allows us to identify the ballistic regime $\gamma = 1$, the superdiffusive $1/2 < \gamma < 1$, the subdiffusive $0 < \gamma < 1/2$ and the localized one $\gamma = 0$, associated with the diffusion of an initially localized wave packet.

Another interesting observable that allows us to discern between a localized and extended phase, and can also be detected in current experiments [24, 25], is the imbalance

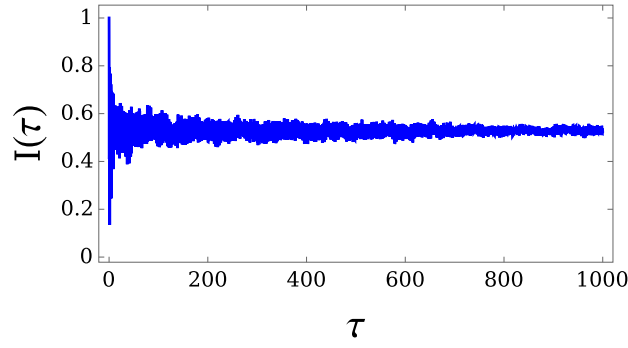


Figure 13. Imbalance evolution $I(\tau)$ as a function of time τ for a disorder strength of $\Delta/J = 4$.

$I(\tau)$. The imbalance parameter is defined as follows:

$$I(\tau) = \frac{n_e(\tau) - n_o(\tau)}{n_e(\tau) + n_o(\tau)}, \quad (26)$$

where $n_e(\tau) = \sum_{i \in \text{even}} |\psi_i(\tau)|^2$ is the total probability density of the particle on even sites, and $n_o(\tau) = \sum_{i \in \text{odd}} |\psi_i(\tau)|^2$ corresponds to the total probability density of the particle on odd sites of the lattice. As the name suggests, the $I(\tau)$ parameter measures the imbalance of the population occupying odd and even sites of the lattice. To condense the whole time evolution of the imbalance, we defined I as the asymptotic value of $I(\tau)$ [39]:

$$I = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int d\tau' \frac{n_e(\tau') - n_o(\tau')}{n_e(\tau') + n_o(\tau')}. \quad (27)$$

For calculation purposes, our numerical simulations were performed until $\tau = 1000$, which corresponds to a real time of $t = 1000 \hbar/J$ that is much bigger than the hopping time in the lattice.

Besides being a measurable observable, the most significant advantage of using the imbalance parameter as an order parameter for probing localization is that it can also provide signatures of many-body localization [40], when interactions are present. To show the dynamical behavior of $I(\tau)$, we start by considering the evolution of a density-wave-like pattern in which only even sites are initially occupied. To obtain meaningful calculations we have to impose the same number of odd and even sites in the full lattice. Here, we consider $\Omega = 1000$ and the incommensurate parameter $\beta = 987/1597$. Then, we calculate the value of the imbalance $I(\tau)$ at every time step until $\tau = 1000$, at which we observe that the imbalance oscillates around its asymptotic value. For illustration purposes in figure 13, we plot the imbalance as a function of time τ for a disorder $\Delta/J = 4.0$

In figure 14 we show the asymptotic value of the imbalance as a function of the disorder strength Δ/J . Since for $\Delta/J < 2$ all the states are extended, the particle can easily tunnel to nearby sites leading to a zero value of the imbalance in a few tunneling times. The vanishing of the imbalance must be interpreted as an indication of ergodicity, since the system completely loses any previous information associated with the initial state. However, for $\Delta/J > 2$ the imbalance reaches a finite value, which is closer to the initial value as the disorder is increased. This suggests that the system is non-ergodic as it retains certain memory of the initial configuration.

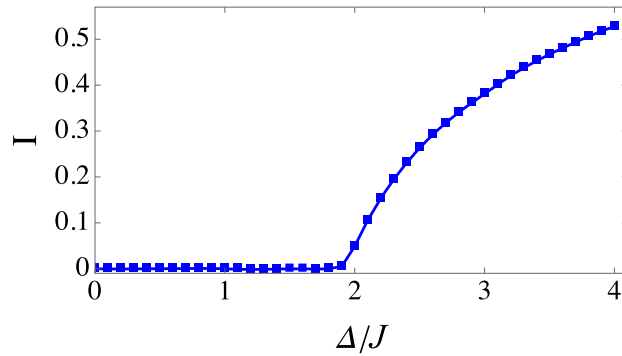


Figure 14. The asymptotic value of the imbalance I as a function of the disorder strength Δ/J . The time of evolution was set to $\tau = 1000 \hbar/J$ and the lattice size considered is $\Omega = 1000$.

6. Final remarks

The main purpose of the manuscript is to introduce the undergraduate and graduate student to one of the most studied topics in condensed matter: the localization phenomenon. For this purpose, we have presented a comprehensive and detailed study of a single particle moving in a disordered lattice in one dimension. In particular, the disorder analyzed here corresponds to a quasiperiodic one. Considering as a starting point a quantum analog of such a condensed matter system, namely a weakly interacting ultracold Bose gas confined in a 1D quasiperiodic lattice, in section 2 we presented a straightforward derivation of the Aubry–André Hamiltonian. Then, in section 3 we proceeded to review the essential aspects regarding the 1D Aubry–André model and the localization transition. In particular, we determined the transition point by making use of the duality in space and momentum representations of the Aubry–André Hamiltonian. In section 4, we focused on the introduction and description of the stationary properties that allowed us to characterize the localization transition as a function of the disorder amplitude. Specifically, we determined the IPR and its opposite, the NPR, that provide information of how localized across the lattice a wave function is, as a function of the disorder amplitude. These parameters were calculated for both the ground state and the full energy spectrum. Our analysis concluded with the study of the time-dependent properties presented in section 5. In particular, the transition from extended to localized states was recognized by following the evolution in time of two different initial states.

All the formalism and techniques used here are at the level of an advanced undergraduate student or equivalent. We believe that this type of reading brings a student closer to the comprehension of current research on single particle and many particle localization phenomena. With the tools used in this paper, the interested reader can address the study of vanguard problems related to the central topic of this manuscript, for example, the dependence of localization on dimensionality, the effects of the next nearest neighbors in the localization phenomenon and the response of the system in the novel driven disordered lattices among others.

Finally, in this paragraph we want to briefly summarize some of the reported predictions of the Aubry–André model. These include spin–orbit coupling effects [41], closed expressions for the energy separating localized and non-localized states [42] and coexistence of localized and extended states in interacting quasiperiodic systems [43] among others. At the

many-body level, localization of the ground state is established rigorously in the weakly interacting regime for both repulsive and attractive interactions [44] and many-body localization versus thermalization and onset of equilibrium [45], which can have implications for quantum devices and quantum computation. All of these phenomena can be analyzed by means of a generalized Hamiltonian that includes the interparticle interactions. Here, we have restricted our work to the single particle localization phenomenon.

Acknowledgments

We acknowledge useful discussion with Gerardo G Naumis. GADC acknowledges a CONACYT scholarship. This work was partially funded by grant INI105217 DGAPA (UNAM) and 255573 CONACYT.

ORCID iDs

G A Domínguez-Castro  <https://orcid.org/0000-0002-7032-2465>

R Paredes  <https://orcid.org/0000-0001-8855-606X>

References

- [1] Mott N F 1949 *Proc. Phys. Soc. A* **62** 416
- [2] Gebhard F 2000 *The Mott Metal Insulator Transition, Models and Methods* (Heidelberg: Springer-Verlag)
- [3] Ashcroft N W and Mermin N D 2005 *Solid State Physics* (New York: Holt, Rinehart and Winston) p 132
- [4] Fehske H, Wellein G, Weiße A, Göhmann F, Büttner H and Bishop A R 2002 *Physica B: Condens. Matter* **312** 562
- [5] Fehske H, Wellein G, Kampf A P, Sekania M, Hager G, Weiße A, Büttner H and Bishop A R 2003 *High Performance Computing in Science and Engineering* (Heidelberg: Springer)
- [6] Yamaguchi T, Sugimoto K, Ohta Y, Tanaka Y and Sato H 2018 *Phys. Rev. B* **97** 161103(R)
- [7] Zabrodskii A, Veinger A I, Tisnek T and Goloshchapov S 2009 *Ann. Phys., Lpz.* **18** 923
- [8] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [9] Aubry S and André G 1980 *Ann. Isr. Phys. Soc.* **3** 133
- [10] Harper P G 1995 *Proc. Soc. Lond. A* **68** 874
- [11] Fisher M P A, Weichman P B, Grinstein G and Fisher D S 1989 *Phys. Rev. B* **40** 546
- [12] Kisker J and Rieger K 1996 *Phys. Rev. B* **55** R11981
- [13] Balabanyan K G, Prokof'ev N and Svistunov B 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 055701
- [14] Gimperlein H, Wessel S, Schmiedmayer J and Santos L 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 170401
- [15] Buonsante P, Massel F, Penna V and Vezzani A 2007 *Laser Phys.* **17** 538
- [16] Li X, Li X and Das Sarma S 2017 *Phys. Rev. B* **96** 085119
- [17] Bloch I, Dalibard J and Zwerger W 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 885
- [18] Roati G, D'Errico C, Fallani L, Fattori M, Fort C, Zaccanti M, Modugno G, Modugno M and Inguscio M 2008 *Nature* **453** 895
- [19] Modugno M 2009 *New J. Phys.* **11** 033023
- [20] Fallani L, Lye J E, Guarrera V and Fort C 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 130404
- [21] Guarrera V, Fallani L, Lye J E, Fort C and Inguscio M 2007 *New J. Phys.* **9** 107
- [22] Nolting W 2008 *Fundamentals of Many-body Physics* (Heidelberg: Springer) p 57
- [23] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W and Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3108
- [24] Schreiber M, Hodgman S S, Bordia P, Ls'chen H P, Fischer M H, Vosk R, Altman E, Schneider U and Bloch I 2015 *Science* **349** 842
- [25] Lüschen H P, Scherg S, Kohlert T, Schreiber M, Bordia P, Li X, Das Sarma S and Bloch I 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 160404
- [26] Modugno G 2010 *Rep. Prog. Phys.* **73** 102401

- [27] Qin P, Yin C and Chen S 2014 *Phys. Rev. B* **90** 054303
- [28] Čadež T, Mondaini R and Sacramento P D 2017 *Phys. Rev. B* **96** 144301
- [29] Biddle J, Wang B, Priour D J and Das Sarma S 2009 *Phys. Rev. A* **80** 021603(R)
- [30] Ramakumar R, Das A N and Sil S 2014 *Physica A: Stat. Mech. Appl.* **401** 214
- [31] Gong L, Feng Y and Ding Y 2017 *Phys. Lett. A* **381** 588
- [32] Wilkinson M 1984 *Proc. R. Soc. Lond. A* **391** 305
- [33] Sokoloff J B 1981 *Phys. Rev. B* **23** 6422
- [34] Azbel M Y 1979 *Phys. Rev. Lett.* **43** 1954
- [35] Hofstadter Douglas R 1976 *Phys. Rev. B* **14** 2239
- [36] Kraus Y E, Lahini Y, Ringel Z, Verbin M and Zilberberg O 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 106402
- [37] Madsen Kevin A, Bergholtz Emil J and Brouwer Piet W 2013 *Phys. Rev. B* **88** 125118
- [38] Liu F, Ghosh S and Chong Y D 2015 *Phys. Rev. B* **91** 014108
- [39] Romito D, Lobo C and Recati A 2018 *Eur. Phys. J. D* **72** 135
- [40] Andraschko F, Enss T and Jesko S 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 217201
- [41] Malla R K and Raikh M E 2018 *Phys. Rev. B* **97** 214209
- [42] Tong L, Gao X, Shihua C and Hao G 2017 *Phys. Lett. A* **381** 21
- [43] Wang Y, Hu H and Chen S 2016 *Eur. Phys. J. B* **89** 77
- [44] Mastropietro V 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 180401
- [45] Oganessian V and Huse D A 2007 *Phys. Rev. B* **75** 155111

PAPER • OPEN ACCESS

Validity of Gross–Pitaevskii solutions of harmonically confined BEC gases in reduced dimensions

To cite this article: R Zamora-Zamora *et al* 2019 *J. Phys. Commun.* **3** 085003

View the [article online](#) for updates and enhancements.

Recent citations

- [Persistence of ferromagnetic domains in a disordered two-dimensional lattice](#)
C. Madroño *et al*



PAPER

OPEN ACCESS

RECEIVED
9 July 2019REVISED
16 July 2019ACCEPTED FOR PUBLICATION
26 July 2019PUBLISHED
7 August 2019

Original content from this work may be used under the terms of the [Creative Commons Attribution 3.0 licence](#).

Any further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the title of the work, journal citation and DOI.



Validity of Gross–Pitaevskii solutions of harmonically confined BEC gases in reduced dimensions

R Zamora-Zamora¹ , G A Domínguez-Castro¹ , C Trallero-Giner^{2,3} , R Paredes¹ and V Romero-Rochín¹

¹ Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México. D.F. 01000, Mexico

² Department of Theoretical Physics, Havana University, Havana 10400, Cuba

³ CLAF—Centro Latino-Americano de Física, Avenida Venceslau Braz, 71, Fundos, 22290-140, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

E-mail: romero@fisica.unam.mx

Keywords: Bose–Einstein condensates, Gross–Pitaevskii equation, quasi-one and quasi-two dimensional systems

Abstract

By exact numerical solutions of the Gross–Pitaevskii (GP) equation in 3D, we assess the validity of 1D and 2D approximations in the study of Bose–Einstein condensates confined in harmonic trap potentials. Typically, these approximations are performed when one or more of the harmonic frequencies are much greater than the remaining ones, using arguments based on the adiabatic evolution of the initial approximated state. Deviations from the 3D solution are evaluated as a function of both the effective interaction strength and the ratio between the trap frequencies that define the reduced dimension where the condensate is confined. The observables analyzed are both of stationary and dynamical character, namely, the chemical potential, the wave function profiles, and the time evolution of the approximated 1D and 2D stationary states, considered as initial states in the 3D GP equation. Our study, besides setting quantitative limits on approximations previously developed, should be useful in actual experimental studies where quasi-1D and quasi-2D conditions are assumed. From a qualitative perspective, 1D and 2D approximations certainly become valid when the anisotropy is large, but in addition the interaction strength needs to be above a certain threshold.

1. Introduction

Dimensionality plays a determinant role in the occurrence or not of different physical phenomena in many-body systems [1–5]. Bose–Einstein condensation (BEC) in ultracold gases of bosonic atoms, the subject of our attention here, is not an exception, and most of the attention and success of the current ultracold matter experiments is directly related to the fact that these systems, composed of a macroscopic number of atoms and being in the degenerated regime, behave analogously to condensed matter systems. Even more, interparticle interactions and inhomogeneous potentials of variable dimensionality can be set in those ultracold quantum fluids by means of external fields to produce particular energy landscapes [6–13]. Such experimental capabilities allow to explore the physics of a wide range of phenomena, for instance phase transitions in inhomogeneous potentials [14–20], transition to localization induced by either static or dynamic disorder [6], topological defects such as vortices [21–23] and Skyrmions [24–27], quantum turbulence, formation of magnetic domains in spinor condensates and relaxation to equilibrium versus eigenstate thermalization hypothesis, among others. Indubitably, as it is observed and predicted, dimensionality and interparticle interactions play a key role in the occurrence of the mentioned phenomena. Therefore, a central aspect to quantum simulate a given scenario is to establish the range of parameters which support both, experimental and theoretical approaches in 1D and 2D.

Bose–Einstein condensation in ultracold fluids has the peculiarity that, due to atomic interactions and their spatial confinement by inhomogeneous traps, they can become superfluids in arbitrary dimensions. In those very low temperatures and diluted regimes, the mean field Gross–Pitaevskii equation (GP) provides an optimal scheme to describe those gases confined in inhomogeneous traps in all dimensions, and one can write down corresponding GP equations to describe them. A key and evident observation, however, is that all the

condensates produced in the laboratory are in 3D space. Thus, the reduction of dimensionality is achieved by changing the geometry and the space where the atoms are confined, modifying and having a determinant effect on the effective resulting interactions. Typically, based on simple physical intuition, a reduction of dimensionality is achieved by constraining the dynamics of the condensate to fewer spatial degrees of freedom. This is enabled by reducing the spatial extent of the motion of the atoms in one or more directions. To be specific, assuming that the inhomogeneous trap is an anisotropic harmonic oscillator with 3D frequencies ω_x , ω_y , and ω_z , then, if one or two of those frequencies become too large, the motion occurs in the remaining ones. Thus, one simply considers the dynamics in those coordinates, writes down the appropriate GP equation, and neglects the other ones. This procedure, however, requires a theoretical justification that both yields the correct equation in the reduced dimension and sets their bounds of validity. This theoretical procedure, of how to conduct such a dimension reduction, has been the subject of several studies [28–38], with the most important result that the atomic interaction strength becomes modified in 1D and 2D with respect to the original interaction in 3D, usually being scaled by the length of the oscillator in the constrained direction or directions. In some of those cases [29–31], however, the reduced equations show a non-linearity different from the usual one in GP equations. This is certainly interesting and relevant and we shall also discuss these approximations in the light of the full 3D solution. The validity, as expected from those asymptotic procedures, should be obtained in the limit of arbitrarily large anisotropy. However, actual experiments are rarely in those asymptotic limits and, as the primary motivation, the purpose of the present study is the realization of a systematic and rigorous numerical analysis of the ensued 1D and 2D versions compared with the actual 3D descriptions of the GP equation describing a BE condensate at zero temperature.

We proceed by, first, briefly describing the two main different approaches [32, 34] that deal with the reduction of dimensionality of the 3D GP equation to 2D and 1D effective equations. While differing in the precise step where the reduction is enabled, both procedures are based on a variational scheme followed by an adiabatic approximation which assumes that the dynamics is spatially decoupled; in this way, the component of the gas in the squeezed or small dimension or dimensions stays in its non-interacting ground state, and the atomic collisions, represented by non-linear terms, take place in the desired reduced dimension. Then, separately for the 1D and 2D cases, we perform four validity tests, three stationary and one dynamical, to compare the actual 3D solution with the approximated ones. These stationary and dynamical properties are obtained by an extensive set of numerical calculations as a function of the effective coupling interaction and of the ratio of the trap frequencies defining the reduction of dimensions in each case. Our calculations are parallel state-of-the-art computations with GPU processors, for which we provide the necessary technical details to allow for the reproducibility of our results and their practical use. As we shall conclude very generally, the true achievement of physics in reduced dimensions requires not only a large anisotropic confinement but large enough atomic interaction strengths, and we provide the required bounds. Some words of caution, however, are in order before we embark in those conclusions. The 3D GP equation is a non-linear equation and, as such, strictly speaking cannot be decoupled in transverse and longitudinal variables, namely, its solution cannot be factorized into transverse and longitudinal components. The variational methods, nevertheless, based on defining a certain ansatz with variational parameters in the functional energy or Hamiltonian, allow to get the ‘effective’ 1D and 2D ordinary differential equations, which describe the corresponding static and dynamic behavior. In this regard, it is known that variational methods do not necessarily guarantee that, say, while the chemical potential, being a stationary property, is accurately described, the corresponding condensate wavefunction is also correctly obtained; see [39] for a discussion of variational methods in GP equations. In the light of this observation, it is certainly of interest to study both properties, dynamical and stationary, and separately assert its validity, being careful of not dismissing partial agreement between the approximated 1D and 2D solutions and the full 3D version. And also, as we will discuss in the final section of this article, there emerges an interesting and relevant observation concerning the underlying explanation of the achievement of the dimension reduction, at least within the framework of the GP formalism, namely, that the interplay between the effective non-linear interactions and the *relative* anisotropic confinement allows the dimension reduction rather than their absolute tightening.

2. From 3D to 2D and 1D Gross–Pitaevskii descriptions

The 3D Gross–Pitaevskii equation that describes a Bose–Einstein condensate of N atoms confined in a harmonic potential is

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{3D}(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + \frac{4\pi\hbar^2 Na}{m} |\psi_{3D}(\mathbf{r})|^2 \right] \psi_{3D}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

where a is the s -wave scattering length a of the two-body interaction and m the atom mass. The trap frequencies are labeled as ω_i along the $i = x, y$ and z directions, respectively. Depending on the size of these frequencies the cloud of the condensate gas can be either a spheroid in 3D space, a disk lying in 2D, or a cigar shaped cloud in 1D. As we shall see in the next subsections, based on reasonable physical assumptions, if one or more frequencies along different axes are much larger with respect to the others, say, $\omega_x = \omega_y \gg \omega_z$, or $\omega_z \gg \omega_x = \omega_y$, the ‘energy levels’ along different directions become so separated that, at arbitrarily low temperatures, the system decouples in the sense that the dynamics of the condensate is developed either, parallel to z -axis yielding a quasi 1D condensate, or in the $x - y$ plane for a 2D disk shaped condensate, while the other transverse degrees of freedom remain in their ‘ground state’. Although the previous reasoning is true in that extreme limit, where frequencies are well apart each other, in actual experimental situations such a limit is hard to reach [40]. On the other hand, as we shall argue below, this physical picture is not quite simply obeyed by the Gross-Pitaevskii equation. In any case, we follow here the procedure delineated in [32, 34], in which by properly choosing the sizes of these frequencies, the dynamics along different dimensions can be decoupled. This decoupling allows for an adiabatic approximation such that in the tight direction, namely where $\omega_x = \omega_y \gg \omega_z$, or $\omega_z \gg \omega_x = \omega_y$, along the axis or axes where the frequencies are very large, the condensate wave function can be approximated as that of the ground state harmonic oscillator with the corresponding frequencies. This implies that the non-linear dynamics occurs solely in the directions where the frequencies are small. As briefly discussed below, we consider two ways in which the adiabatic component can be integrated out, one at the level of the energy functional [32], and the other at the level of the GP equation itself [34]. This leads to a small but noticeable difference in the effective non-linear coupling constant in the respectively obtained 1D and 2D dynamical GP equations. In the next subsections we set the equations describing the condensate restricted to 1D and 2D and, then, in the following section we evaluate the validity of the approximations mentioned, by comparing both stationary and dynamical results from the full 3D GP equation with the corresponding versions in the reduced 1D and 2D.

2.1. Cigar shaped Bose–Einstein condensates

Let us assume that the frequencies along x - and y -axes are equal and very large with respect to the frequency along the z direction, that is, $\omega_x = \omega_y = \omega_r \gg \omega_z$. Thus, following the derivations in [32, 34], the proposal is that the condensate order parameter $\psi_{3D}(x, y, z, t)$ can be factorized as,

$$\psi_{3D}(x, y, z, t) \approx \phi_{2D}^{HO}(x, y)\psi_{1D}(z, t), \quad (2)$$

where $\phi_{2D}^{HO}(x, y)$ is the ground state wave function of a 2D harmonic oscillator in the $x - y$ plane with frequency ω_r , and $\psi_{1D}(z, t)$ is the time dependent wave function describing the dynamics along the z -axis. The normalization conditions satisfied by these functions are

$$\int dx dy |\phi_{2D}^{HO}(x, y)|^2 = 1, \quad (3)$$

$$\int dz |\psi_{1D}(z, t)|^2 = 1. \quad (4)$$

It is evident that the approximation given by equation (2) replaces the actual cigar-shape condensate by a ‘cylindrical’ one and, as we shall, see this has evident consequences both in their stationary and dynamical properties.

After the equation for the 2D harmonic oscillator $\phi_{2D}^{HO}(x, y)$ is integrated out (see [32, 34]), the resulting 1D GP equation that describes the time dynamics in the longitudinal z -axis is,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{1D}(z, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 + \hbar \omega_r + \frac{4\pi \hbar^2 Na}{m} \frac{1}{\pi \alpha l_r^2} |\psi_{1D}(z, t)|^2 \right] \psi_{1D}(z, t), \quad (5)$$

where $l_r = \sqrt{\hbar/m\omega_r}$ is the natural in-plane harmonic oscillator length along the tight confinement, and the factor α in the effective non-linear coupling is either $\alpha = 2$ if the integration of the transverse modes is performed at the level of the energy functional [32], while $\alpha = 3$ if the integration is done at the 3D GP equation itself. In the following section we will compare the solution of the above approximated equation, as a function of coupling constants Na and the ratio $\gamma = \omega_z/\omega_r$, with the solution of the full 3D GP. We point out here that the value of γ ranges in the interval [0.001, 1] in typical experimental situations [40–42].

The stationary solution to the above 1D GP equation is found by assuming a solution of the type

$$\psi_{1D}(z, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \psi_{1D}^s(z) \quad (6)$$

where $\psi_{1D}^s(z)$ is the stationary solution and μ is the chemical potential, not only of the reduced 1D system, but also of the full 3D gas. We shall return to this point in the comparisons below.

2.2. Disk shaped Bose–Einstein condensates

We now consider the equations that describe a time dependent Bose–Einstein condensate lying in the $x - y$ plane. For this purpose we proceed in an analogous way as that described in the previous subsection. We now

assume that frequency along the z -axis is very large with respect to frequencies in the directions x and y , assumed equal, $\omega_x = \omega_y = \omega_r \ll \omega_z$. Then, in this case, the proposal is to approximate the 3D condensate wave function as

$$\psi_{3D}(x, y, z, t) \approx \psi_{2D}(x, y, t) \phi_{1D}^{HO}(z), \quad (7)$$

being $\phi_{1D}^{HO}(z)$ the 1D harmonic oscillator for the ground state in direction z , having as its natural length $l_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$. The function $\psi_{2D}(x, y, t)$ describes the time dynamics of a 2D disk shaped condensate situated in the plane $x - y$. The analogous normalization conditions to the cigar shaped condensate become now,

$$\int dx dy |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 = 1, \quad (8)$$

$$\int dz |\phi_{1D}^{HO}(z)|^2 = 1. \quad (9)$$

Again, after integrating out the 1D stationary contribution, one is left with an effective 2D GP equation that describes the dynamics of the condensate:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{2D}(x, y, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 + \frac{1}{2} \omega_r^2 (x^2 + y^2) + \frac{1}{2} \hbar \omega_z + \frac{4\pi \hbar^2 Na}{m} \frac{1}{\sqrt{\pi} \alpha l_z} |\psi_{2D}|^2 \right] \psi_{2D}(x, y, t). \quad (10)$$

where again, $\alpha = 2$ or $\alpha = 3$, depending on whether the integration is made at the level of the energy functional [32] or the 3D GP equation, following the proposal of [34]. As we discuss below, we will compare the solution of this approximated 2D equation with that of the full 3D GP equation, as a function of g and of the frequencies ratio $\gamma = \omega_z/\omega_r$. Typical values of this ratio are in the interval $[1, 10^3]$ [13, 35, 43, 44]. Also, as in the 1D case, the stationary 2D solution is given by,

$$\psi_{2D}(x, y, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \psi_{2D}^s(x, y) \quad (11)$$

with μ the chemical potential when the gas is in its ground state, namely, at $T = 0$, both of the reduced 2D system and of the full 3D gas.

3. Validity tests of dimensional reduction

The main purpose of this work is to compare the numerically exact solution $\psi_{3D}(\mathbf{r}, t)$ to the 3D GP equation (1) with the approximated ansatz given by equations (2) and (7), respective solutions to the 1D GP equation (5) and to the 2D GP equation (10), for different values of the ratio $\gamma = \omega_z/\omega_r$ and of the atomic interaction g . We base our conclusions on extensive numerical calculations with state-of-the-art parallel computations on GPU processors; see [appendix](#) for details of the numerical calculations.

In what follows we use dimensionless units, $\hbar = m = \omega_r = 1$. With this convention, all lengths are adimensionalized with $l_r = (\hbar/m\omega_r)^{1/2}$. We note that the whole problem has 5 parameters, \hbar, m, a, ω_z and ω_r , and therefore, with the chosen adimensionalization we are left with two free parameters, namely, the anisotropy ratio $\gamma = \omega_z/\omega_r$ and the dimensionless interaction strength, $g = 4\pi Na/l_r$. As we now describe, we make comparisons of the following quantities, three of stationary nature and the other a dynamical one. Each quantity is compared for each value of the pair of parameters (g, γ) and for the two different approaches, namely, $\alpha = 2$ and $\alpha = 3$.

(I) Chemical potential. The chemical potential μ_{3D} of the stationary solution of the 3D GP equation (1) is separately compared with the chemical potential μ_{1D} and μ_{2D} of the corresponding stationary solutions of the 1D and 2D GP equations (5) and (10). It is expected that $\mu_{1D} \rightarrow \mu_{3D}$ as $\gamma \rightarrow 0$, while $\mu_{2D} \rightarrow \mu_{3D}$ as $\gamma^{-1} \rightarrow 0$.

(II) Stationary transverse wavefunction. For the 1D case, we compare the exact stationary 3D solution $\psi_{3D}(x, 0, 0)$, evaluated along the transverse direction x , with the product $\phi_{2D}^{HO}(x, 0) \psi_{1D}(0)$. This is in order to see if the assumption that the function $\psi_{3D}(x, 0, 0)$ indeed corresponds to that of a harmonic oscillator in the x -axis. For the 2D case, the analog is the comparison of the stationary $\psi_{3D}(0, 0, z)$ along the longitudinal direction with $\phi_{1D}^{HO}(z) \psi_{2D}(0, 0)$.

(III) Fidelity of the approximated 1D and 2D wavefunctions. The main assumption behind the 1D and 2D wavefunctions ansatz is an adiabatic approximation. That is, that for sufficiently long times, the approximated wavefunction behave as 1D and 2D solutions when evolved by the full 3D GP equation. To directly test this assumption we take the stationary 1D and 2D solutions, $\phi_{2D}^{HO}(x, y) \psi_{1D}(z)$ and $\phi_{1D}^{HO}(z) \psi_{2D}(x, y)$ obtained from the respective 1D and 2D GP equations, and evolve them with the *full* 3D GP equation. Then, we calculate the ‘fidelity’, which is the overlap of the initial state with its evolution as a function of t , namely,

$$C(t) \equiv \left| \int \psi^*(x, y, z, 0) \psi(x, y, z, t) d^3r \right|, \quad (12)$$

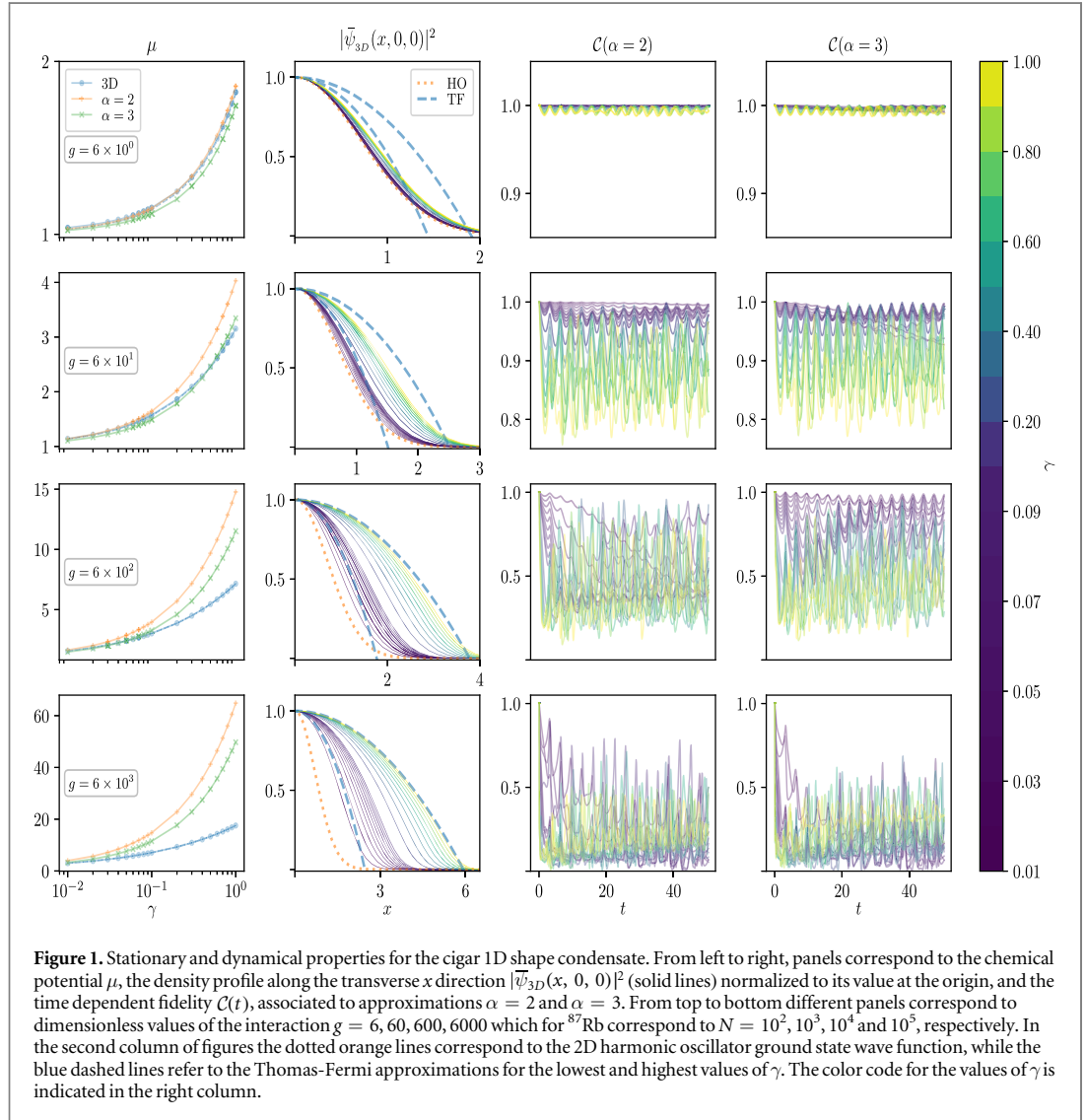


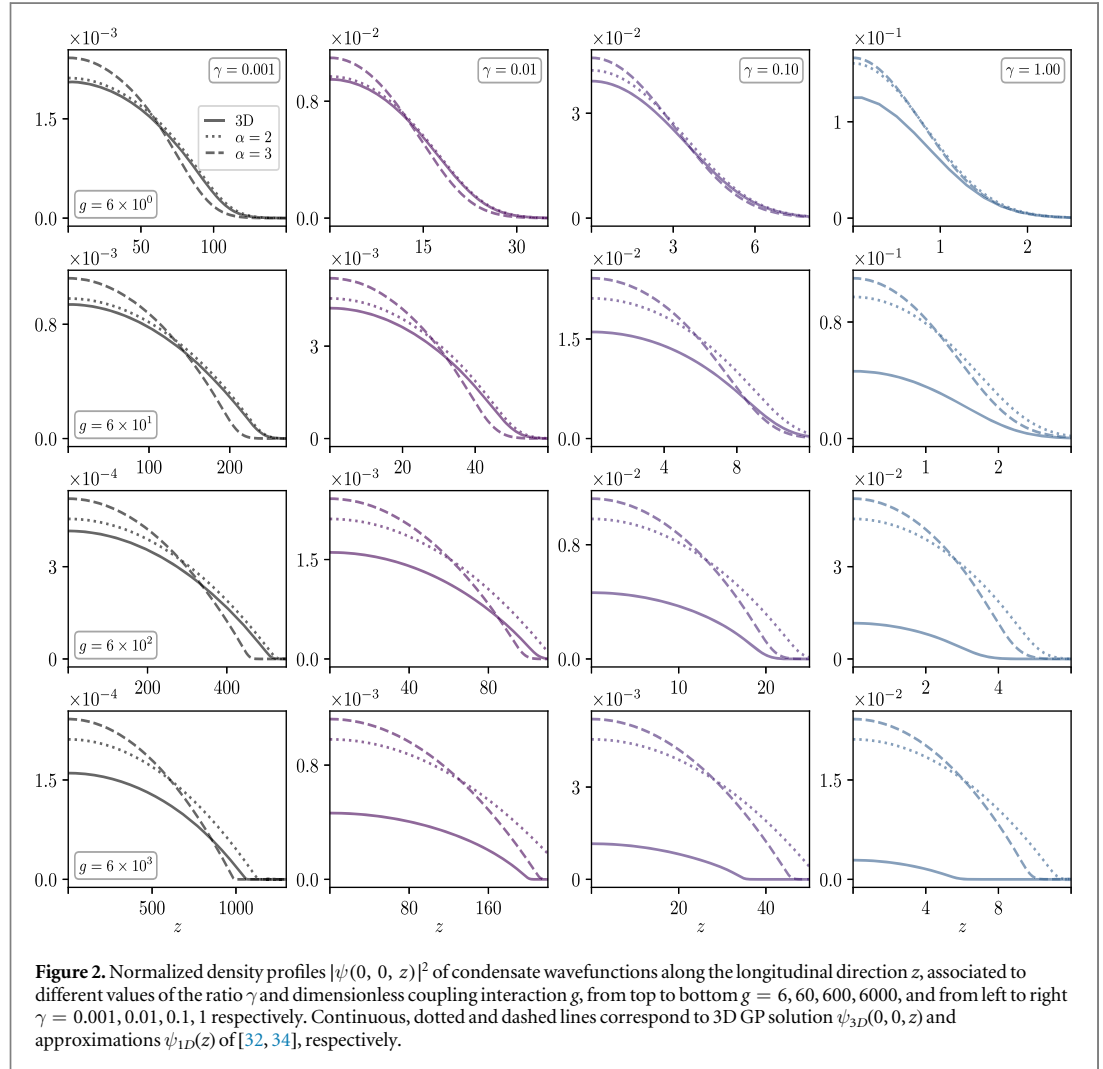
Figure 1. Stationary and dynamical properties for the cigar 1D shape condensate. From left to right, panels correspond to the chemical potential μ , the density profile along the transverse x direction $|\bar{\psi}_{3D}(x, 0, 0)|^2$ (solid lines) normalized to its value at the origin, and the time dependent fidelity $C(t)$, associated to approximations $\alpha = 2$ and $\alpha = 3$. From top to bottom different panels correspond to dimensionless values of the interaction $g = 6, 60, 600, 6000$ which for ^{87}Rb correspond to $N = 10^2, 10^3, 10^4$ and 10^5 , respectively. In the second column of figures the dotted orange lines correspond to the 2D harmonic oscillator ground state wave function, while the blue dashed lines refer to the Thomas-Fermi approximations for the lowest and highest values of γ . The color code for the values of γ is indicated in the right column.

where $\psi(x, y, z, 0) = \phi_{2D}^{HO}(x, y)\psi_{1D}(z)$ for 1D, and $\psi(x, y, z, 0) = \phi_{1D}^{HO}(z)\psi_{2D}(x, y)$ for 2D. If the fidelity $C(t) = 1$ for all times, it means that $\psi(x, y, z)$ is a true stationary state.

(IV) Stationary longitudinal wavefunction. Here we make a very important comparison of the stationary solutions, since this is the direct verification of the stationary solutions of the different GP equations. In the 1D case, we compare the exact stationary 3D wavefunction, along z , namely, $\psi_{3D}(0, 0, z)$ with $\phi_{2D}^{HO}(0, 0)\psi_{1D}(z)$, solution of the 1D GP given by equation (5). For the 2D case, due to the $x - y$ symmetry, we compare $\psi_{3D}(x, 0, 0)$ with the solution of the 2D GP equation (10), $\phi_{1D}^{HO}(0)\psi_{2D}(x, 0)$.

Our results are summarized in the panels of figures 1 and 2 for the cigar 1D shape, and figures 3 and 4 for the disk 2D case.

It is interesting to notice that the approximations here considered [32, 34], leads us to recognize that the effective coupling interaction of the 3D GP equation $g \sim Na$, is replaced by rescaled effective interaction coupling constants g^{1D} and g^{2D} when the isotropic condensate cloud is squeezed to 1D and 2D respectively, see equations (5) and (10) where $g^{1D} \sim Na/l_r^2$ and $g^{2D} \sim Na/l_z$, accordingly. It is important to mention here an alternative procedure [35] to find the effective two-body interaction parameter in a 2D harmonic trap, which essentially leads to the case of [32], namely $\alpha = 2$, with an additional logarithmic correction depending on a momentum cutoff. This would lead to an adjustment of the effective coupling only and will not change the main conclusions here presented.

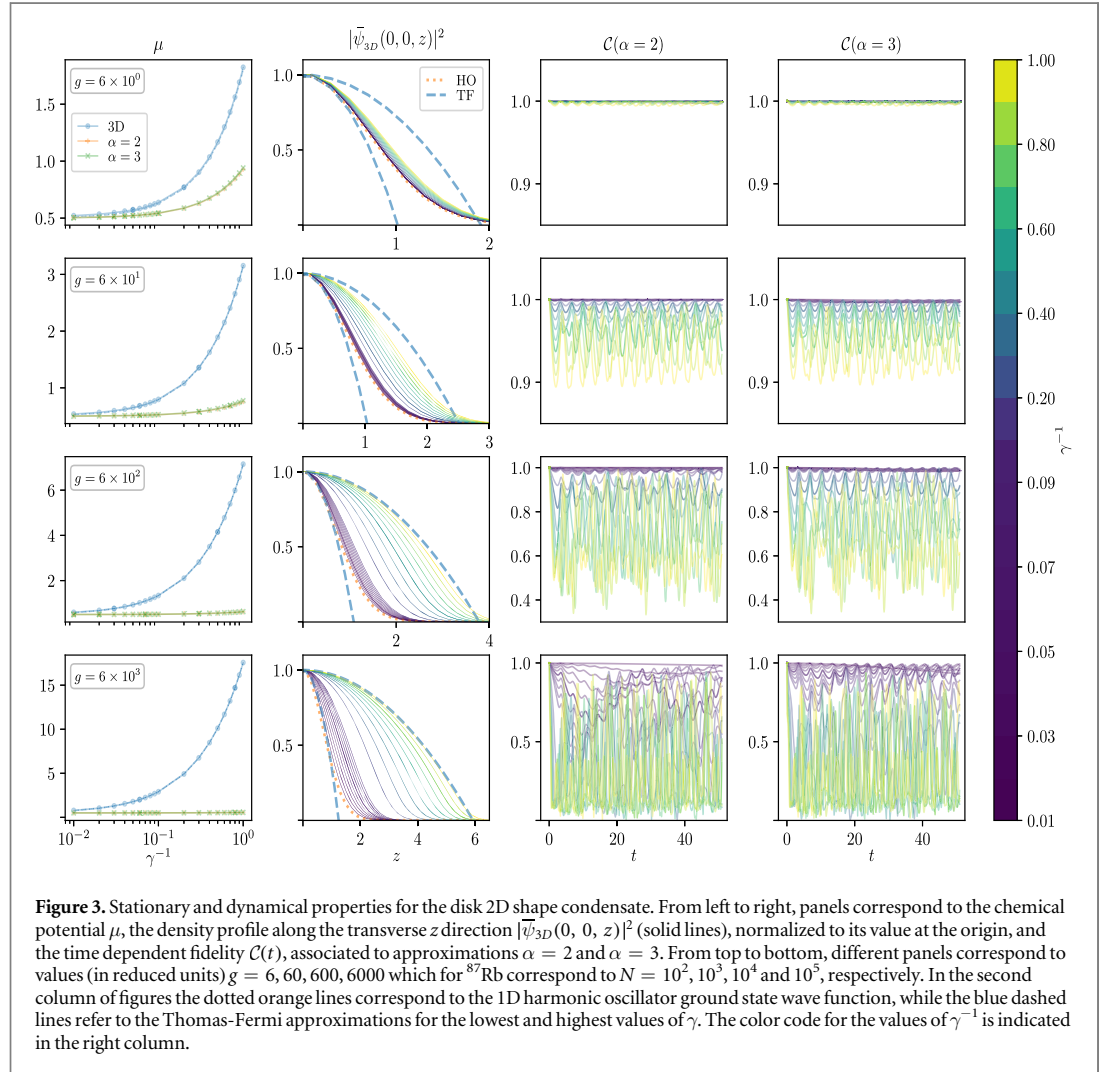


4. Comparing the approximated 1D cigar shape BEC with its full 3D solution

For this case, we performed calculations for nearly 20 values in the range $\gamma = 0.001$ up to $\gamma = 1.0$, and for four cases of the dimensionless interaction strength, $g = 6, 60, 600, 6000$, which, when using values of ^{87}Rb , correspond to approximately a number of atoms $N = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5$.

Referring to figure 1, looking first at the chemical potential, the first column of the panel, we plot the three obtained values μ_{3D} , in dimensionless units, the chemical potential of the full 3D solution, and the values μ_{α} , $\alpha = 2$ and 3, corresponding to the two versions of the 1D solutions. As expected, in all cases, it is clear that as $\gamma \rightarrow 0$, the three of them reach the same value. We observe that for intermediate and small values of the interaction the value of the chemical potential is in good agreement with its 3D version for not very small values of γ , the case $\alpha = 3$ fairing better than $\alpha = 2$. In particular, for $g = 6$ ($N = 10^2$), the chemical potential μ is essentially independent of the anisotropy γ . The conclusion is that the non-linear term is just a perturbation to an uncoupled 3D harmonic oscillator. In other words, dimensionality plays a role only as the interaction is increased. In this regard, the interesting and notorious observations is that as $\gamma \rightarrow 1$, namely, reaching the isotropic case, the expected discrepancy becomes clear as the strength g is increased. This is consistent with the other tests, as we now discuss.

The next comparison is the transverse part of the normalized condensate density profile, $|\overline{\psi}_{3D}(x, 0, 0)|^2$ (solid lines), second column in the panel of figure 1. We point out that the ansatz to reduce the dimensionality is the assumption that in the (x, y) coordinates, the wavefunction is that of the ground state of a 2D harmonic oscillator, see equation (2). In all figures there is a dotted line (orange), labeled (HO), and two dashed lines (blue), labelled (TF). The former is the plot of the harmonic oscillator density in the x -direction of the ansatz, normalized to its value at $x = 0$, i.e. $|\phi_{2D}^{HO}(x, 0)\psi_{1D}(0)|^2$, while the latter are the Thomas-Fermi approximation

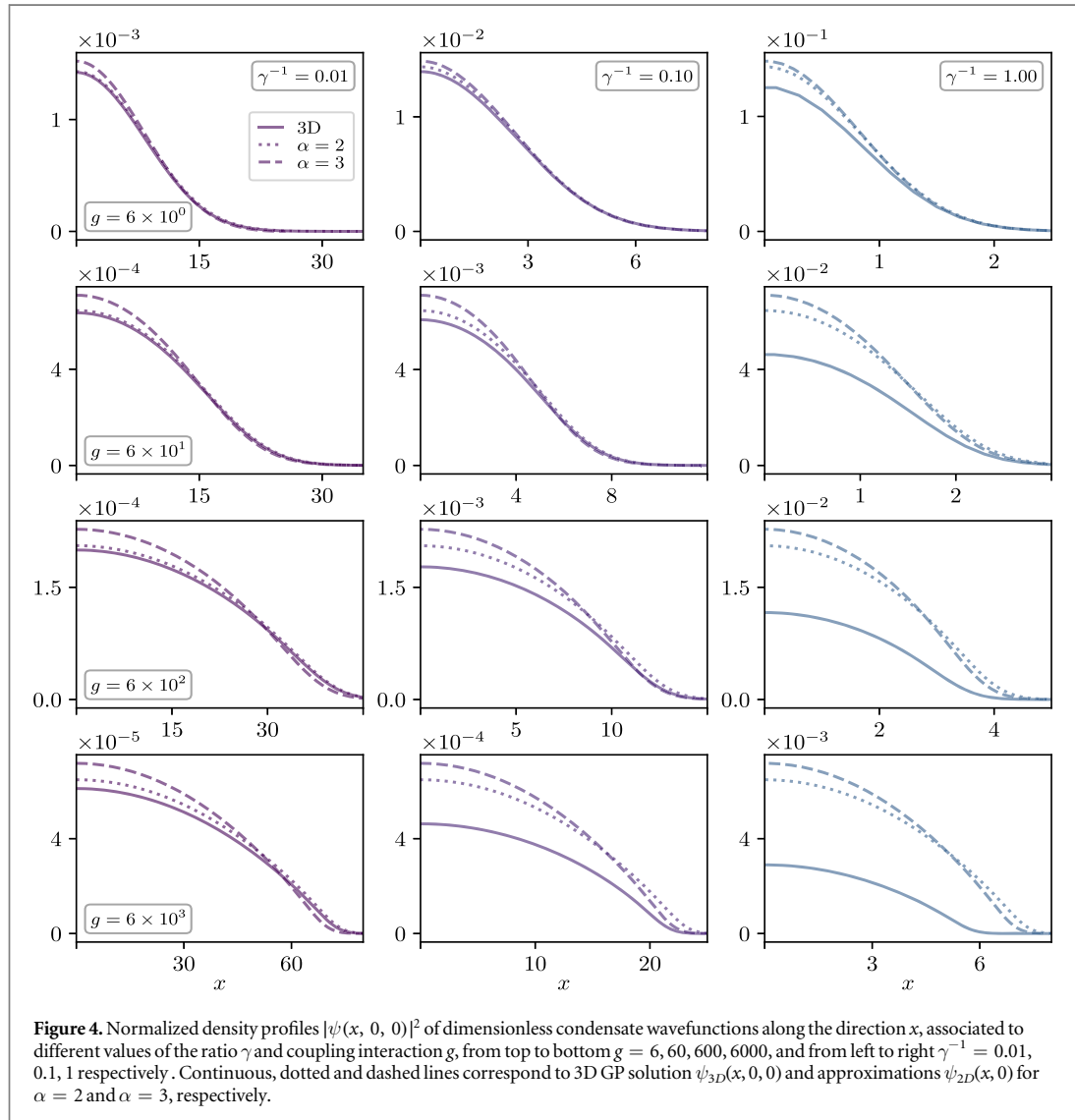


for the extreme values $\gamma = 0.01$ and $\gamma = 1.0$. Here we recall that the TF approximation is the limit when the kinetic energy term (proportional to the laplacian) in the GP equations, compared with the non-linear term, can be neglected; this yields, for a generic harmonic potential,

$$\rho_{TF}(r) = \frac{1}{g} \left(\mu - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) \quad (13)$$

if the right-hand-side is positive, and $\rho_{TF}(r) = 0$ if negative. We note that for $g = 6$, the HO ansatz is ‘too’ good since, in agreement with the results of the chemical potential, the transverse wavefunction is indeed a HO one, but for all values of γ , just corroborating that the interaction term is a perturbation. As g is increased, and for $\gamma \rightarrow 1$, the transverse part tends to the TF solution. However, for small γ the approach to the HO profile is too slow, deteriorating even more for larger values of g . The overall conclusion is that as the interaction is large enough, $g \geq 60$, the 2D harmonic oscillator wave function is a reasonable good approximation for γ sufficiently small, namely, for $g = 60, \gamma \leq 0.1$ and for $g = 600, \gamma \leq 0.001$, and so on. At this stage it is worth mentioning that there are two other variational approaches that lead to approximated 1D and 2D GP-like equations [29–31] which show two different regimes, a weakly and a strong interacting ones. The former coincides with the 1D and 2D approaches analyzed here but the latter seemingly describes a different regime where interactions are more relevant. In such a regime, those approaches lead to *transverse* profiles close to a Thomas-Fermi one, rather than to a gaussian shape. What we find, however, with our exact 3D calculations, is that the strong interaction regime may apply when the anisotropy is very small only, namely, when $\gamma \sim 1$, since it is in this limit when the TF approximation for the transverse part is approached. Although those approximations [29–31] may be useful in some particular cases, it is our conclusion that for condensates nearly isotropic one should remain within a numerical solution of the full 3D GP equation.

The third and fourth columns in figure 1 show the fidelity of the stationary states, for $\alpha = 2$ and $\alpha = 3$, when evolved with the full time-dependent 3D GP equation, equation (1). These results show, again, that for



small g the fidelity is better than for large g , corroborating that the non-linear term amounts to a perturbation. For $g = 600$ and $g = 6000$, the results are not very encouraging, signaling that the adiabatic ansatz is not satisfactory for all the considered values of γ , it appears that values of γ smaller than 0.001 should be considered. At first sight, within this test, it seems that the 1D limit is better achieved for $g = 60$ and $\gamma \approx 0.01$. But we still need to cross this conclusion with the actual longitudinal behavior at 1D, shown in figure 2 below. It is of interest to mention that the wavefunction $\psi_{1D}(z)$ in the case $\alpha = 3$ [34] appears a bit better than $\alpha = 2$ [32], but with no major differences. We also point out that the oscillations shown by all the time evolutions of the fidelity, correspond to the frequency of the trap, indicating a kind of ‘revival’ of a better agreement every period of the oscillations at ω_r . These oscillations are a breathing mode of the transverse modes induced by the initial approximation that the shape of the condensate is actually a cylinder than a cigar-like one.

Figure 2 shows comparisons of the 3D condensate density profiles along the longitudinal z - direction, $\psi_{3D}(0, 0, z)$ with the corresponding 1D solutions $\phi_{2D}^{HO}(0, 0)\psi_{1D}(z)$, for $\alpha = 2$ and $\alpha = 3$, for the same cases of g as in figure 1, and for the selected values $\gamma = 0.001, 0.01, 0.1, 1$. Note that in figure 1 the lowest value of γ is 0.01 . Once more, the best agreement for the order parameter is for the smallest $g = 6$, yet, the 1D profiles are very close to those of a harmonic oscillator. The expectation is that, in order to see GP behavior, the profiles should be close to a TF type of profile. This is certainly corroborated as g is increased, namely, that while the agreement between the 1D approximations and the full 3D calculations may not be very good, all of them tend to a TF profile. Crossing now the results of this figure with those of figure 1, one finds again that for $g = 60$ and $\gamma = 0.01$ there is a good agreement with TF behavior, specially for $\alpha = 2$. The purpose of including the very small value $\gamma = 0.001$ here, allows us to conclude that a similar agreement is found for $g = 600$ and $\gamma = 0.001$, and for $\alpha = 2$. This trend suggests that for $g = 6000$, a very large value, the agreement should be found for

values near $\gamma = 0.0001$. This latter value is beyond any experimental realizations reported. Moreover, as we indicate in [appendix](#), such a small value of γ cannot be calculated numerically here with the same accuracy used for the other calculations. It is important to emphasize that a good approximation of the chemical potential can be reached for a certain range of the ratio γ even for large values the interatomic parameter g (see the first column in [figure 1](#)).

An overall conclusion here, to be further discussed in the final section, is that, although the non-linear 1D behavior is indeed reached for smaller values of γ as g is increased, there is a crossover value below which, dimensionality plays no role.

5. Comparing the approximated 2D disk shape BEC with its full 3D solution

In this section we now compare the GP solution associated to a disk shaped condensate lying in the $x - y$ plane, to the solution in 3D space. As in the previous 1D-3D comparison, we consider four cases of the interaction strength, $g = 6, 60, 600, 6000$, which for ^{87}Rb , correspond to a number of atoms $N = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5$. We also compare the two approximated versions of the 2D GP equations, equation (10), with $\alpha = 2$ and $\alpha = 3$. Since we keep the same notation for the frequency ratio $\gamma = \omega_z/\omega_r$, now $\gamma \geq 1$, hence, we present our results as a function of γ^{-1} , ranging from 0.01 to 1. We proceed similarly as before discussing stationary and dynamical properties.

In [figure 3](#), first column, the chemical potential is plotted as a function of γ^{-1} and, as expected, as $\gamma^{-1} \rightarrow 0$ the 3D and the two 2D cases converge to the same value. We note that the values of the chemical potential for the 2D versions are essentially the same, in contrast with the 1D situation. Although the 2D approximation should only be used as $\gamma^{-1} \rightarrow 0$, one would like to see how small should actually be this parameter. We observe that, even for small g , the discrepancy between 3D and 2D is always clear for $\gamma^{-1} \rightarrow 1$, becoming even more evident as g is increased, reaching a situation where the chemical potential remains almost constant for all values of γ^{-1} . Hence, according to the chemical potential, 2D approximations can be considered appropriate until $\gamma^{-1} \approx 0.01$. This is too stringent, with respect to the following tests.

The second column of panels in [figure 3](#) shows the transverse dependence of the density profiles, which in this case is along the z coordinate, the disk being on the $x - y$ plane. The ansatz equation (7) in both approximations is, again, the ground state wavefunction of a 1D harmonic oscillator of frequency ω_z . This is shown with a (orange) dotted line. The curves plotted correspond to the different 3D calculations of the wavefunction along the z direction, but all normalized by the wavefunction value at $(0, 0, 0)$ to better appreciate the differences with respect to the gaussian HO and the TF profiles. The dashed (blue) lines are the Thomas-Fermi approximation for the $\gamma^{-1} = 1.0$ and $\gamma^{-1} = 0.01$ profiles. Similarly to the 1D case, the dependence on g is clear: for small $g \sim 6$, most of the transverse profile approach essentially the gaussian profile, almost independently of the value of γ^{-1} . That is, TF behavior is never seen, indicating that this system is close to a 3D uncoupled HO. On the other hand, as g is increased, the profiles are close to the gaussian one for small γ^{-1} , becoming TF as the system becomes isotropic. A contrast to the 1D case, as reiterated by the tests below, is that for $\gamma^{-1} \leq 0.1$ the transverse dependence along z tends very nicely to the gaussian profile for essentially all values of g , yielding a good validity to the proposed ansatz.

Another very interesting aspect of the 2D approximations is found in the time evolution of the fidelity, shown in the third and fourth columns of [figure 3](#), where we observe that for small $\gamma^{-1} \leq 0.1$, the 2D calculations, specially for $\alpha = 3$ are quite stationary for all values of g . We recall that in the 1D case this type of agreement deteriorates as g increased. Putting together the two previous tests, chemical potential and wavefunction transverse dependence, with the fidelity time evolution, one can conclude that $\gamma^{-1} \sim 0.01 - 0.1$ are enough to reach a 2D disk condensate, although the 2D GP physics is better seen as g increases, just as in the 1D case.

The last test, shown in the panels of [figure 4](#), corroborate the conclusion of the last paragraph, namely, that $\gamma^{-1} \leq 0.1$, and $g \geq 60$, describe an interacting condensate in 2D. This can clearly be seen in the first and second columns corresponding to $\gamma^{-1} = 0.01$ and 0.1 , where the 2D profiles are very close to the 3D one, specially the case $\alpha = 2$ in which the dimensional reduction is performed at the level of the energy functional [32].

6. Final remarks

As expressed in the Introduction, physical properties of many-body systems tend to have a strong and rich dependence on dimensionality. This motivates the design of experiments that reduce dimensionality, from our 3D world, to test and understand those differences and to explore different physical phenomena. Bose-Einstein condensation is not an exception and, while the Gross-Pitaevskii approximation does not encompass all its physical behavior since it describes the superfluid at zero temperature only, it serves nevertheless as a tool to test

the validity of the, many times simply assumed, reduced dimensionality of the GP equation. This is the main purpose of the present study.

In section 2 we briefly presented the GP equations that can be obtained from an adiabatic approximation, in the limit $\gamma \rightarrow 0$ in 1D and $\gamma^{-1} \rightarrow 0$ in 2D [32, 34]. Those procedures differ slightly in their final obtention of the corresponding GP equations, and the only discrepancy is that the effective 1D and 2D atomic interaction parameter g are the factors $1/\pi\alpha$ in 1D and $1/\sqrt{\pi\alpha}$ in 2D, see equations (5) and (10). There is, however, an additional subtle point in the dimensional reduction that we address now. The physical picture of such a reduction is that from an interacting Bose gas in a 3D harmonic potential, one or two of the dimensions are ‘squeezed’ by largely increasing the corresponding trap frequencies. As a consequence, the energy levels along the squeezed dimensions become so separated that the system remains in its lowest energy state along those directions, and the non-linear interacting dynamics occurs in the remaining 1D or 2D degrees of freedom. The point we make here is that the previous picture is not quite represented by the reduction in the GP equation. That is, because the equation mathematically has five parameters, \hbar , m , g , ω_r and ω_z , three are used for dimensions, say \hbar , m and ω_r . Thus, the change in dimensions is obtained by the dimensionless parameter $\gamma = \omega_z/\omega_r$, such that $\gamma \ll 1$ can be obtained by keeping the value of ω_z and increasing ω_r , namely squeezing the transverse dimension, or by enlarging ω_z . But in the latter case the ‘energy levels’ in the transverse directions were not affected, yet, as $\gamma \rightarrow 0$ the dimension reduction is obtained. As a matter of fact, in our numerical code we kept ω_r and reduce ω_z to keep the same level of accuracy in all the calculations. The obvious conclusion is that GP is insensitive to either change in the frequencies and therefore, the physics of the reduction is a different one from the naive picture. At the level of the GP equation, the answer of the dimension reduction lies in the non-linearity of the equation, which physically represents the interatomic interactions: the anisotropy of the external potential, $\gamma \rightarrow 0$ or $\gamma \rightarrow \infty$, results in a decoupling of the interaction in the *relatively* smaller potential lengths, independently of their actual value. However, as clearly indicated by the calculation, the true reduction from a 3D to a 1D or 2D system is not relative, it occurs for values of the interaction larger than $g \sim 10$, the transition being a crossover rather than a sharp one. For smaller values of g , the system is essentially a harmonic oscillator decoupled in its three dimensions, the non-linear interaction being a perturbation.

Comparing and summarizing figures 1–4, the reduction for 1D is more delicate than in 2D. It may be that reducing two dimensions is harder than reducing only one. For the 1D case, the best achievement is for $g \approx 60$ and $\gamma \approx 0.01$, and the expectation is that an increase in a order of magnitude for g requires a decrement in γ for also an order of magnitude approximately, namely $g = 600$ requires $\gamma \approx 0.001$. Nevertheless, considering purely global properties, such as the chemical potential, the approximation do much better in 1D than in 2D for values of the anisotropy parameter γ not so small; this is important to keep in mind as being a typical consequence of variational approaches. Regarding experiments, it seems that the strong limit $\gamma \sim 0.001$ for $g \sim 600$ are not easily achieved, however, for the 2D reduction, the bounds are better. That is, for $\gamma^{-1} \sim 0.01 - 0.1$ and for $g \geq 60$ all cases are a good 2D system. In particular, a promising candidate is $g = 6000$ ($N = 10^5$) and $\gamma^{-1} = 0.01$, for this is typical of actual experimental scenarios. Regarding the two types of reductions, it is not definite which one is more accurate, since $\alpha = 3$ is better in the chemical potential and the fidelity tests, while $\alpha = 2$ appears more reliable in the prediction of the stationary density profile in the reduced dimensions.

Acknowledgments

This work was partially funded by grants IN105217 DGAPA (UNAM), 255573 (CONACYT) and LN-232652 (CONACYT). GAD-C acknowledges a scholarship from CONACYT. CT-G acknowledges support from the Brazilian Agency CNPq.

Appendix: Details of the GP numerical solutions

To perform the tests described above, we numerically solve the stationary and time-dependent GP equations in their 1D, 2D and 3D versions. We use dimensionless variables $\hbar = m = \omega_r = 1$, yielding two dimensionless free parameters $\gamma = \omega_z/\omega_r$ and the interaction strength g . For purposes of potential comparisons with current experiments, we use the value of the scattering length of ^{87}Rb , $a \approx 50 \times 10^{-8}$ cm. This yields the dimensionless values that we use, $g = 6, 60, 600, 6000$, which correspond to number of particles, $N = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5$.

The stationary GP equations are solved with the method of imaginary time evolution [21, 45, 46] and the time-dependent GP one with a fourth-order Runge-Kutta (RK-4) evolution [47–49]. The laplacians in the equations can be calculated with finite differences or with spectral methods yielding the same results. The codes are performed in state-of-the-art parallel GPU processors. We use a system with four GPU Nvidia GTX 1080 with a total amount of 10,240 CUDA cores achieving a considerable saving of computing time. To perform GPU

programming of the GP equations we use Python libraries such as PyCUDA, Scikit-Cuda, pyFFT and Scipy [50–54].

The most demanding calculations are those in 3D and in order to keep the same level of accuracy for the different values of γ , we use cartesian grids in all dimensions, with a constant value Δl for every length interval; this interval typically take the values 0.05, 0.1 or 0.2. Our 3D grids range from $512 \times 512 \times 512$ for isotropic clouds up to very elongated ones $64 \times 64 \times 8192$ for 1D cigar-shaped condensates and $1024 \times 1024 \times 64$ for very flat disk-shaped ones. The time steps imaginary for the time evolution are $d\tau = 0.002$, and 0.001 , and for real time evolution we consider $\Delta t = 0.001$ and 0.0001 . As expected, we recover analytical solutions for the HO when $g = 0$. To test the correctness of all stationary states we perform an RK-4 time propagation of each studied case for $t = 50$ units of time, and verify that the energy and normalization remain constant within a relative error around 10^{-5} . Furthermore, as a double check, we analyze distinct simulation boxes for some cases, obtaining the same wave functions and chemical potentials. The same RK-4 evolution is used for the calculation of the fidelity overlaps. We point out that the total time evolution of 50 time steps plus relax iterations to find stationary states, were equivalent of nearly 100 hours of GPU processor. Thus, considering the full set of values of γ , as well as different numbers of N analyzed, the total time in the numerical calculations here studied demanded nearly 3600 hours of a GPU processor.

ORCID iDs

R Zamora-Zamora  <https://orcid.org/0000-0003-0272-657X>

G A Domínguez-Castro  <https://orcid.org/0000-0002-7032-2465>

C Trallero-Giner  <https://orcid.org/0000-0002-1640-8591>

R Paredes  <https://orcid.org/0000-0001-8855-606X>

V Romero-Rochín  <https://orcid.org/0000-0003-4987-1600>

References

- [1] Mermin N and Wagner H 1966 *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133
- [2] Hohenberg P C 1967 *Phys. Rev.* **158** 383
- [3] Kosterlitz J and Thouless D 1973 *J. Phys. C* **6** 1181
- [4] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S and Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [5] Wilder J W G, Venema L C, Rinzler A G, Smalley R E and Dekker C 1998 *Nature* **391** 59
- [6] Choi J Y, Hild S, Zeiher J, Schauß P, Rubio-Abadal A, Yefsah T, Khemani V, Huse D A, Bloch I and Gross C 2016 *Science* **352** 1547
- [7] Bernhard I and Pelster A 2017 *Phys. Rev. A* **95** 043610
- [8] Potter A C, Vasseur R and Parameswaran S 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031033
- [9] Vosk R, Huse D A and Altman E 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031032
- [10] Kjäll J A, Bardarson J H and Pollmann F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 107204
- [11] Pal A and Huse D A 2010 *Phys. Rev. B* **82** 174411
- [12] Hadzibabic Z, Kruger P, Cheneau M, Battelier B and Dalibard J 2006 *Nature* **441** 1118
- [13] Chomaz L, Corman L, Bienaimé T, Desbuquois R, Weitenberg C, Nascimbene S, Beugnon J and Dalibard J 2015 *Nat. Comm.* **6** 6162
- [14] Arnold P and Boris T 2001 *Phys. Rev. A* **64** 053609
- [15] Houbiers M, Stoof H T C and Cornell E A 1997 *Phys. Rev. A* **56** 2041
- [16] Gerbier F, Thywissen J H, Richard S, Hugbart M, Bouyer P and Aspect A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 030405
- [17] Romero-Rochín V 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 130601
- [18] Davis M J and Blakie P B 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 060404
- [19] Sandoval-Figueroa N and Romero-Rochín V 2008 *Phys. Rev. E* **78** 061129
- [20] Zobay O 2009 *Laser Phys.* **19** 700
- [21] Zamora-Zamora R, Lozada-Hidalgo M, Caballero-Benitez S F and Romero-Rochín V 2012 *Phys. Rev. A* **86** 053624
- [22] Leanhardt A E, Shin Y, Kielpinski D, Pritchard D E and Ketterle W 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 140403
- [23] Abo-Shaeer J R, Raman C, Vogels J M and Ketterle W 2001 *Science* **292** 476
- [24] Choi J, Kwon J W and Shin Y 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 035301
- [25] Zamora-Zamora R and Romero-Rochín V 2018 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 045301
- [26] Kawakami T, Mizushima T, Nitta M and Machida K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 015301
- [27] Battye A, Cooper N R and Sutcliffe P M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 080401
- [28] Lieb E H, Seiringer R and Yngvason J 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 150401
- [29] Salasnich L, Parola A and Reatto L 2002 *Phys. Rev. A* **65** 043614
- [30] Muñoz-Mateo A and Delgado V 2008 *Phys. Rev. A* **77** 013617
- [31] Yang T, Henning A J and Benedict K A 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 035302
- [32] Bao W, Jaksch D and Markowich P A 2003 *J. of Comput. Phys.* **187** 318
- [33] Bao W, Ge Y, Dieter J, Markowich P A and Weishäupl R M 2007 *Comp. Phys. Comm.* **177** 1183
- [34] Trallero-Giner C, Cipelatti R and Liew T C H 2013 *Eur. Phys. J. D* **67** 143
- [35] Petrov D S, Holzmann M and Shlyapnikov G V 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2551
- [36] Jackson A D, Kavoulakis G M and Pethick C J 1998 *Phys. Rev. A* **58** 2417
- [37] Chiofalo M L and Tosi M P 2000 *Phys Lett A* **268** 406
- [38] Nicolin A I and Raportaru M C 2010 *Physica A* **389** 4663
- [39] Carretero-González R, Frantzeskakis D J and Kevrekidis P G 2008 *Nonlinearity* **21** R139

- [40] Hofferberth S, Lesanovsky I, Fischer B, Schumm T and Schmiedmayer J 2007 *Nature* **449**
- [41] Moritz H, Stöferle T, Köhl M and Esslinger T 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 250402
- [42] Tolra B L, O'Hara K M, Huckans J H, Phillips W D, Rolston S L and Porto J V 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 190401
- [43] Seo S W, Choi J and Shin Y 2014 *J of Kor. Phys. Soc.* **64** 53
- [44] Spielman I B, Phillips W D and Porto J V 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 080404
- [45] Zeng R and Zhan Y 2009 *Comp. Phys. Comm.* **180** 854
- [46] Bao Z and Du Q 2004 *J. Sci. Comput.* **25** 1674
- [47] Taha T R and Ablowitz M I 1984 *J. of Comput. Phys.* **55** 203
- [48] Balac S and Mahé F 2015 *J. of Comput. Phys.* **280** 295
- [49] Caplan M R and Carretero-González 2013 *App. Num. Math* **71** 24
- [50] Klöckner A et al 2012 *Parallel Comput.* **38** 3
- [51] Lev G E et al 2018 <https://doi.org/10.5281/zenodo.1479820>
- [52] *pyFFT: FFT for PyCuda and PyOpenCL* <https://pythonhosted.org/pyfft/>
- [53] Eric J et al 2001 <http://scipy.org/>
- [54] According to: <https://nvidia.com/en-us/geforce/products/10series/geforce-gtx-1080/>

Persistence of ferromagnetic domains in a disordered two-dimensional lattice

C. Madroñero, G. A. Domínguez-Castro, L. A. González-García, and R. Paredes*

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México Distrito Federal 01000, Mexico

(Received 27 January 2020; revised 30 June 2020; accepted 6 August 2020; published 2 September 2020)

We investigate the persistence, in time and space, of ferromagnetic domains in two dimensions subjected to the influence of both the static disorder of variable strength and weak interactions. The domains are represented by a two-species bosonic mixture of ^{87}Rb ultracold atoms in different hyperfine states, such that initially one lies on the left half and the other on the right half of a square lattice. The dynamics of the double domain is followed by describing the two-component superfluid through the time-dependent Gross-Pitaevskii coupled equations, with values of the intra- and interspecies interaction that guarantee miscibility of the components. A robust analysis of the magnetization dynamics for several values of the interspecies interaction, reachable in current experimental setups, and the investigation of the density-weighted magnetization correlator lead us to conclude that the presence of structural disorder yields a slowdown the process of destruction of the initial ferromagnetic order. As shown by our numerical calculations, magnetization is maintained up to 50% of its initial value for the largest disorder amplitude considered.

DOI: [10.1103/PhysRevA.102.033304](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.102.033304)**I. INTRODUCTION**

A vast number of phenomena belonging to condensed matter remain until now unsolved. In particular, within the magnetism realm, the dynamics of microscopic spins lying in ultrathin films, the so-called magnetic domain dynamics, continue until now as an open question [1–3]. The origin of the spin-domain dynamics can be attributed to several factors, among them, the presence of external drivings as magnetic or electric fields, the existence of spin-polarized currents inducing the transference of momentum to the domain wall [4,5], and the inner dynamics associated with both the interactions between the microscopic constituents and the energetic landscape where the constituents move. The purpose of the present investigation is to analyze the dynamics of the magnetic domains confined in two dimensions (2D) under the influence of disorder. As we describe in the next paragraph, a stylized system is used to address this objective.

Inspired by the remarkable control achieved with large conglomerates of atoms in their quantum degenerate state, and in particular by the experimental capacity of preparing 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 2D square lattices subjected to static disorder. Our proposal is based on previous experiments that explore the many-body localization phenomenon with ^{87}Rb Bose gases [17,18]. In particular, in Ref. [17] the dynamics of an initially prepared out-of-equilibrium density pattern confined in a disordered optical lattice was followed. Such a quantum quench protocol, planned to

track the effects of disorder on the atom flux moving across the two-dimensional (2D) lattice, together with the possibility of spatially separating different hyperfine components, is the basis of our proposal to study the dynamics of the ferromagnetic domains, particularly their magnetization decay.

To investigate the dynamics of the ferromagnetic domains, and particularly their magnetization decay, we 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 the initial configuration that will evolve in a disordered media (see Fig. 1). This arrangement together with a recent study, performed at the mean-field level for the stationary states of a scalar Bose condensate [19], is our starting point to study the dynamics of the double-spin domain. Although the present study considers square lattices only, investigation of other geometrical configurations, like those considered in Ref. [19], could be of interest in the light of practical purposes such as 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 uncorrelated static disorder. Working within the superfluid regime, corresponding to values of the intraspecies interaction such that the system is far from the Mott-insulating phases, we analyze the evolution of the magnetization for a given initial state, considering different values of the ratio between intra- and interspecies interaction strengths. Motivated by the analysis performed for the spin texture in a degenerate $F = 1$ ^{87}Rb spinor Bose gas and in a caesium Bose-Einstein condensate [20,21], we investigate the density-weighted magnetization correlator and the magnetization variance. These quantities

*rosario@fisica.unam.mx

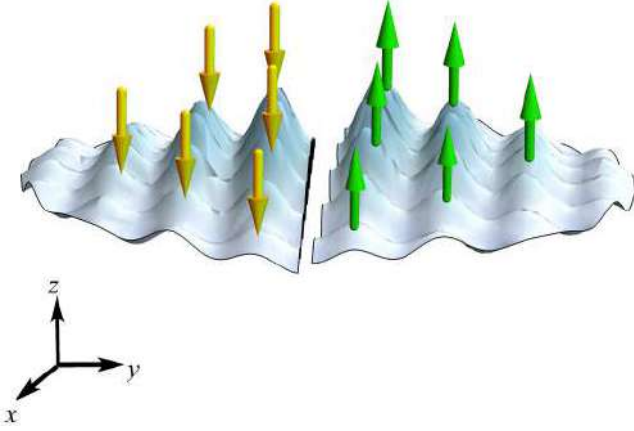


FIG. 1. Schematic form of the density profile prepared as the initial state. The left and right sides represent the superfluid density associated with the hyperfine components \uparrow and \downarrow . Such profiles correspond to densities at zero disorder amplitude and given values of the intra- and interspecies interactions amplitudes $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow}$ and $g_{\uparrow\downarrow}$.

provide information about the magnetization anisotropy and the decaying of the magnetization as a function of time, respectively.

This work is organized as follows. In Sec. II, we present the model used to describe the dynamics of the initial ferromagnetic domains under the influence of disorder. We briefly explain the construction of the initial state from which the evolution in time is followed. In Sec. III A, we show the results of our numerical study concerning the dynamic extinction of ferromagnetic domains, as a function of the disorder amplitude and different interaction strengths. In Sec. III B, we analyze the behavior of the variance and spatial correlations, which allows us to follow the process of demagnetization in time and space. Finally, in Sec. IV, we summarize our findings.

II. MODEL AND INITIAL STATE PREPARATION

We consider a weakly interacting mixture of two hyperfine spin components, $|\uparrow\rangle = |F = 1, m_F = -1\rangle$ and $|\downarrow\rangle = |F = 2, m_F = -2\rangle$, of ultracold ^{87}Rb atoms confined in an inhomogeneous disordered square lattice. At zero temperature and within the mean-field formalism, the wave functions $\Psi_{\uparrow,\downarrow}$ of the two species \uparrow and \downarrow obey the following effective GP equations:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_{\uparrow}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= [H_0(\vec{r}) + g_{\uparrow\uparrow}|\Psi_{\uparrow}|^2 + g_{\uparrow\downarrow}|\Psi_{\downarrow}|^2]\Psi_{\uparrow}(\vec{r}, t), \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_{\downarrow}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= [H_0(\vec{r}) + g_{\downarrow\downarrow}|\Psi_{\downarrow}|^2 + g_{\downarrow\uparrow}|\Psi_{\uparrow}|^2]\Psi_{\downarrow}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (1)$$

where $H_0(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\perp}^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r})$, with $\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ being the Laplacian operator in 2D and m the equal mass of the two spin components. The external potential has the following

form:

$$V_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega_r^2 r^2 + V_0^{\delta} \left[\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \cos^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \right], \quad (2)$$

where $\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j}$; $\omega_r = 2\pi \times 50$ Hz is the radial harmonic frequency, fixed to a common value used in current experiments; a is the lattice constant; and $V_0^{\delta} = V_0[1 + \epsilon_{\delta}(x, y)]$ is the potential depth at each point (x, y) . The function $\epsilon_{\delta}(x, y)$ represents a random disorder uniformly distributed in the interval $\epsilon_{\delta}(x, y) \in [-\delta, \delta]$. Thus, the random depth V_0^{δ} mimics a disordered environment like that introduced by speckle patterns [22]. The amplitude of V_0^{δ} is scaled, as usual, in units of the recoil energy $E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, with $k = \pi/a$.

The interaction couplings $g_{\sigma\sigma'} = 4\pi N\hbar^2 a_{\sigma\sigma'}/m$, with $\sigma\sigma' = \{\uparrow, \downarrow\}$, are written, as usual, in terms of the s -wave scattering length $a_{\sigma\sigma'}$, N being the number of atoms in the condensate. However, we should point out here that these interaction coefficients must be rescaled since the dynamics under study occurs in 2D [23–29]. The effective scattering length in the plane x - y becomes $a_{\sigma\sigma'} \rightarrow a_{\sigma\sigma'}/\sqrt{2\pi}l_z$, with $l_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$, ω_z being a common transverse frequency of condensates [30,31]. 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 interspecies 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 the interaction couplings $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow}$ and $g_{\uparrow\downarrow} = g_{\downarrow\uparrow}$ that ensure the miscibility of the hyperfine components $g_{\uparrow\downarrow} < \sqrt{g_{\uparrow\uparrow}g_{\downarrow\downarrow}}$ [11,32].

Initial ferromagnetic state

To create the initial state from which we follow the demagnetization process, we first determine the stationary states of the coupled equations (1) by means of the imaginary time evolution $\tau \rightarrow i\tau$ [33–36] for a disorder-free optical lattice with the lattice spacing $a = 532$ nm, $N = 600$ atoms, and a potential depth of $V_0/E_R = 4$ (see the Appendix). After free energy minimization, we manually remove $\sigma = \uparrow$ particles from the left-half layer and $\sigma = \downarrow$ particles from the right-half layer (see Fig. 1). This removal of particles mimics experimental protocols in which a digital mirror device is used to optically remove the atoms at specific positions [17]. Here, we perform the dismissing of particles in order to manually design a state that displays two ferromagnetic domains with opposite magnetization and equal hyperfine densities. Alternatively, another experimental and numerical route to achieve magnetic domains is through a magnetic field gradient [37].

III. RESULTS AND DISCUSSION

In our simulations we consider lattices having $\sim 30 \times 30$ occupied sites. As stated in Sec. II, the uncorrelated 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 δ and given values of the ratio between intra- and interspecies interactions $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$. We note 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. In the following, we identify the dimensionless time as $\tau = E_R t / \hbar$.

The time propagation of the double ferromagnetic domain takes place after introducing the disordered potential and properly adjusting the interaction coefficients due to the removal of half the population, $N \rightarrow N/2$. This pattern created at hand, that is, the two ferromagnetic domains, is our starting point to study the time evolution under the influence of static uncorrelated disorder. We should note here that such an initial state is nonstationary and, consequently, evolves under its own dynamics. Interestingly, the protocol planned mimics a quantum quench process since a closed system left in an eigenstate of a given Hamiltonian at $t = 0$ evolves dynamically under a different Hamiltonian. In Fig. 1 we show a schematic plot of the initial state. 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 for the one produced from the combination of a speckle pattern and the square lattice. To this end, in the subsections below we study both the magnetization as a function of time and the magnetization correlations in time and space.

A. Demagnetization vs disorder: Magnetization dynamics

The observables to be studied in this section are the magnetization m_L and m_R , in the left and right sides of the lattice, 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, the magnetizations in the left and right sides are as follows:

$$\begin{aligned} m_L &= \iint_{\Omega_L} dx dy m(x, y; t), \\ m_R &= \iint_{\Omega_R} dx dy m(x, y; t), \end{aligned} \quad (3)$$

where Ω_L and Ω_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 consider three different values of the ratio $g_{\uparrow\uparrow}/g_{\uparrow\downarrow}$. The time dynamics is followed for a period of time such that at zero disorder and a given value of the coupling interactions the magnetization in the left and right sides become null. That is, the decay 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 $\tau \rightarrow -\tau$ at any temporal step along the time dynamics allows us to recover the initial state.

Since the prepared initial state is nonstationary, the hyperfine spin populations will evolve under the influence of both disorder and interactions. Previous analyses of stationary properties in a single Bose-Einstein condensate component

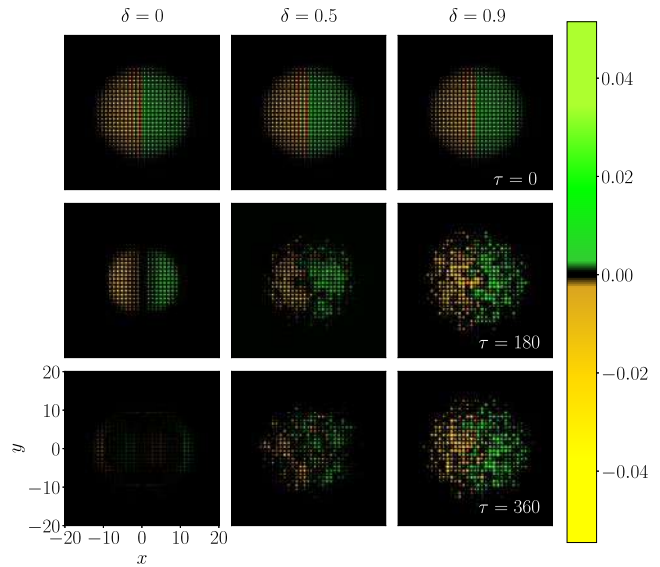


FIG. 2. Instantaneous density plots of the local magnetization $m(x, y, \tau)$ in the square lattice for three different values of the disorder amplitude. Distance along x and y axis is scaled in terms of the lattice constant a . Left, center and right columns correspond to three different values of disorder amplitude δ 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, $g_{\uparrow\downarrow} = 0.9g_{\uparrow\uparrow}$.

confined in disordered lattices have shown that, in the weakly interacting regime, the net effect of the disorder is to localize the condensate density in bounded regions [19,38–41]. As a matter of fact, the size of those bounded regions becomes 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 with a given realization of disorder $\epsilon_\delta(x, y)$ and a fixed value of the intra- and interspecies 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 that larger values of the disorder amplitude lead to a slowdown of the dynamics of the magnetic domains. That is, the initial state remains for larger times, thus showing a persistence of the magnetic domains during the time evolution. Figure 2 is representative of the magnetization behavior observed at different times as the disorder is increased for the ensemble of disorder realizations.

In Fig. 3 we summarize the results of the analysis of this section. Each plot in this figure corresponds to the average of the magnetization on the right (left panels) and left (right panels) sides of the lattice as a function of time for different values of the disorder amplitude δ . The specific values of δ

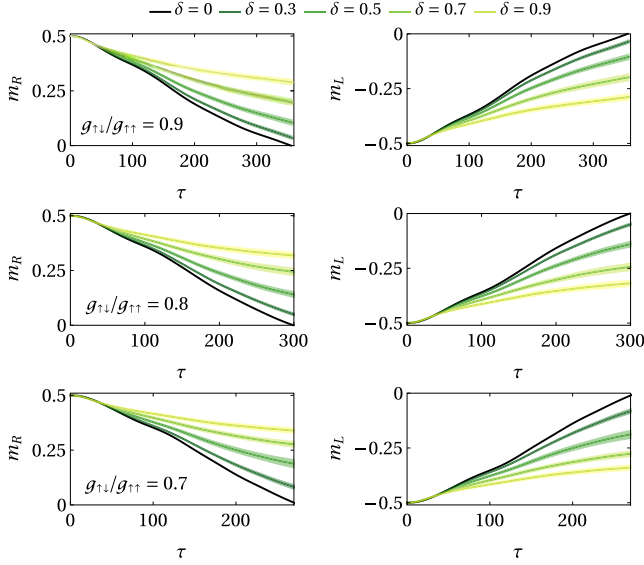


FIG. 3. Magnetization in right and left sides as a function of time for different values of disorder amplitude δ . The ratio of the intra- and interspecies interaction $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ is indicated in the left panels. Each point in these curves is the result of the average over 200 realizations of disorder for a given value of δ . The shadow area around each curve corresponds to the root-mean-square deviation.

as well as the intra- and interspecies interaction ratio $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ are indicated in the figures. The curves in each plot are the averages for a given value of δ , with the shadow area around each curve indicating its root-mean-square deviation. From these figures one can observe that for short times, $\tau \lesssim 50$, the general behavior of the decreasing magnetization takes very similar values, independently of the disorder strength. However, for longer times, $\tau \gtrsim 50$, each magnetization curve departs from each other, thus revealing the effects of the disordered medium. Furthermore, as the disorder amplitude is increased, the ferromagnetic order in each domain is preserved against depletion. In particular, for the largest value of the disorder amplitude considered, that is, $\delta = 0.9$, the value of the magnetization in the left and right sides remains unaltered around 50%. One can also notice two main outcomes associated with the value of the ratio $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$. One is that at zero disorder the time at which the magnetization is annihilated decreases as the ratio $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ is diminished. In contrast, as this ratio is increased, the reduction of the magnetization becomes progressively worse with respect to its initial value.

The time dependence of the left and right magnetizations are well described by the power-law ansatz $m_R(\tau) \propto b(\delta)\tau^{\gamma(\delta)}$. We fit the curves of Fig. 3 with such a power-law ansatz at intermediate-time scales, where one neglects the transient behavior at short times. We should notice that the coefficients γ and b also depend upon the ratio between $g_{\uparrow\downarrow}$ and $g_{\uparrow\uparrow}$. In Fig. 4 we plot the behavior of γ as a function of δ . From this figure one can notice how the value of the characteristic exponent γ is modified as the ratio $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ is varied. Here it is important to stress that γ is also influenced by the presence of the harmonic confinement. The value of this exponent is reduced as δ grows, and thus the magnetiza-

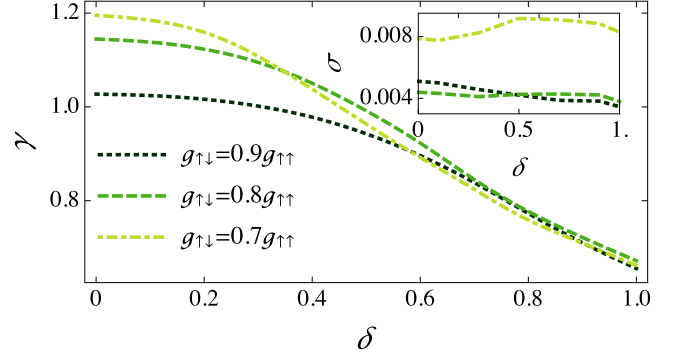


FIG. 4. Power-law fit $m_R(\tau) \propto b(\delta)\tau^{\gamma(\delta)}$ for the magnetization on the right side as a function of δ , for three different values of the ratio of the intra- and interspecies interaction coupling. The inset shows the error σ of the magnetization fit.

tion extinction becomes slower in time. It is quite remarkable that for strong disorder strengths δ , the parameters γ take very similar values, almost independent of the ratio of the inter- and intraspecies interaction coupling. This can indicate that the disorder has become the dominant contribution during the elapsed evolution. The inset in Fig. 4 shows the error of the magnetization fit.

B. Demagnetization vs disorder: Variance and magnetization correlator

Another suitable quantity that has been used in various experiments and provides crucial information on how magnetic domains change in space and time is the density-weighted magnetization correlator. As established in Refs. [20,21] this correlator is defined as

$$G(\Delta\vec{r}; t) = \frac{\int_{\Omega} m(\vec{r}; t)m(\vec{r} + \Delta\vec{r}; t)d\vec{r}}{\int_{\Omega} \rho(\vec{r}; t)\rho(\vec{r} + \Delta\vec{r}; t)d\vec{r}}, \quad (4)$$

where $m(\vec{r}; t)$ is the local magnetization defined in the previous section, $\rho(\vec{r}; t) = \rho_{\uparrow}(\vec{r}; t) + \rho_{\downarrow}(\vec{r}; t)$ is the total density, and $\Omega = \Omega_L + \Omega_R$. In Fig. 5 we illustrate the correlator $G(\Delta\vec{r} = 0; t)$ for several values of the disorder strength and a fixed interaction ratio of $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow} = 0.9$. We should notice

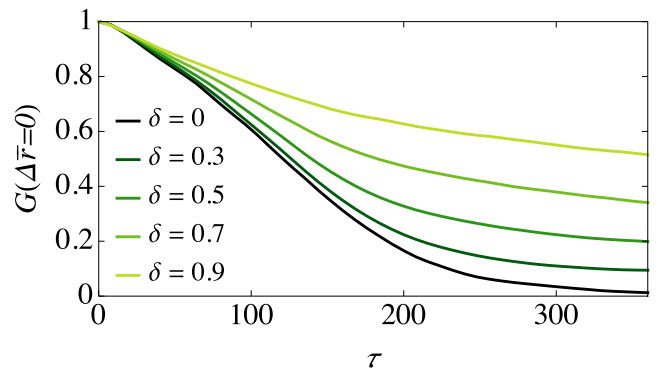


FIG. 5. Correlator $G(\Delta\vec{r} = 0; \tau)$, that is, variance as a function of time for different values of the disorder magnitude. Each curve is the average over 200 realizations of disorder δ .

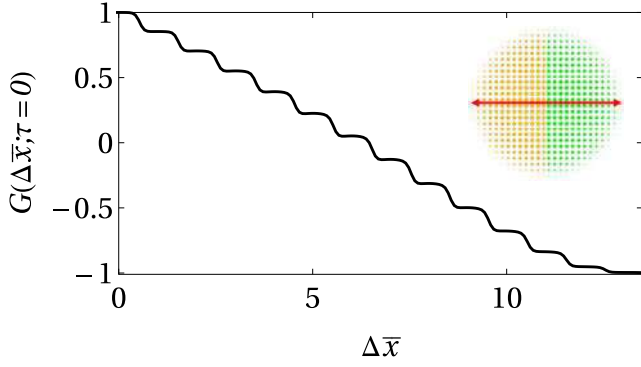


FIG. 6. Correlator $G(\Delta\bar{x}; \tau)$ at $\tau = 0$. The inset shows the density profile prepared as the initial state. The red line shows the axis along which we determine the correlator $G(\Delta\bar{x}; \tau)$.

that for $\Delta\vec{r} = 0$, the density-weighted correlator coincides with the magnetization variance. For $t = 0$, the magnetization variance takes its largest value $G(\Delta\vec{r} = 0; t = 0) = 1$ since the initial state corresponds to fully polarized domains. Then, for $t > 0$ the variance shows a decreasing behavior in time, which becomes less pronounced as the disorder amplitude increases. As a matter of fact, for the largest value of the disorder amplitude considered, which is $\delta = 0.9$ and at a time $\tau = 360$, the variance depletion is around half its initial value. In contrast, the magnetization variance becomes null at $\tau = 360$ for zero disorder strength. Thus, one can appreciate that the structural disorder stimulates a deceleration of the polarization of the magnetic domains.

Since at $t = 0$ down and up components lie on the left and right halves of a square lattice, a natural election of the path on which the spatial variations of the correlator $G(\Delta\vec{r}; t)$ can be tracked is a line that crosses perpendicular to the halves of magnetic domains and then $G(\Delta\vec{r}; t)$ becomes $G(\Delta\bar{x}; t)$. In Fig. 6 we illustrate both the axis in which the correlator is evaluated and its spatial variations for positive values of x . The staircase shape of the correlation function on Fig. 6 can be understood from the observation that the density at a given lattice site and in the region around it remains essentially constant.

To conclude the present analysis, in Fig. 7 we illustrate the spatial variations of the correlation function of Eq. (4) for $\tau = 180$ and $\tau = 360$. As can be appreciated from Fig. 7 (upper panel), a depletion of the magnetic order is observed, since this reduction is less pronounced as the disorder decreases. Interestingly, all the curves get close when the correlation approaches zero, thus indicating that the domains still preserve information of the initial state. In contrast, the long-term dynamics illustrated in Fig. 7 (lower panel) shows higher discrepancies for each value of the disorder amplitude. In agreement with the previous findings, for $\delta = 0$, the magnetic order is completely lost. For the cases $\delta = 0.3$ and $\delta = 0.5$, we observe residual domains that no longer conserve the initial structure. However, for $\delta = 0.7$ and $\delta = 0.9$, the initial magnetic structure stands, with the polarization of the magnetic domains being reduced.

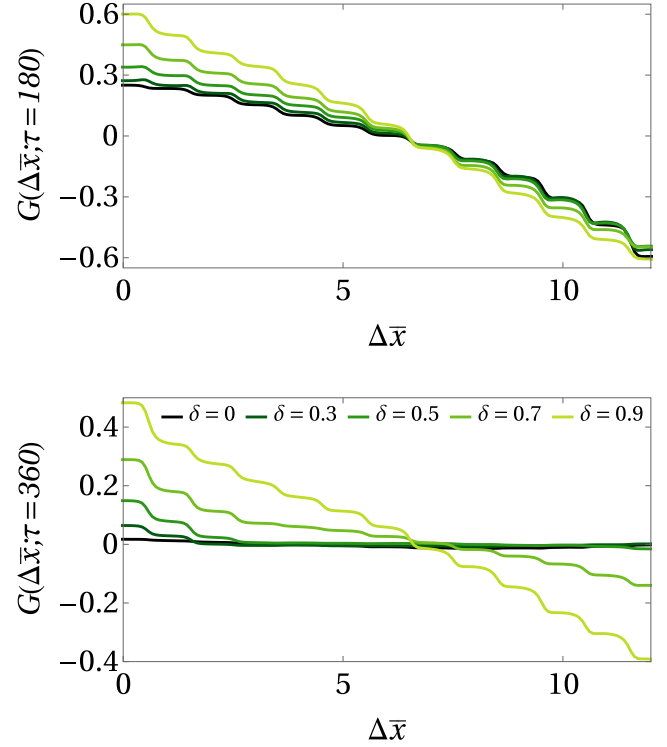


FIG. 7. Correlator $G(\Delta\bar{x}; \tau_i)$ along the x axis for different values of the disorder magnitude. The upper and lower panels correspond to $\tau = 180$ and $\tau = 360$, respectively. Each curve is the average over 200 realizations of disorder δ .

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 annihilation 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 ^{87}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 with 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 uncorrelated disorder having a given amplitude δ and constant values of the intra- and interspecies interactions $g_{\uparrow\downarrow}$ and $g_{\uparrow\uparrow}$, respectively. Regarding the magnitude of the intra- and interspecies interactions $g_{\uparrow\downarrow}$ and $g_{\uparrow\uparrow}$, we worked in the regime in which the ratio between these coefficients $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$

TABLE I. Physical parameters used in the numerical simulation.

Name	Symbol	Value
Particle number	N	600
^{87}Rb mass	m	87 amu
Lattice constant	a	532 nm
Trap frequency (x)	ω_x	$2\pi \times 50$ rad/s
Trap frequency (y)	ω_y	$2\pi \times 50$ rad/s
Trap frequency (z)	ω_z	$2\pi \times 4000$ rad/s
Bare s -wave scattering length	$a_{\uparrow\uparrow} = a_{\downarrow\downarrow}$	$100 a_0$
Potential depth	V_0	$4 E_R$

guarantees miscibility of hyperfine components, and we also considered appropriate coupling interaction strengths away from the strong interaction effects. Besides the study of the dynamics of the magnetization in the presence of disorder, we analyzed the variance and the density-weighted magnetization correlator to investigate time and spatial magnetization decay, respectively.

The conclusion from the study of the magnetization dynamics is that the degradation of the initial double ferromagnetic domain, which is the 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 intraparticle contact interactions $g_{\uparrow\downarrow}/g_{\uparrow\uparrow}$ tends to degrade the initial state. Furthermore, the analysis for the density-weighted correlator as a function of time and space reveals also such a persistence of the initial state as the disorder is increased. We reach these results from a robust study of the time evolution of the right and left magnetizations of the quantum system described above. Summarizing, our study allowed us to recognize that the slow extinction of the ferromagnetic order is induced by disorder and then enhancing memorylike effects in the coupled magnetic domains.

This paper sets a platform for the design of specific protocols appropriate to study demagnetization processes or frustration effects associated with geometry and energy disorder [42–45]. Also, our study aims for the investigation of the dynamics induced by measurement in the sense that sources of disorder can be either internal, like those here considered, or external, like those associated with reservoirs in contact with assessable quantum systems [46]. Textures or local magnetization, as referred to in the current literature, are suitable observables to track the effects of the disorder media in systems having more than one component and, also, are accessible physical quantities with single-spin-resolution techniques [47,48] used in current experimental setups. We expect that our work will trigger further theoretical analysis of, for instance, the long-range character proper of the dipole-dipole magnetic interactions and the homogeneous environ-

ment where the elemental constituents move. Those aspects still remain as open questions to be addressed. Understanding the dynamics of magnetic domains has become nowadays a relevant topic not only within the context of the fundamental physics but also associated with the emergence of technological uses. Practical applications of the investigation here presented are directly related to the design of magnetic logic and memory devices.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially funded by Grant No. IN108620 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.

APPENDIX : NUMERICAL CALCULATIONS DETAILS

In this Appendix we provide additional details related to the numerical simulations performed in order to obtain the main results of the paper. As stated in Sec. II, we first obtain the ground state of the coupled GP equation shown in Eq. (1). This was achieved by using the imaginary-time propagation based on the split-step Fourier method [33,34]. The relevant physical parameters used in the simulations are included in Table I.

After accomplishing convergence of the ground-state wave functions, we performed the removal of particles by manually setting $\Psi_{\uparrow} = 0$ in the left half of the system Ω_L . Analogously, we fixed $\Psi_{\downarrow} = 0$ within the right half Ω_R . For simplicity, we normalized the resulting wave functions after the removal of particles.

The above procedure yields the initial configuration of the wave functions from which the demagnetization process was followed. The real-time dynamics was performed by using the fourth-order Runge-Kutta method. The numerical parameters used in both, the imaginary-time propagation and the real-time propagation, are shown in Table II.

TABLE II. Parameters for the numerical simulation.

Name	Symbol	Value
Number of grid points in the x direction	N_x	512
Number of grid points in the y direction	N_y	512
Spatial extension of the numerical grid in the x direction	L_x	$40 a$
Spatial extension of the numerical grid in the y direction	L_y	$40 a$
Step size used in real-time evolution	$d\tau$	0.001

[1] F. J. Himpfel, J. E. Ortega, G. J. Mankey, and R. F. Willis, *Adv. Phys.* **47**, 511 (1998).

[2] Y. M. Kim, S. H. Han, H. J. Kim, D. Choi, K. H. Kim, and J. Kim, *J. Appl. Phys.* **91**, 8462 (2002).

[3] T. Thomson, in *Metallic Films for Electronic, Optical and Magnetic Applications: Structure, Processing and Properties*, edited by K. Barmak and K. Coffey (Woodhead, Cambridge, England, 2014), p. 454.

- [4] A. Thiaville, Y. Nakatani, J. Miltat, and N. Vernier, *J. Appl. Phys.* **95**, 7049 (2004).
- [5] K. J. A. Franke, B. Van de Wiele, Y. Shirahata, S. J. Hämäläinen, 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. Phys. 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, *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* **42**, 95 (2000).
- [14] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen, and U. Sen, *Adv. Phys.* **56**, 243 (2007).
- [15] C. Gross and I. Bloch, *Science* **357**, 995 (2017).
- [16] A. L. La Rooij, H. B. van Linden van den Heuvell, and R. J. C. 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] J. Guzman, G.-B. Jo, A. N. Wenz, K. W. Murch, C. K. Thomas, and D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. A* **84**, 063625 (2011).
- [21] C. V. Parker, L.-C. Ha, and C. Chin, *Nat. Phys.* **9**, 769 (2013).
- [22] P. Bouyer, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 062401 (2006).
- [23] A. Posazhennikova, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1111 (2006).
- [24] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Phys. Rev. A* **65**, 043614 (2002).
- [25] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. A* **77**, 013617 (2008).
- [26] W. Bao, D. Jaksch, and P. A. Markowich, *J. Comput. Phys.* **187**, 318 (2003).
- [27] C. Trallero-Giner, R. Cipelatti, and T. C. H. Liew, *Eur. Phys. J. D.* **67**, 143 (2013).
- [28] R. Zamora-Zamora R, G. A. Domínguez-Castro, C. Trallero-Giner, R. Paredes, and V. Romero-Rochín, *J. Phys. Commun.* **3**, 085003 (2019).
- [29] D. S. Petrov, M. Holzmann and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551 (2000).
- [30] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. Dalibard, *Nature (London)* **441**, 1118 (2006).
- [31] C.-L. Hung, X. Zhang, N. Gemelke, and C. Chin, *Nature (London)* **470**, 236 (2011).
- [32] S. B. Papp, J. M. Pino, and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 040402 (2008).
- [33] P. Muruganandam and S. K. Adhikari, *Comput. Phys. Commun.* **180**, 1888 (2009).
- [34] D. Vudragović, I. Vidanović, A. Balaž, P. Muruganandam, and S. K. Adhikari, *Comput. Phys. Commun.* **183**, 2021 (2012).
- [35] R. Dum and Y. Castin, *Eur. Phys. J. D* **7**, 399 (1999).
- [36] R. Zeng and Y. Zhang, *Comput. Phys. Commun.* **180**, 854 (2008).
- [37] D. M. Weld, P. Medley, H. Miyake, D. Hucul, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 245301 (2009).
- [38] S. Ray, M. Pandey, A. Ghosh, and S. Sinha, *New. J. Phys.* **18**, 013013 (2016).
- [39] 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).
- [40] S. K. Adhikari and L. Salasnich, *Phys. Rev. A* **80**, 023606 (2009).
- [41] M. Kobayashi, M. Tsubota, and T. Iida, *Physica B (Amsterdam, Neth.)* **329–333**, 210 (2003).
- [42] 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, K. Liu, G. T. Zimanyi, H. G. Katzgraber, O. Hellwig, E. E. Fullerton, P. Fischer, and J. B. Kortright, *Phys. Rev. B* **75**, 144406 (2007).
- [43] Y. W. Windsor, A. Gerber, and M. Karpovski, *Phys. Rev. B* **85**, 064409 (2012).
- [44] I. Korzhovska, H. Deng, L. Zhao, Z. Chen, M. Konczykowski, S. Zhao, S. Raoux, and L. Krusin-Elbaum, *npj Quantum Mater.* **5**, 39 (2020).
- [45] J. Reindl, H. Volker, N. P. Breznay, and M. Wuttig, *npj Quantum Mater.* **4**, 57 (2019).
- [46] H. M. Hurst and I. B. Spielman, *Phys. Rev. A* **99**, 053612 (2019).
- [47] C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauß, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr, *Nature (London)* **471**, 319 (2011).
- [48] M. Boll, T. A. Hilker, G. Salomon, A. Omran, J. Nespolo, L. Pollet, I. Bloch, and C. Gross, *Science* **353**, 1257 (2016).

PAPER • OPEN ACCESS

Unconventional Superfluidity in Ultracold Dipolar Gases

To cite this article: G A Domínguez-Castro and R Paredes 2020 *J. Phys.: Conf. Ser.* **1540** 012002

View the [article online](#) for updates and enhancements.



IOP ebooks™

Bringing together innovative digital publishing with leading authors from the global scientific community.

Start exploring the collection—download the first chapter of every title for free.

Unconventional Superfluidity in Ultracold Dipolar Gases

G A Domínguez-Castro and R Paredes

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364,
Mexico D. F. 01000, Mexico

E-mail: rosario@fisica.unam.mx

Abstract. In this manuscript, we discuss the emergence of p -wave superfluidity in a dipolar Fermi gas confined in a double layer array of parallel optical lattices in two dimensions. The dipole moments of the molecules placed at the sites of the optical lattices, separated a distance L and pointing in opposite directions produce an effective attractive interaction among them, except between those dipoles situated one on top of the other. Such interaction between dipoles is precisely the origin of the non-conventional superfluid state. We present the analysis for the ground state of the many-body system within the mean-field scheme. In particular, we study the stable regions, as a function of the system parameters, namely the effective interaction between dipoles and the filling factor n , for which the superfluid state can exist. Following the BKT scheme, we estimate the critical temperature of the superfluid state.

1. Introduction

Several laboratories around the world have gone beyond the realization of quantum degeneracy in ultracold neutral atoms in both bosonic and fermionic species, and, in recent times, macroscopic samples of dipolar gases with large electric dipolar moments in its electronic and vibrational ground states, have been produced. The main motivation behind these efforts is to simulate novel phases of matter such as supersolids and unconventional superfluids as p -wave or d -wave phases among others [1, 2, 3, 4]. In particular, ultracold molecular Fermi gases have attracted the attention of both, theoretical and experimental communities for several years since, because combined with its fermionic nature, the intrinsic long-range character of its dipolar interactions, as well as the possibility of confining such molecules in external potentials, these systems represent suitable candidates to emulate unconventional superfluids. The long-range nature of dipolar interactions gives rise to have contributions of all partial waves at low energies [5, 6, 7, 8], thus enhancing the possibility of generating BCS pairing of several types. As previously proposed in Refs. [9, 10], due to the repulsive core between dipoles situated in a bilayer array, the s -wave pairing is suppressed, however, the p -wave or higher partial wave superfluid phases arise in molecules with rotational moments $J = 0$ and $J = 1$.

With the purpose of studying p -wave superfluidity, in this manuscript we consider ultracold dipolar Fermi molecules placed in a bilayer array composed of optical lattices in 2D having square symmetry, such that, as schematically depicted in Figure 1, the dipole moments of molecules situated at the lattice sites are oriented in opposite directions. The strong tail-tail repulsion between molecules lying in on-site positions in layers A and B , that is one on top



of the other, inhibits s -wave pairing, while favoring the formation of Cooper pairs between molecules located at neighboring sites. Superfluidity of molecule pairing in such a model can arise as a consequence of the energy saving associated with a reduction of the electrostatic on-site repulsion. In closeness with this aspect of pair formation associated to electrostatic interactions, other systems exhibiting nonconventional superconductivity, and specifically p -wave phases, are the ruthenate compounds [11], which as a matter of fact still remain not understood. Particularly the microscopic process responsible for the superconductivity. The main analogy between this kind of superconductors and molecular superfluids here considered is that the frictionless transport of pairs traveling in 2D has the same origin; the strong electrostatic repulsion of fermions situated one on top of each other in different layers together with the long-range attractive interaction of fermions located in other site configurations. Thus, besides the physics of superfluidity that can be addressed, our model can also be used to access the physics of unconventional ruthenate superconductors.

This manuscript is organized as follows. In section 2 we describe our model and present the relevant parameters of our investigation. Then, by adopting the mean-field BCS scheme in section 3 we characterize the unconventional superfluidity. In section 4 we determine the superfluid density tensor with the purpose of establishing the BKT transition temperature, that is to delineate some conclusions regarding the current investigation with experimental systems. Finally, we present our conclusions in section 5.

2. Model

We consider polar Fermi molecules confined in two parallel optical lattices in 2D separated by a distance L . As schematically shown in Figure 1, the layers labeled with letters A and B are the energy landscape where the molecules are confined. The lattices have a square geometry with lattice constant a . The dipoles are oriented perpendicularly to the layers and in opposite directions in different layers. This configuration can be achieved by confined polar molecules with rotational moments $J = 0$ and $J = 1$ in layers A and B respectively [10]. Then, by applying an ac electric field, oriented perpendicularly to the lattices, gives rise to having effective dipole moments pointing in opposite directions [12]. In this scenario, the resulting interaction between the molecules in different layers is:

$$V_{dip}(r) = -d^2 \frac{(r^2 - 2L^2)}{(r^2 + L^2)^{5/2}}, \quad (1)$$

where $-d^2$ is the scalar product of the effective dipole moments in the layers, L and r are the inter-layer and intra-layer separations respectively [13]. Molecules are allowed to move through sites in a given layer, but not between different layers.

The aim of this manuscript is to study the emergence of p -wave superfluidity as a consequence of the attractive interaction between dipoles confined in different layers, situated in neighboring positions one respect to the other. From the expression for the interaction potential, equation (1), one can notice that for values of the interlayer separation satisfying the condition $\Lambda = L/a < 0.5$, the effective interaction for particles lying in layers A and B is attractive except for $r = 0$. In this manuscript, all the numerical calculations were performed with $\Lambda = 0.2$ while the dimensionless dipole-dipole interaction strength $\chi = m_{eff}d^2/a\hbar^2$, with $m_{eff} = \hbar^2/2ta^2$ the effective mass, and the filling factor n of the lattices were allowed to vary within reasonable experimental values.

3. p -wave superfluidity

Our starting point is the effective Hamiltonian that represents the dipolar Fermi system described in section 2. To set this model Hamiltonian we should take into account the prescriptions

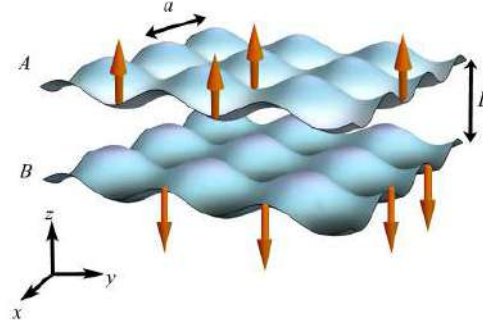


Figure 1. Schematic representation of the dipolar Fermi gas confined in a bilayer array of parallel optical lattices in two dimensions.

imposed by the two-body physics of particles interacting through the potential (1), lying in a bilayer lattice potential. Namely, the analysis of the microscopic precursors of both, BEC and BCS states that emerge in the lattice bilayer, associated with the attractive dipolar interaction. This study, previously addressed in ref. [14], analyzes the formation of bound molecules and scattered pairs of molecules as a function of the effective interaction strength parameter χ described above. With this information in mind, we are able to establish the many-body Hamiltonian that describes the fermionic system. It reads as follows,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j + h.c) + \sum_{i \neq j} V_{dip}(\mathbf{i} - \mathbf{j}) a_i^\dagger b_j^\dagger b_j a_i - \mu \sum_{\mathbf{i}} (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i), \quad (2)$$

where J is the nearest-neighbor tunneling strength, a_i (a_i^\dagger) and b_i (b_i^\dagger) are the operators that annihilate (create) Fermi molecules at site \mathbf{i} in layers A and B respectively, and μ is the chemical potential. Assuming pairing between \mathbf{k} and $-\mathbf{k}$ states, the mean-field Hamiltonian in momentum representation becomes

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}) + \Delta_{\mathbf{k}}^* b_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad (3)$$

here, $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + nV_{dip}(\mathbf{k} = 0)$ with $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ the kinetic energy dispersion of molecules in the 2D lattice, and $\Delta_{\mathbf{k}}$ is the superfluid order parameter that must be self-consistently determined,

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} V_{dip}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle b_{-\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} \rangle. \quad (4)$$

The Hamiltonian in equation (3) can be diagonalized by means of a Bogoliubov transformation which leads to the coupled equations for the energy gap $\Delta_{\mathbf{k}}$ and the filling factors n_A and n_B . We should point here that since the system under study is a balanced mixture of particles in layers A and B , we have $n = n_A = n_B$. Thus, instead of having equations for n_A , n_B , and the energy gap $\Delta_{\mathbf{k}}$, the coupled mean field equations are just for $\Delta_{\mathbf{k}}$ and n ,

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} V_{dip}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right), \quad (5)$$

$$n = n_A = n_B = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right) \right], \quad (6)$$

where the quasiparticle excitation energy is $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ and $\beta = 1/(k_B T)$, with k_B the Boltzmann constant. In our calculations, we numerically solve self-consistently the gap equation 5 and the number equation 6 as a function of the effective dipole-dipole interaction χ and the filling factor n in a lattice with $\Omega = 121 \times 121$ sites.

3.1. $p_x + ip_y$ pairing

At zero temperature, we find a solution for the energy gap $\Delta_{\mathbf{k}}$ that exhibits an antisymmetric behavior, thus resembling the pure $l = 1$ angular momentum form for the energy gap, that is, $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \sin k_x a + i \sin k_y a$. For illustration purposes in Figure 2 we show the obtained gap parameter for a coupling strength $\chi = 0.4$ and a filling factor of $n = 0.16$. Solid and dashed lines correspond respectively to the real and imaginary parts of $\Delta_{\mathbf{k}}$ plotted as a function of $k_x a$ and $k_y a$. In the upper figure we consider $k_y a = 0$, while in the lower figure it is plotted $\Delta_{\mathbf{k}}$ as a function of $k_y a$ for $k_x a = 0$.

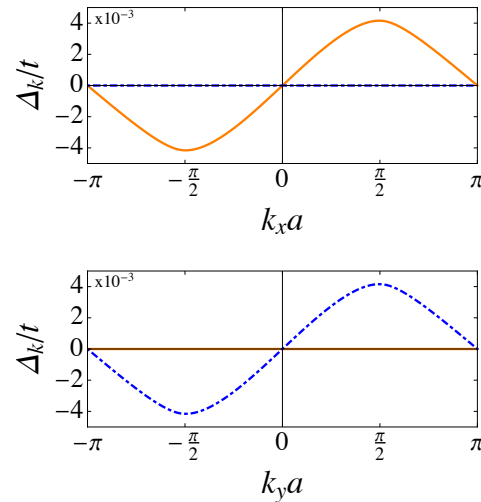


Figure 2. Gap parameter $\Delta_{\mathbf{k}}$ as a function of \mathbf{k} for a filling factor $n = 0.16$, an interaction strength $\chi = 0.4$ and a temperature $T = 0$. Upper and lower panels correspond to $k_y a = 0$ and $k_x a = 0$ respectively.

Also, in order to exhibit the full dependency of the gap parameter $\Delta_{\mathbf{k}}$ as a function of the \mathbf{k} values in the first Brillouin zone, in Figure 3 we show a density plot of $\Delta_{\mathbf{k}}$ as a function of $k_x a$ and $k_y a$. As can be appreciated from these figures, our model supports a solution characterized by a gap with $p_x + ip_y$ symmetry. As found by [15] the $p_x + ip_y$ solution is the appropriate candidate for the most stable p -wave pairing, in contrast to the p_z symmetry. Moreover, the $p_x + ip_y$ pairing breaks the time-reversal symmetry and can be classified as a class D topological superfluid [16, 17].

A conclusion that we reach directly from our calculations is that the p -wave superfluid becomes unstable towards phase separation when the interaction strength or the filling factor is large enough. To illustrate this behavior in Figure 4 we plot the chemical potential μ as a function of the filling factor n for an interaction strength $\chi = 0.4$ at zero temperature. As one can notice from the curve μ/t vs n , there is a region in which the chemical potential is a monotonically decreasing function of the filling factor. Such a behavior exhibits an inconsistency with the second law of thermodynamics since in that region the compressibility $\kappa = 1/n^2(\partial n/\partial \mu)$ is negative, thus indicating that the $p_x + ip_y$ superfluid state is dynamically unstable. Precisely,

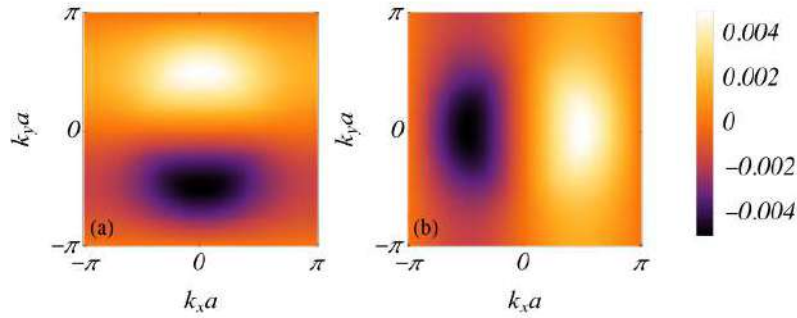


Figure 3. Gap parameter $\Delta_{\mathbf{k}}$ as a function of \mathbf{k} for a filling factor $n = 0.16$, an interaction strength $\chi = 0.4$, and a temperature $T = 0$. (a) real part of $\Delta_{\mathbf{k}}$ (b) imaginary part of $\Delta_{\mathbf{k}}$.

the arrows in Figure 4 indicate the range of values of n for which the system is unstable. The phase separation region can be recognized from the Maxwell construction of equal areas, which, due to the particle-hole symmetry, give rise to have phase separation regions symmetric with respect to the half-filling point. In particular, the construction simplifies to determine the filling factor n_1 , which satisfies the following conditions, $\mu(n_1) = \mu(n = 0.5) = \mu(1 - n_1)$. The orange shaded region in Figure 4 indicates the Maxwell construction of equal areas. Solid black lines separate stable and metastable SF phases, that is, within the region labeled PS -phase separation- the system becomes a mixture of SF phases at different densities.

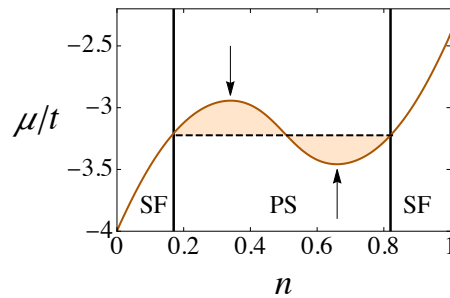


Figure 4. Dimensionless chemical potential as a function of the filling fraction n at zero temperature. Vertical black lines separate stable from metastable p -wave superfluid phases. Arrows indicate the values of the filling fractions associated to unstable superfluids (area inside the arrows).

3.2. Phase diagram

In Figure 5 we summarize the full information obtained in our calculations. In particular, in a $T = 0$ phase diagram, we show the couples of the effective coupling interaction χ , and the filling factor n , for which a stable superfluid p -wave phase can exist. Also, the values of χ and n associated with superfluid phases composed by a mixture of superfluids at different densities are recognized. In this figure, the stable superfluid phases and those with two definite densities are plotted in blue and beige colors respectively. At a critical interaction of $\chi \approx 0.494$, the phase separation takes place between $n = 0$ and $n = 1$. When the interaction is above this critical value the system becomes a mixture of $n = 0$ and $n = 1$ densities, and no superfluid phases

occur since the stable states are the zero particle or zero hole densities which are insulating states. On the other hand, when the interaction strength is below the critical value the phase separation region shrinks giving rise to bigger stable superfluid regions.

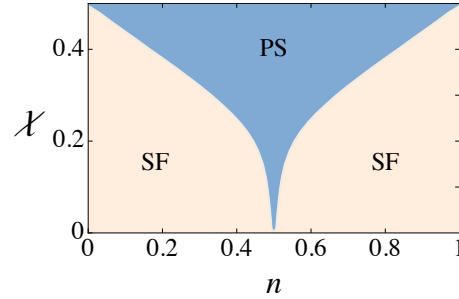


Figure 5. Phase diagram of the p -wave superfluid phases at zero temperature in terms of the dimensionless interaction coupling parameter χ and the filling factor n . Beige shaded regions identify stable superfluid phases, while blue surface indicates the values of χ and n for which the system becomes phase separated and thus a coexistence of superfluids at two densities.

4. Critical Temperature of the $p_x + ip_y$ superfluid phase

Since the system under study is a quantum fluid confined in the 2D space, the emergence of the p -wave superfluid transition necessarily is of BKT type, that is, the interacting gas become a superfluid via the BKT mechanism [18, 19, 20]. As well established, 2D systems with continuous order parameter indeed exhibit a transition, which is typically captured by the behavior of the density-density correlation function that shows an algebraic dependence instead of the classical exponential decaying associated to systems with no phase transition [18, 19, 20]. As we expose at the end of this section, once that a proper analysis for the superfluid in terms of χ and n is done, we will be able of calculating the value of the critical temperature at which the dipolar Fermi system becomes a BKT superfluid. To determine such a superfluid density, we proceed as delineated in Ref. [21], by performing a gauge transformation on the operators that create and annihilate particles at the lattice sites in both layers,

$$(a_{\mathbf{i}}^{\dagger}, a_{\mathbf{i}}) \rightarrow (a_{\mathbf{i}}^{\dagger} e^{i\Theta \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{i}}}, a_{\mathbf{i}} e^{-i\Theta \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{i}}})$$

$$(b_{\mathbf{i}}^{\dagger}, b_{\mathbf{i}}) \rightarrow (b_{\mathbf{i}}^{\dagger} e^{i\Theta \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{i}}}, b_{\mathbf{i}} e^{-i\Theta \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{i}}}),$$

being $\Theta = (\Theta_x/(aN_x), \Theta_y/(aN_y))$. Through this procedure, the system becomes composed of a mixture of both, the normal and the superfluid components. Then, the superfluid density can be determined by first constructing the free energy of the system and then, taking the difference between the normal and superfluid free energies as dictated by the following equations,

$$\rho_{\alpha, \alpha'} = \lim_{\Theta \rightarrow 0} \frac{1}{\Omega t} \frac{F_{\Theta} - F_0}{\Theta_{\alpha} \Theta_{\alpha'}} = \frac{1}{\Omega t} \frac{\partial^2 F_{\Theta}}{\partial \Theta_{\alpha} \partial \Theta_{\alpha'}}, \quad \alpha = \{x, y\}. \quad (7)$$

The explicit expression for the full free energy F_{Θ} is obtained by expanding it up to second order for the order parameter Δ , and thus incorporating the phase as $\Delta_{\mathbf{i}} = \Delta_0 e^{i\Theta \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{i}}}$, being Θ

a vector with components Θ_x and Θ_y written above. The final expression for the superfluid density tensor is given as follows,

$$\rho_{\alpha,\alpha'} = \frac{1}{a\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \left(n(\mathbf{k}) \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\alpha'}} - Y(\mathbf{k}) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_{\alpha}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_{\alpha'}} \right), \quad (8)$$

where $n(\mathbf{k})$ is the Fermi momentum distribution and $Y(\mathbf{k})$ is the Yoshida distribution defined as $Y = \beta \text{sech}(\beta E_{\mathbf{k}}/2)/4$. Since the off-diagonal matrix elements of the superfluid tensor are small, the superfluid density can be approximated as $\rho \approx (\rho_{xx} + \rho_{yy})/2$. In order to determine the critical temperature of the superfluid, one has to impose the BKT condition [21, 22, 23]:

$$T_{BKT} = \frac{\pi}{8k_B} \rho(T_{BKT}). \quad (9)$$

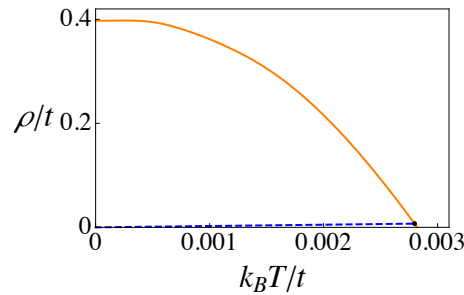


Figure 6. Orange solid line is the superfluid density as a function of temperature obtained from BCS mean-field description. The intersection of the blue dashed line and orange curve corresponds to the critical temperature at which BKT transition occurs for an effective dipole-dipole interaction strength $\chi = 0.4$ and a filling factor $n = 0.16$

In Figure 6 the orange solid line represents the superfluid density as a function of the temperature, obtained from the BCS mean-field scheme. The blue dashed line corresponds to the BKT treatment that behaves linearly with the temperature. We find that the intersection between both curves takes place at $k_B T_{BKT} = 0.0028t$. For dipolar Fermi molecules of NaK [2] confined in an optical lattice having a wavelength of $\lambda = 1064$ nm and a lattice depth of $V_0 = 5E_r$ [24], the predicted critical transition temperature is $T_{BKT} \approx 0.6$ nK. Certainly, such a temperature is up to now not reachable in current experiments with dipolar samples. However, one way in which such a low temperature can be raised is by increasing the interaction strength. This can be accomplished by externally tuning the electric field up to a certain value at which the dipole moment saturates [25]. In Figure 7 we plot the critical temperature as a function of the dimensionless interaction strength χ for both, the BCS scheme and the BKT formalism. Using the above experimental parameters, the predicted critical BKT temperature is $T_{BKT} \approx 10$ nK. Another alternative to achieve higher temperatures is by means of the use of subwavelength lattices [26, 27, 28], where smaller separation of the layers can be achieved. Considering $L \approx 50$ nm, the critical temperature for a Fermi gas of NaLi molecules, under the same condition $V_0 = 5E_r$ is about $T_{BKT} \approx 4$ nK.

5. Conclusions

In this manuscript, we have studied the emergence of unconventional p -wave pairing in a system of dipolar Fermi molecules confined in two parallel optical lattices in 2D. In particular, we

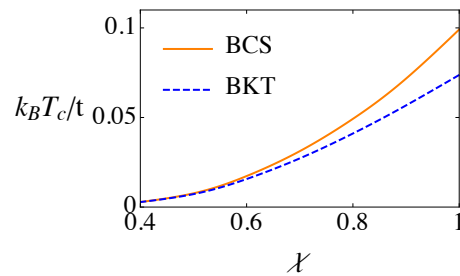


Figure 7. Curves for the BCS and BKT critical temperatures as a function of the interaction parameter χ , considering a filling factor of $n = 0.16$.

proposed a model in which the attractive long-range interactions between the dipoles situated in each layer, was guaranteed by imposing a proper constant distance between the layers. The expensive energy cost of having one molecule on top of the other in each lattice, namely molecules placed at the same lattice in different lattices, gives rise to have forbidden s -wave interactions. In contrast, the energy saving associated with interactions between dipoles situated in neighboring sites is precisely the individual mechanism responsible for the $p_x + ip_y$ superfluid phases exhibited in our model. Based on previous calculations for the scattered and bound states molecules presented in Ref. [14], in terms of the effective interaction strength parameter χ , in this report we determine the presence of p -wave pairing. Specifically, by analyzing the many-body physics through the BCS mean-field scheme, we determine the parameters for which the model shows superfluid states. We summarized the whole results of our calculations in a phase diagram in terms of the effective interaction χ and the filling factor n . Further, we recognize the superfluid density, by performing a gauge transformation of the original creation and annihilation fermionic operators in layers A and B , $(a_i^\dagger, b_i^\dagger; a_i, b_i)$, after considering a second order expansion for the free energy in terms of the order parameter Δ . This procedure allowed us to establish the link between the BCS prediction with the correct one for systems exhibiting phase transitions in 2D, that is BKT transitions. Considering the recent experimental realization of dipolar ultracold Fermi molecules of NaK we found that our calculations predicts that the transition takes place at $T_{BKT} = 0.6$ nK for $\chi = 0.4$ while $T_{BKT} = 10$ nK for $\chi = 1.0$. Moreover, by using the recently proposed subwavelength lattice technique we obtained temperatures around 4 nK for $\chi = 0.4$. In contrast with other previous p -wave proposals, the model here discussed represents a natural candidate to simulate the physics behind the ruthenates, since it contains the strong on-site repulsion, which is a crucial ingredient in unconventional superconductors. In addition, our model share the peculiarity of being composed of layered structures which are present in ruthenate compounds and unconventional superconductors.

References

- [1] Baranov M A 2008 *Physics Reports* **464** 71
- [2] Park J W, Will S, and Zwierlein M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 205302
- [3] Chomaz L, Petter D, Ilzhöfer P, Natale G, Trautmann A, Politi C, Durastante G, van Bijnen R M W, Patscheider A, Sohmen M, Mark M J, and Ferlaino F 2019 *Phys. Rev. X* **9** 021012
- [4] Zhang Y-C, Maucher F, and Pohl T 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 015301
- [5] Levinsen J, Cooper N R, and Shlyapnikov G V 2011 *Phys. Rev. A* **84** 013603
- [6] Baranov M A, Dalmonte M, Pupillo G, and Zoller P 2012 *Chemical Reviews* **112** 9
- [7] Li Y and Wu C 2012 *Sci. Rep.* **2** 392
- [8] Boudjemâa A 2017 *Phys. Lett. A* **381** 1745
- [9] Fedorov A K, Matveenko S I, Yudson V I, and Shlyapnikov G V 2017 *Phys. Rev. A* **95** 043615

- [10] Fedorov A K, Matveenko S I, Yudson V I, and Shlyapnikov G V 2016 *Sci. Rep.* **6** 27448
- [11] Eremin I, Manske D, Ovchinnikov S G, and Annett J F 2004 *Annalen der Physik* **13** 149
- [12] Micheli A, Pupillo G, Büchler H P, and Zoller P 2007 *Phys. Rev. A* **76** 043604
- [13] Wall M L and Carr L D 2009 *New Journal of Physics* **11** 055027
- [14] Domínguez-Castro G A and Paredes R 2019 *Annalen der Physik* **531** 1800316
- [15] Anderson P W and Morel P 1961 *Phys. Rev.* **123** 1911
- [16] Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A, and Ludwig A W W 2008 *Phys. Rev. B* **78** 195125
- [17] Kitaev A 2009 *AIP Conf. Proc.* **1134** 22
- [18] Berezinskii V L 1972 *Sov. Phys. JETP* **34** 610
- [19] Kosterlitz J M and Thouless D J 1973 *J. Phys. C* **6** 1181
- [20] Kosterlitz J M 1974 *J. Phys. C* **7** 1046
- [21] Camacho-Guardian A and Paredes R 2016 *Annalen der Physik* **528** 778
- [22] Altland A and Simons B 2006 *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press), p243-300
- [23] Sá de Melo C A R, Randeria M, and Engelbrecht J R 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3202
- [24] Bloch I, Dalibard J, and Zwerger W 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 885
- [25] Julienne P S, Hanna T M, and Idziaszek Z 2011 *Chem. Chem. Phys.* **13** 19114
- [26] Yi W, Daley A J, Pupillo G, and Zoller P 2008 *New Journal of Physics* **10** 073015
- [27] Nascimbene S, Goldman N, Cooper N R, and Dalibard J 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 140401
- [28] Gullans M, Tiecke T G, Chang D E, Feist J, Thompson J D, Cirac J I, Zoller P and Lukin M D 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 235309

Enhanced transport of two interacting quantum walkers in a one-dimensional quasicrystal with power-law hopping

G. A. Domínguez-Castro and R. Paredes*

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México City 01000, Mexico

(Received 19 July 2021; accepted 17 August 2021; published 7 September 2021)

We report a robust delocalization transition of a pair of hard-core bosons moving in a one-dimensional quasicrystal with power-law hopping. We find that in the regime of strong interactions quasiperiodicity first suppresses the transport, as in the usual Anderson picture, and then, transport is enhanced when the quasiperiodic modulation is increased. By introducing an effective Hamiltonian, valid for strong interactions, we unveil the mechanism behind the delocalization transition. Stationary single-particle properties, as well as two-particle correlations, confirm all of our findings. Extensive numerical calculations lead us to establish the values of quasiperiodic modulation, interparticle interactions, and power hops for which the delocalization takes place. Our results are of direct relevance to current experiments of systems with long-range interactions.

DOI: [10.1103/PhysRevA.104.033306](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.033306)

I. INTRODUCTION

Quantum walks, the quantum counterpart of classical random walks [1], represent optimal platforms for performing efficient quantum algorithms [2,3], exploring topological phases [4], modeling certain photosynthesis processes [5,6], and probing nontrivial dynamics in clean and disordered media in the presence or absence of interactions [7–13]. The wide range of applications that quantum walkers yield has driven its experimental realization in several platforms such as trapped ions [14,15], photons in linear and nonlinear waveguides [16–18], and ultracold atomic gases confined in one-dimensional optical lattices [19–21]. As a matter of fact, due to the high tunability and control that these systems offer, a comprehensive study of a single or many quantum walkers is achievable within the current experimental context.

The dynamics of quantum walkers in disordered media has been widely used for investigating the transport properties of systems belonging to condensed matter [8–10,12,22–24]. As revealed by those studies, the spreading of particles is altered since the disorder breaks the translational symmetry in an otherwise perfectly periodic lattice. For instance, in the one-dimensional Anderson model [25,26], any disorder strength yields the exponential localization of the single-particle eigenstates and consequently the absence of particle diffusion. Another widely used model arises in a one-dimensional quasiperiodic lattice, often called the Aubry-André (AA) model [27–29] (or more precisely, the Aubry-André-Azbel-Harper model), where the quasiperiodicity emerges as a consequence of superimposing two lattices with incommensurate periods [30]. To avoid confusion with the uncorrelated or random disorder, we use interchangeably quasidisorder to indicate the quasiperiodicity introduced in the AA model. In the AA model there is a threshold in the quasidisorder

strength that signals the transition between extended ergodic and localized single-particle eigenstates; therefore, the single-particle diffusion changes from being ballistic, where the spread of the walker grows linearly in time, to becoming null, where the particle is constrained to its initial position [30]. Both the Anderson and the AA models are characterized by being tight-binding schemes where the tunneling beyond nearest neighbors (NN) is exponentially suppressed. This constraint, together with the spatial disorder, reduces the diffusion of the walkers to the two extreme cases: ballistic and null regimes. To enrich the dynamics exhibited by the walkers, one can replace the nearest-neighbor tunneling with a hopping whose amplitude follows a power law. This modification is of particular interest since power-law interactions arise in many important systems, such as trapped ions [14,15], polar molecules [31,32], Rydberg atoms [33,34], nuclear spins in solid-state systems [35], photosynthetic complexes [36,37], and atoms in photonic crystal waveguides [38]. Previous studies of the resulting eigenstates in the AA model have shown that the inclusion of power-law hopping induces the appearance of energy-dependent mobility edges [39,40] and multifractal states [40]. Another relevant result, within the single-particle scheme, is a recent analysis that considers all-to-all hopping and random disorder [41]. Reference [42] revealed a disorder-enhanced transport regime in a one-dimensional nanostructure. For the two-body case, the literature has focused on the NN tunneling [43,44].

The purpose of the present paper is precisely the study of the interplay among quasidisorder, interparticle interactions, and power-law hopping, on the spreading of two hard-core bosons initially localized in the middle of a one-dimensional lattice. In particular, we demonstrate that within the strongly interacting regime, a delocalization transition arises as the quasiperiodic modulation increases. This is in stark contrast to the general knowledge that quasidisorder always results in transport suppression. To explain this unusual behavior, we introduce an effective Hamiltonian that describes the motion

*rosario@fisica.unam.mx

of the walkers as a bound particle whose dynamics is shielded from the power-law hopping. The transport of the composite object is suppressed until the quasidisorder is large enough to close the energy gap between the bound and unbound states. Closing the energy gap allows the walkers to dissociate and delocalize, since unbound states are less prone to show strong localization. Our results are of relevance in correlated two-particle studies [45,46], quantum state transfer protocols of long-range spin systems [47], and quasiparticle propagation experiments in trapped ions [48,49], among other examples. Definitely, two-body transport studies can shed light on more complex phenomena such as the many-body localization of interacting long-range systems [50–53]. In contrast to previous studies of quantum walkers moving in a disordered medium [8–10,12], we demonstrate that the quasidisorder can enhance the transport of the walkers. Additionally, we provide a theoretical model that supports our findings.

The manuscript is organized as follows. In Sec. II we introduce and briefly discuss the model considered to follow the dynamics of the pair of hard-core bosons. Afterwards, in Sec. III, we exhibit the delocalization transition and introduce an effective Hamiltonian that describes the motion of the walkers within the strongly interacting regime. In Sec. IV, we employ the survival probability to characterize the delocalization transition. Finally, in Sec. V, we summarize and conclude the manuscript.

II. MODEL

The Hamiltonian that describes two interacting hard-core bosons moving in a one-dimensional quasicrystal with inter-site couplings decaying as a power law is given by

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{|i-j|^\alpha} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi\beta i + \phi) \hat{n}_i + U \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}, \quad (1)$$

where \hat{b}_i (\hat{b}_i^\dagger) is the bosonic annihilation (creation) operator at site i , $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ is the corresponding particle number operator, J is the tunneling amplitude between nearest neighbors, and U is the nearest-neighbor interaction amplitude. Quasiperiodicity in the lattice is introduced through the second term in Eq. (1), in which the parameter Δ modulates the strength, $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ is the incommensurable parameter, and $\phi \in [0, 2\pi)$ accounts for a random phase. The hard-core constraint $(\hat{b}_i^\dagger)^2 = 0$ implies that no double occupancy is allowed. However, the operators \hat{b}_i and \hat{b}_j^\dagger satisfy the usual bosonic commutation relations when $i \neq j$. Here we should point out that the double-occupancy restriction emerges naturally in systems where only one excitation per site is allowed, for instance, Rydberg states in neutral atoms, rotational states in polar molecules, and hyperfine states in trapped ions. Periodic boundary conditions $\hat{n}_{L+1} = \hat{n}_1$, with L being the number of sites in the lattice, shall be considered to numerically solve the model.

Since the aim of this paper is to focus on the two-particle dynamics, we provide in the next lines a succinct collection of statements associated with the interacting and noninteracting

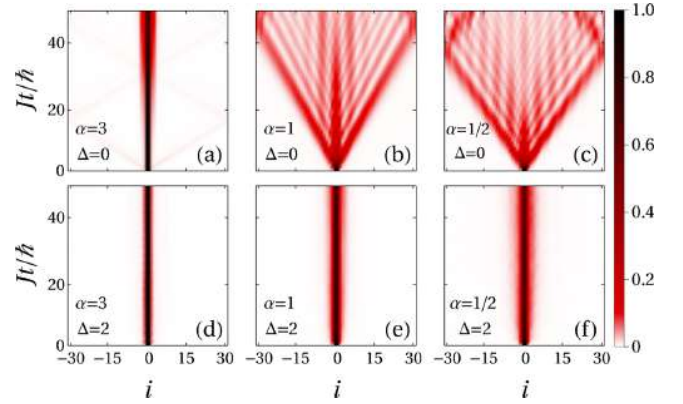


FIG. 1. Time evolution of the density distribution $n_i(t)$ of two walkers initially occupying adjacent sites on the center of the lattice. Quasidisorder and power-law hops are indicated in each panel. The interparticle interaction for all panels is $U/J = 8$.

cases of the Hamiltonian in Eq. (1). While for short-range hopping, $\alpha \gg 1$ and $U/J = 0$, the well-known AA model [27–29] is recovered, for arbitrary values of α the Hamiltonian in Eq. (1) is better known as the generalized-Aubry-André (GAA) model [40]. The AA model exhibits extended ergodic single-particle states for $\Delta/J < 2$, multifractal states for $\Delta/J = 2$, and localized states for $\Delta/J > 2$. Meanwhile, the GAA model displays a plethora of mobility edges that splits extended and localized states for $\alpha \gtrsim 1$ and multifractal single-particle states for long-range hops of $\alpha < 1$ [40]. For the two-body case with NN hopping, it has been shown that the interaction enhances the formation of localized pairs [43]. The effects of including power-law tunneling are not yet explored and it is the aim of this paper to address them.

III. PAIR BREAKING AS A MECHANISM OF DELOCALIZATION

To unveil the effects of interparticle interactions, quasidisorder, and power-law hopping on the two-body transport properties, we consider the quantum walk of a pair of interacting hard-core bosons initially localized at adjacent lattice sites in the middle of a chain having $L = 62$ sites. The time evolution of the initial state $|\psi(t=0)\rangle = \hat{b}_{L/2+1}^\dagger \hat{b}_{L/2}^\dagger |0\rangle$ is calculated by using the eigenstates $|\phi_m\rangle$ and their corresponding eigenenergies E_m obtained from the exact diagonalization of the Hamiltonian in Eq. (1), that is,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m C_m e^{-iE_m t/\hbar} |\phi_m\rangle, \quad (2)$$

where $C_m = \langle \phi_m | \psi(0) \rangle$. To illustrate the most distinctive findings in the two-particle spreading, we chose a set of parameters $(U/J, \Delta/J)$ and three different values of α ($\alpha = 3, 1, \text{ and } 1/2$) for which peculiar transport effects emerge. All the calculations for finite quasidisorder were obtained from the average of 400 random uniformly distributed phases $\phi \in [0, 2\pi)$. In Fig. 1 we show the time evolution of the single-particle density $n_i(t) = \langle \psi(t) | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i | \psi(t) \rangle$ for both null and finite quasidisorder strength when $U/J = 8$. A striking result shown in Figs. 1(a)–(c) is the clearly visible conelike

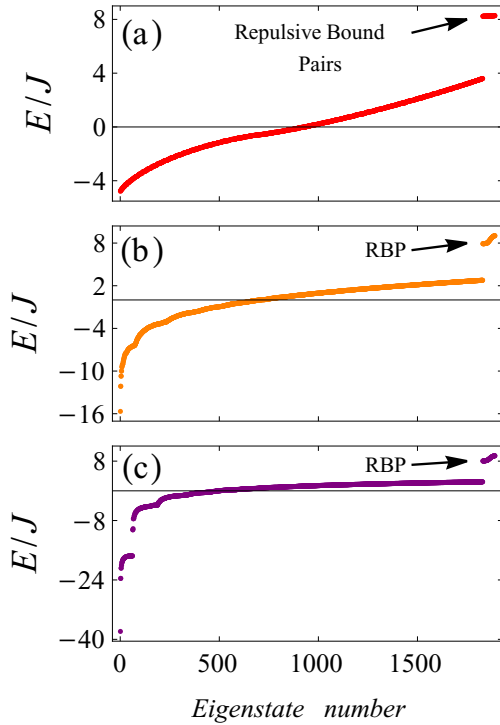


FIG. 2. Energy spectrum of the Hamiltonian in Eq. (1) for $\Delta/J = 0$ and $U/J = 8$. Panels (a), (b), and (c) correspond to power-law hopping values of $\alpha = 3$, 1, and $1/2$, respectively.

propagation front that appears even in the case of $\alpha = 1/2$. This is a very interesting result that deserves attention, because while such a definite cone emerges in the single quantum walker case for short-range hops [20], in contrast, long-range hops ($\alpha < 1$) do not lead to a sharp cone [54,55]. As we shall see, this behavior must be attributed to both interactions and power-law hopping.

For repulsive interactions ($U/J > 0$), the particles can bind together into a composite object called a repulsive bound pair (RBP), or also termed a bound nearest-neighbor dimer [56–59]. The energy of the repulsive bound pairs is located above the energy of the unbound states [59,60]. As can be seen from Fig. 2, the energy spectrum of the Hamiltonian in Eq. (1) for $\Delta/J = 0$, $U/J = 8$, and $\alpha = 3$, 1, and $1/2$, has an energy gap that separates unbound and bound states. The black arrow in each panel indicates the location of the high-energy states, that is, the repulsive bound pair states. Given the fact that the energy gap is large enough, the dimer is dynamically stable and therefore unable of dissociating by converting the interaction energy into kinetic energy.

The RBP has the peculiarity of moving around the lattice with both particles in adjacent sites; that is, the walkers propagate as a pair. Consequently, the most relevant Fock states participating in the dynamics of the walkers are those where the particles are in adjacent sites, namely, those Fock states that belong to the subspace $\mathcal{H}_U = \{|n_1 \cdots n_L\rangle \in \mathcal{H} : n_i = n_{i+1} = 1 \forall i \in [1, L]\}$, with \mathcal{H} being the Hilbert space of all Fock states with two hard-core bosons on a lattice with L sites. As a matter of fact, one can quantify the relevance of the states belonging to \mathcal{H}_U on the dynamics of the walkers by

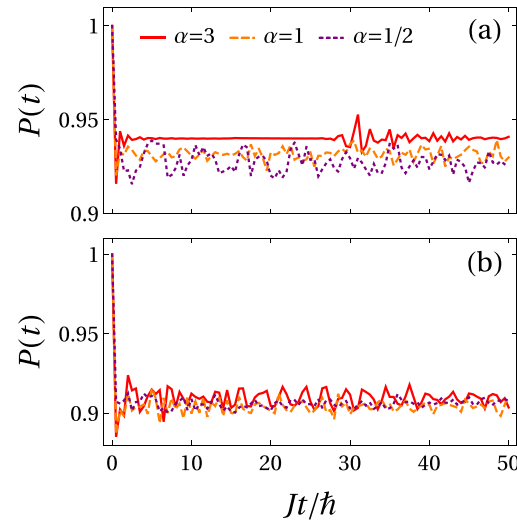


FIG. 3. Time evolution of the expectation value of the projector operator $\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$. Panel (a) corresponds to $\Delta/J = 0$ and $U/J = 8$, whereas panel (b) considers $\Delta/J = 2$ and $U/J = 8$. The values of α are indicated in different colors and line patterns.

considering a projector operator \hat{P} acting on the states of \mathcal{H}_U . The projector operator \hat{P} is defined as follows:

$$\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}. \quad (3)$$

In Fig. 3 we show the expectation value of the operator \hat{P} , $P(t) = \langle \psi(t) | \hat{P} | \psi(t) \rangle$, as a function of time. Figures 3(a) and 3(b) correspond to quasidisorder strength $\Delta/J = 0$ and 2, respectively, both panels are for $U/J = 8$, and the values of α are indicated in colors. Since $P(t)$ takes values close to unity, it is reasonable to state that the dynamics of the walkers can be satisfactorily described by considering only the states belonging to \mathcal{H}_U .

Having established the relevance of the subspace \mathcal{H}_U , one can introduce an effective Hamiltonian H_{eff} acting solely on \mathcal{H}_U . By rewriting \hat{H} in Eq. (1) as $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, where

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= U \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} = U \hat{P}, \\ \hat{V} &= -J \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{|i-j|^\alpha} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi \beta i + \phi) \hat{n}_i, \end{aligned} \quad (4)$$

and noticing that $\hat{H}_0 |\Psi\rangle = U |\Psi\rangle$ with $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_U$, then up to first order in \hat{V}/U , $\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{P}(\hat{H}_0 + \hat{V})\hat{P}$. After straightforward algebra, one can show that

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &= \hat{P} - \frac{J}{2\alpha U} \sum_i \hat{n}_{i+1} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+2} + \hat{b}_{i+2}^\dagger \hat{b}_i) \\ &\quad + \frac{2\Delta}{U} \cos(\pi \beta) \sum_i \cos(2\pi \beta i + \phi) \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}. \end{aligned} \quad (5)$$

Since \hat{P} plays no role on the dynamics, it can be safely omitted. Thus, in terms of the hard-core bose operators \hat{b}_i^\dagger and \hat{b}_i (see Appendix A), the effective Hamiltonian acquires the

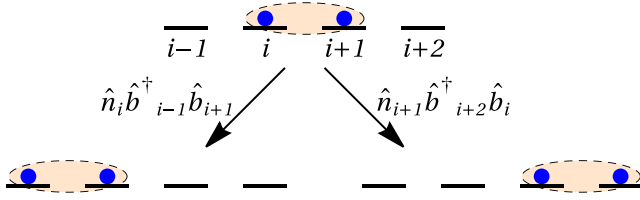


FIG. 4. Schematic representation of the density-dependent next-nearest-neighbor hopping of the pair of walkers.

structure of a Bose-Hubbard-like Hamiltonian with the distinctiveness that the nearest-neighbor hopping is replaced by a density-dependent next-nearest-neighbor tunneling, modulated by the coefficient $J/2^\alpha U$, while the on-site interaction is changed for a site-dependent nearest-neighbor interaction whose amplitude is just the sum of the AA quasiperiodic modulation in adjacent sites, that is, $\cos[2\pi\beta i + \phi] + \cos[2\pi\beta(i+1) + \phi] = 2\cos(\pi\beta)\cos[2\pi\beta i + \phi]$, with $\phi = \phi + \pi\beta$ times the factor $2\cos(\pi\beta)\Delta/U$. Interestingly, the motion of the walkers circumvents the power-law tunneling; thus, the power α plays a role in the strength of the density-dependent next-nearest-neighbor hopping $J/2^\alpha U$ only. Notice that as the hopping becomes short-range $\alpha \gg 1$, this contribution vanishes; in fact, this term is completely absent for NN hopping. In contrast to previous studies [43,59,61], the leading contribution to the mobility of the bound pair emerges from the first-order hopping processes $|1_i\rangle|1_{i+1}\rangle \rightarrow |1_{i+2}\rangle|1_{i+1}\rangle$ and $|1_i\rangle|1_{i+1}\rangle \rightarrow |1_i\rangle|1_{i-1}\rangle$ (see the schematic representation of Fig. 4). The effective Hamiltonian in Eq. (5) gives a clear explanation of the conelike propagations shown in Figs. 1(a)–(c) since the walkers behave as a single composite object moving in a lattice without power-law hops.

We now turn to the behavior shown in Figs. 1(d)–(f). When disorder takes nonzero values, the energy gap between bound and unbound states reduces, thus jeopardizing the stability of the pair. However, as shown in Fig. 3(b), the most relevant Fock states involved in the dynamics of the walkers are still those that belong to \mathcal{H}_U when $\Delta/J = 2$ and $U/J = 8$ for the three power-law hops $\alpha = 3, 1$, and $1/2$. In other words, the dimer endures for $\Delta/J = 2$.

One can suspect that the suppression of transport shown in Figs. 1(d)–(f) is due to the localization of the eigenstates belonging to \hat{H}_{eff} when $\Delta/J = 2$. This can be confirmed by evaluating the inverse participation ratio (IPR) in the Fock basis of the eigenstates that results from diagonalizing the effective Hamiltonian. The IPR of a normalized state $|\phi_m\rangle$ is evaluated as follows:

$$\text{IPR}_m = \sum_{\{n\}} |\langle \{n\} | \phi_m \rangle|^4, \quad (6)$$

where $|\{n\}\rangle$ is a state of the Fock basis. In Figs. 5(a)–(c) we plot the IPR of the eigenstates belonging to both \hat{H} and \hat{H}_{eff} (inset) in their respective Fock basis when $U/J = 8$ and $\Delta/J = 2$ for $\alpha = 3, 1$, and $1/2$, respectively. From Fig. 5 one can notice that a fraction of the low-energy states of \hat{H} are not localized, while its high-energy states show strong localization. Conversely, all the eigenstates of \hat{H}_{eff} are localized. Since the dimer motion is described by \hat{H}_{eff} , its transport is suppressed, even though the original Hamiltonian \hat{H} has ex-

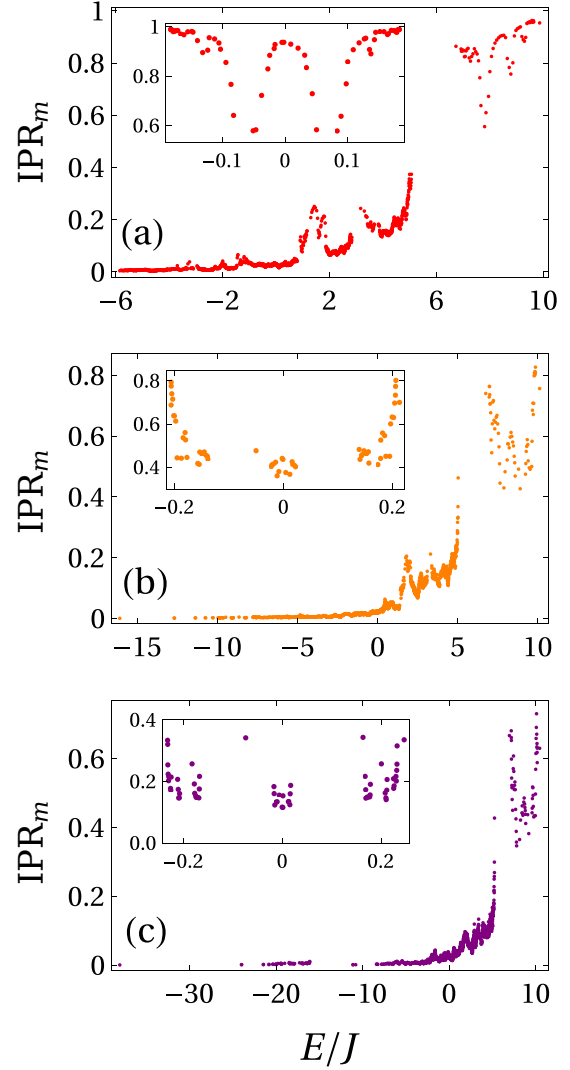


FIG. 5. Inverse participation ratio of the eigenstates belonging to both \hat{H} and \hat{H}_{eff} (inset) for $U/J = 8$ and $\Delta/J = 2$. Panels (a), (b), and (c) correspond to a power-law hopping values of $\alpha = 3, 1$, and $1/2$, respectively.

tended states. In summary, the dimer still persists for $\Delta/J = 2$ at the price of suppressing its spread.

Another quantity that allows us to recognize the coherent motion of the walkers is the two-particle correlation $\Gamma_{i,j}(t) = \langle \psi(t) | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_i | \psi(t) \rangle$. This two-body correlation function provides meaningful information regarding the effects of the interparticle interaction on the dynamics of quantum walkers [7,9,62]. In Fig. 6 we show $\Gamma_{i,j}(t)$ after a propagation time of $Jt/\hbar = 20$ for the same parameters as before, that is, $(\Delta/J, U/J) = (0, 8)$, $(\Delta/J, U/J) = (2, 8)$, and the three different values of $\alpha = 3, 1$, and $1/2$. In agreement with the hard-core constraint, the main diagonal of the correlation function vanishes. However, one can notice that the leading contributions emerge from the first diagonal below and above the main diagonal, thus confirming the formation and coherent motion of the pair. In particular, it supports the above statement that for $\Delta/J = 2$, the pair motion is still a suitable

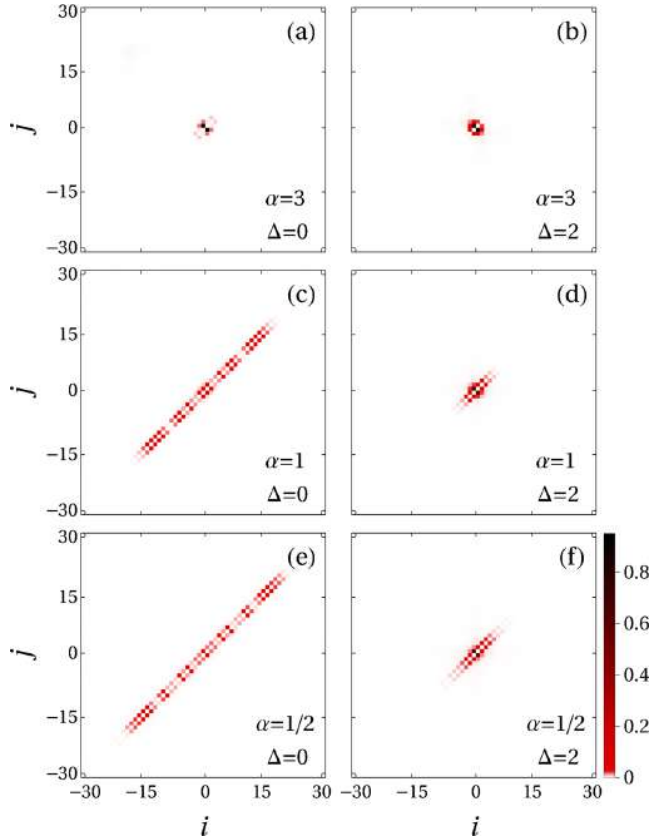


FIG. 6. Two-particle correlation function at $Jt/\hbar = 20$ for two hard-core bosons initially localized at adjacent sites in the middle of a chain. Quasidisorder and power-law hops are indicated in each panel; the interparticle interaction is $U/J = 8$.

picture of the dynamics of the walkers and the only effect of the quasiperiodicity is to suppress the transport.

We want to illustrate now an unforeseen behavior regarding the competence between quasidisorder and interactions. In Fig. 7 we show the time evolution of the single-particle density $n_i(t)$ for $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$ and $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$.

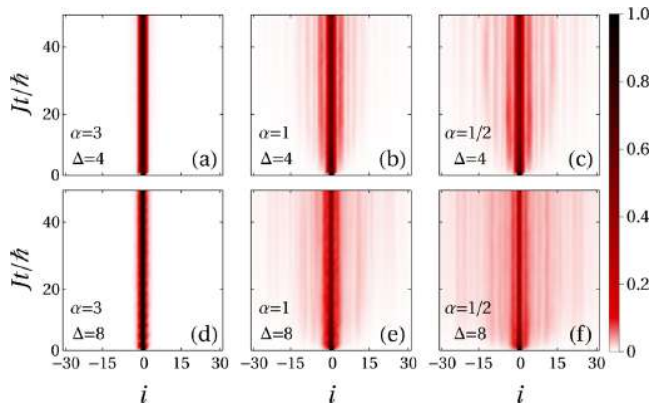


FIG. 7. Time evolution of the single-particle density distribution $n_i(t)$ of two walkers initially occupying adjacent sites on the center of the lattice. Quasidisorder and power-law hops are indicated in each panel. The interparticle interaction for all panels is $U/J = 8$.

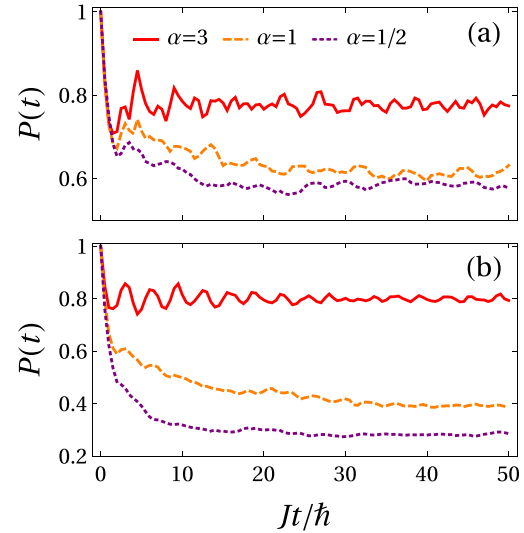


FIG. 8. Time evolution of the expectation value of the projector operator $\hat{P} = \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$. Panel (a) corresponds to $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$, whereas panel (b) considers $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$. The power-law hopping values are $\alpha = 3$ (red solid line), $\alpha = 1$ (orange dashed line), and $\alpha = 1/2$ (purple dotted line).

One can notice that, for $\alpha = 3$, Figs. 7(a) and 7(d) display a similar appearance; that is, the diffusion of the walkers is suppressed by interactions and quasiperiodicity. Surprisingly, this is not the case for $\alpha = 1$ and $\alpha = 1/2$, since these profiles achieve expansion to greater distances for $\Delta/J = 4$ and $\Delta/J = 8$ than those for $\Delta/J = 2$ [see Figs. 1(e) and 1(f)], thus contradicting the general notion that the quasidisorder yields suppression of transport.

To understand why the quasiperiodicity restores the transport of the walkers when $\alpha = 1$ and $\alpha = 1/2$, it is instructive to show first that the picture of the walkers moving together breaks down. In Fig. 8(a) we plot the time evolution of $P(t)$ when $\Delta/J = 4$ and $U/J = 8$ for $\alpha = 3, 1$, and $1/2$, whereas Fig. 8(b) considers $\Delta/J = U/J = 8$ for the same values of α . One can notice that now the contribution of the Fock states belonging to \mathcal{H}_U on the dynamics of the walkers is less relevant than the cases exhibited in Fig. 3. In fact this is more evident for $\Delta/J = 8$. Thus, when quasidisorder competes with the interaction, the effective Hamiltonian \hat{H}_{eff} is no longer suitable to describe the spreading of the particles.

To show the effect of quasidisorder on the energy spectrum, in Fig. 9 we plot the eigenenergies of the Hamiltonian in Eq. (1) for $U/J = 8$ and $\Delta/J = 4$ [Figs. 9(a), 9(c), and 9(e)] and for $\Delta/J = U/J = 8$ [Figs. 9(b), 9(d), and 9(f)]. The values of α are the same used throughout the paper. One can notice that for the strengths of quasidisorder considered, the energy gap is now negligible compared to the previous case (see Fig. 2). Consequently, the dynamics of the walkers is no longer exclusively concentrated in the high-energy sector, where dimers states are located, but also in lower-energy states. However, as one can notice from Fig. 10, the low-energy eigenstates have the peculiarity of having an inverse participation ratios lower than those of high-energy states. Therefore, the participation of low-energy states, where the pair is dissociated, enhances the transport of the walkers.

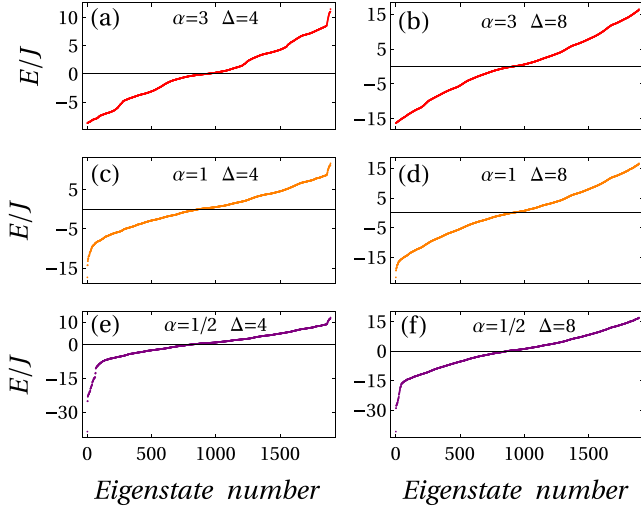


FIG. 9. Energy spectrum of the Hamiltonian in Eq. (1) for $U/J = 8$. Quasidisorder strengths and power-law hops are indicated in each panel.

To end this section, in Fig. 11 we show the two-particle correlation function $\Gamma_{i,j}(t)$ after a propagation time of $Jt/\hbar = 20$, for $(\Delta/J, U/J) = (4, 8)$, $(\Delta/J, U/J) = (8, 8)$, and the three different values of $\alpha = 3, 1$, and $1/2$. In contrast with the correlation functions shown in Fig. 6, the diagonals above and below the main diagonal in Fig. 11 are no longer the principal contributions to the correlation functions. Therefore, states where the pair is dissociated contribute the most to the dynamics of the walkers, thus allowing the particles to spread to regions that were not accessible for the case $\Delta/J = 2$.

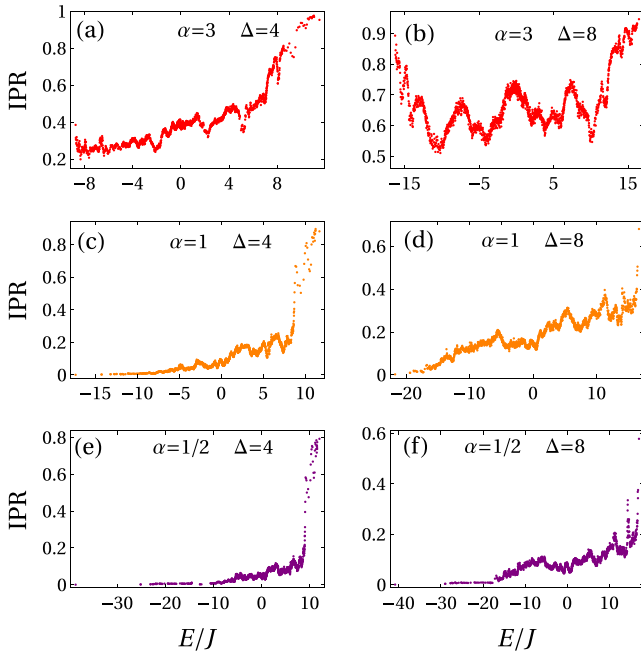


FIG. 10. Inverse participation ratio associated with the eigenstates of the Hamiltonian in Eq. (1) for $U/J = 8$. Quasidisorder strengths and power-law hops are indicated in each panel.

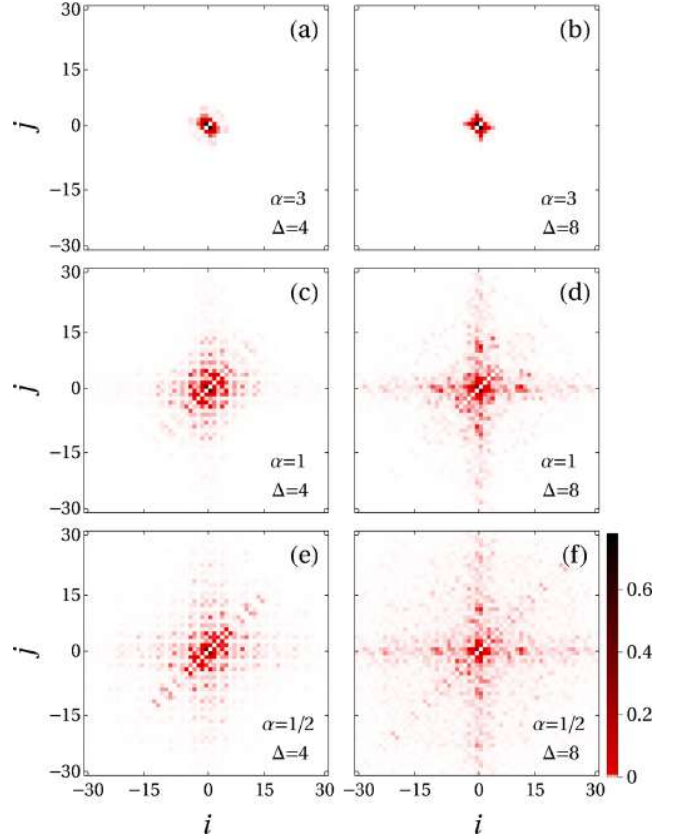


FIG. 11. Two-particle correlation at $Jt/\hbar = 20$ for $U/J = 8$. Quasidisorder strengths and power-law hops are indicated in each panel.

IV. SURVIVAL PROBABILITY

Having established the mechanism behind the quasidisorder-enhanced transport transition, it is suitable to find a quantity that senses the degree of delocalization of the walkers. For this purpose, we employ the survival probability $f(t)$, which measures the probability of finding the system in its initial state $|\psi(0)\rangle$ at time t ,

$$f(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle \psi(0) | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle|^2. \quad (7)$$

In terms of the coefficients C_m and the eigenenergies E_m , the survival probability can be written as follows:

$$f(t) = \left| \sum_m |C_m|^2 e^{-iE_m t/\hbar} \right|^2. \quad (8)$$

Previous studies for disordered systems [63,64] have shown that the survival probability provides meaningful information regarding the dynamics of both noninteracting [65] and interacting systems [66,67]. In Figs. 12(a)–(c) we plot the time evolution of the survival probability $f(t)$ for $U/J = 8$ and $\alpha = 3, 1$, and $1/2$, respectively. In general, the time evolution of $f(t)$ shows a decay from its initial value followed by oscillations around an asymptotic value. For long times in the quasidisorder-free case, the survival probability oscillates around the value $1/L$ independently of the power-law hop α , and this indicates that the walkers can spread over

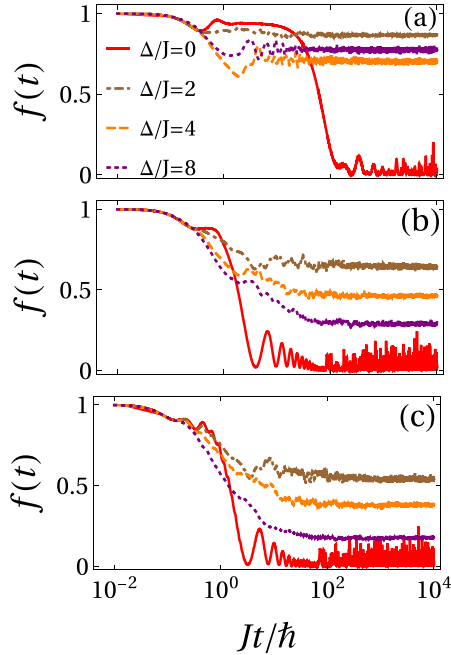


FIG. 12. Survival probability $f(t)$ for $U/J = 8$. Panels (a), (b), and (c) correspond to power-law hopping values of $\alpha = 3, 1,$ and $1/2$, respectively. Quasidisorder strengths are $\Delta/J = 0$ (red solid line), $\Delta/J = 2$ (brown dash-dotted line), $\Delta/J = 4$ (orange dashed line), and $\Delta/J = 8$ (purple dotted line).

the whole lattice. For a small quasidisorder strength $\Delta/J = 2$, the asymptotic value of $f(t)$ increases regardless of the value of α . That is, for all cases, suppression of transport is observed, as in the usual Anderson transition. Surprisingly, when quasidisorder increases $\Delta/J = 4$, the asymptotic value of $f(t)$ decreases, indicating the delocalization mentioned in the previous section. Even for $\alpha = 3$, a delocalization is observed. However, the survival probability takes values close to unity, which makes it difficult to observe the delocalization in the density profiles of Fig. 7. Counterintuitively, increasing even more the quasiperiodicity strength leads, in the long-time limit, to a lower value of the survival probability for $\alpha = 1$ and $\alpha = 1/2$; thus, transport is enhanced by quasidisorder. Notice that this is not the case when $\alpha = 3$ since for $\Delta/J = 8$ the survival probability increases as expected.

To smooth the fluctuations in the time evolution of $f(t)$, it is convenient to employ the time average of the survival probability,

$$F(t) = \frac{1}{t} \int_0^t dt' f(t'). \quad (9)$$

In the long-time limit, $F(t)$ saturates to the asymptotic survival probability (ASP) [64]. The saturation point is given by the simple expression

$$F(t \rightarrow \infty) = \sum_m |C_m|^4 = \text{IPR}^{(0)}. \quad (10)$$

To avoid confusion, we point out that $\text{IPR}^{(0)}$ is the inverse participation ratio of the initial state $|\psi(0)\rangle$ in terms of the eigenbasis $|\phi_m\rangle$ of the Hamiltonian in Eq. (1). On the contrary, the quantity IPR_m , used in the previous section, is the inverse

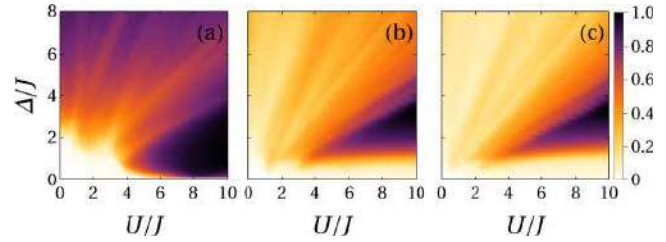


FIG. 13. Asymptotic survival probability $F(t \rightarrow \infty)$ as a function of Δ/J and U/J . Panels (a), (b), and (c) correspond to power-law hopping values of $\alpha = 3, 1,$ and $1/2$, respectively.

participation ratio of the eigenstates in terms of the Fock basis. Notice that Eq. (10) links a dynamical quantity with the inherent structure of the eigenstates of the system under investigation.

To establish the values of the quasiperiodic modulation and the interaction between particles for which delocalization occurs, in Figs. 13(a) and 13(b) we condense in a density color scheme the full information of the ASP associated with the competition of quasidisorder vs interactions for $\alpha = 3, 1,$ and $1/2$, respectively. From Fig. 13, one can notice two main characteristics. The first one is that, for values of interaction strength $U/J > 4$, the walkers with $\alpha = 3$ get localized for small quasidisorder amplitudes, while the diffusion of walkers with $\alpha = 1$ and $1/2$ is more robust as they localize for larger quasidisorder amplitudes. The second one is that, since interactions yield robustness to the dimer, the delocalization of the pair requires larger quasidisorder amplitudes as the interaction strength increases.

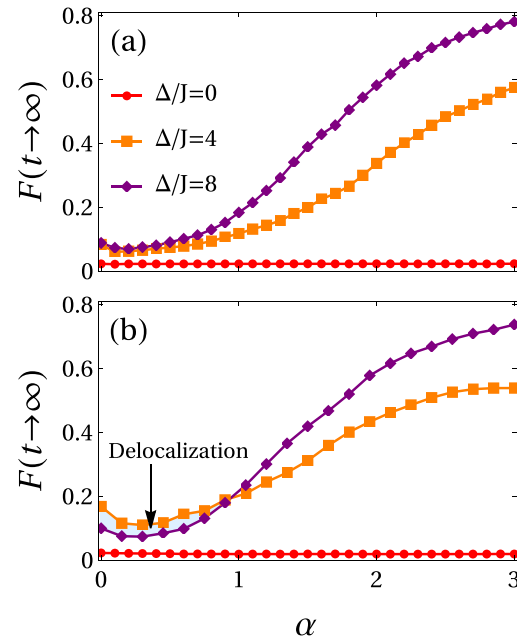


FIG. 14. Asymptotic survival probability $F(t \rightarrow \infty)$ as a function of the power-law hop α for quasidisorder strengths $\Delta/J = 0$ (red circles), $\Delta/J = 4$ (orange squares), and $\Delta/J = 8$ (purple diamonds). Panels (a) and (b) correspond to an interparticle interaction of $U/J = 1$ and $U/J = 4$, respectively.

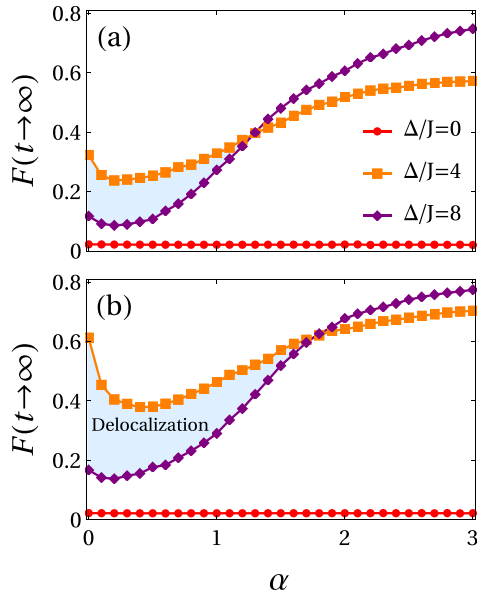


FIG. 15. Asymptotic survival probability $F(t \rightarrow \infty)$ as a function of the power-law hop α for quasidisorder strengths $\Delta/J = 0$ (red circles), $\Delta/J = 4$ (orange squares), and $\Delta/J = 8$ (purple diamonds). Panels (a) and (b) correspond to interparticle interactions of $U/J = 6$ and $U/J = 8$, respectively.

To conclude this section, we unveil the role of the power-law hop in the delocalization transition. For this purpose, in Figs. 14(a) and 14(b) we evaluate the ASP as a function of α for several quasidisorder strengths and interparticle interactions $U/J = 1$ and $U/J = 4$, respectively. For the smallest interaction strength $U/J = 1$, the ASP increases with the quasidisorder as in the usual Anderson scheme. However, this is not the case for $U/J = 4$ since there is a value of α for which the ASP decreases with an increase in the quasiperiodicity. The blue region bounded by the curves $\Delta/J = 4$ and $\Delta/J = 8$ indicates the space of parameters for which the quantum walkers delocalize and, therefore, perform transport assisted by quasidisorder. In Figs. 15(a) and 15(b), we show the ASP as a function of α for interaction magnitudes of $U/J = 6$ and $U/J = 8$, respectively. Figures 14 and 15 reveal that, as the interaction between the walkers increases, the delocalization region enlarges. Interestingly, as shown in Fig. 15(b), the delocalization transition can take place for short ($\alpha > 1$) and long ($\alpha < 1$) tunneling ranges. In contrast to the recently disorder-enhanced transport transition found in a single-particle model with all-to-all hopping [42], here we unveil the role of a power-law hopping on an interacting two-body delocalization transition.

V. CONCLUSIONS

We have investigated the dynamics of a pair of interacting hard-core bosons moving in a one-dimensional quasicrystal with power-law tunneling $1/r^\alpha$. In particular, by analyzing the time evolution of the one-particle density, the survival probability, and the two-particle correlation function, we have found that, for strong interparticle interactions, transport is suppressed for moderate values of the quasidisorder at first, but then is enhanced as it increases. This result is

in stark contrast with the general notion that quasidisorder always favors localization. To reveal the physics behind the quasidisorder-enhanced transport transition, we introduced an effective Hamiltonian that satisfactorily describes the dynamics of the walkers when the interparticle interaction is the largest energy scale. In this effective Hamiltonian, the walkers move as a composite object whose dynamics is completely shielded from the power-law tunneling. As a result, the dimer gets localized for moderate quasidisorder strengths, as in the usual Anderson picture. However, when the quasiperiodicity competes with the interaction, the stability of the pair is jeopardized and the delocalization emerges as a result of the pair dissociation for certain tunneling ranges.

Using the asymptotic value of the survival probability, we established the regions of parameters in which the delocalization of the walkers takes place. In particular, we first fix the power-law hop and explore the delocalization in diagrams for the strength of the incommensurate potential and the interparticle interaction. To this end, we evaluate the role of the power-law hop for fixed quasidisorder strengths and interactions. Our two-body study brings to light the relevance of dimer formation on the transport properties of disordered systems with power-law hopping. As demonstrated, counter-intuitive results regarding the spreading of walkers can emerge when dimer formation is taken into account.

The conclusions here achieved are of primary relevance to more complex phenomena involving many-body systems, in particular, within the experimental context, where the possibility of setting states prepared with pairs can lead to unexpected diffusion regimes. We hope that our work will trigger further theoretical analysis such as, for instance, the determination of the fractal nature of the two-body states in intermediate and long-range hops by means of projected Green's function methods [46], the fate of the quasidisorder-enhanced transport transition within the many-body regime, and the role of dimensionality on transport properties, among others. Our results could be of interest for experiments with trapped ions, Rydberg atoms, and photons in crystal waveguides where exotic transport phenomena with long-range interactions are explored.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially funded by Grant No. IN108620 from DGAPA (UNAM). G.A.D.-C. acknowledges a CONACYT scholarship.

APPENDIX: EFFECTIVE HAMILTONIAN

In Sec. III we introduced an effective Hamiltonian to describe the dynamics of the pair of walkers within the strongly interacting regime. To show that the quasiperiodic modulation induces a nearest-neighbor interaction between particles, we wrote \hat{H}_{eff} in terms of the creation and annihilation operators of the hard-core bosons. However, it is instructive to define the operators $\hat{a}_i = \hat{b}_i \hat{b}_{i+1}$ and $\hat{a}_i^\dagger = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1}^\dagger$, which annihilate and create a bound nearest-neighbor dimer located at sites i and $i + 1$. These operators inherit the hard-core constraint of the original bosons, that is, $(\hat{a}_i)^2 = (\hat{a}_i^\dagger)^2 = 0$, but also acquire the nearest-neighbor constraint $\hat{a}_i \hat{a}_{i\pm 1} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i\pm 1}^\dagger = 0$. Addi-

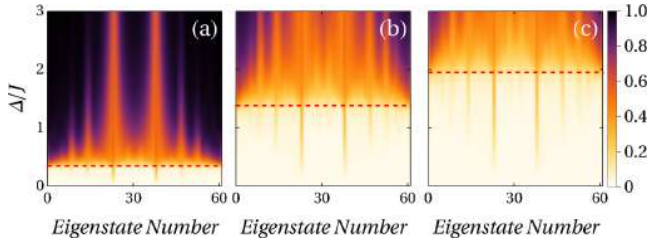


FIG. 16. Inverse participation ratio of all eigenstates of the Hamiltonian in Eq. (A1) as a function of the quasiperiodic modulation. Panels (a), (b), and (c) correspond to power-hopping values of $\alpha = 3, 1,$ and $1/2$, respectively. The red dashed line corresponds to the critical quasidisorder in Eq. (A2).

tionally, within the subspace \mathcal{H}_U , \hat{a}_i and \hat{a}_i^\dagger obey the standard bosonic commutation relations $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ and $[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0$, provided $j \neq \{i, i \pm 1\}$. In terms of the dimer operators, the effective Hamiltonian can be written as follows:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{J}{2^\alpha U} \sum_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i) + \frac{2\Delta}{U} \cos(\pi\beta) \sum_i \cos(2\pi\beta i + \varphi) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (\text{A1})$$

The above Hamiltonian is nothing more than the well-known Aubry-André model with the distinction that the effective tunneling strength is $J' \rightarrow J/(2^\alpha U)$ and the quasiperiodic modulation is $\Delta' \rightarrow 2 \cos(\pi\beta)\Delta/U$. The transition from extended to localized states takes place at $|\Delta'_c/J'| = 2$, which

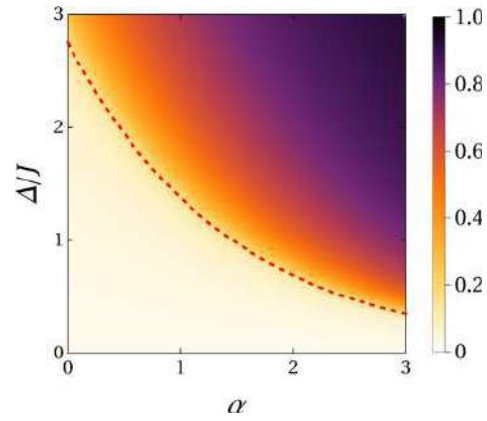


FIG. 17. Average inverse participation ratio as a function of the power-law hop α and the quasidisorder amplitude Δ/J . The red dashed line corresponds to the critical quasidisorder in Eq. (A2).

yields

$$\frac{\Delta_c}{J} = \frac{1}{2^\alpha |\cos(\pi\beta)|}. \quad (\text{A2})$$

In Figs. 16(a)–(c), we show the IPR_m of the eigenstates of the Hamiltonian in Eq. (A1) as a function of the quasidisorder for $\alpha = 3, 1,$ and $1/2$, respectively. The horizontal dashed red line corresponds to the critical quasidisorder in Eq. (A2).

To explore the average nature of the eigenstates on the α - Δ/J plane, it is convenient to employ the average inverse participation ratio $\overline{\text{IPR}} = \frac{1}{L} \sum_m \text{IPR}_m$. In Fig. 17 we illustrate the $\overline{\text{IPR}}$, and as in the previous figure, the dashed red line corresponds to the critical quasidisorder in Eq. (A2).

-
- [1] Y. Aharonov, L. Davidovich, and N. Zagury, *Phys. Rev. A* **48**, 1687 (1993).
- [2] E. Farhi and S. Gutmann, *Phys. Rev. A* **58**, 915 (1998).
- [3] N. Shenvi, J. Kempe, and K. Birgitta Whaley, *Phys. Rev. A* **67**, 052307 (2003).
- [4] T. Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg, and E. Demler, *Phys. Rev. A* **82**, 033429 (2010).
- [5] R. J. Sension, *Nature (London)* **446**, 740 (2007).
- [6] M. Mohseni, P. Rebentrost, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik, *J. Chem. Phys.* **129**, 174106 (2008).
- [7] Y. Lahini, M. Verbin, S. D. Huber, Y. Bromberg, R. Pugatch, and Y. Silberberg, *Phys. Rev. A* **86**, 011603(R) (2012).
- [8] D. Wiater, T. Sowiński, and J. Zakrzewski, *Phys. Rev. A* **96**, 043629 (2017).
- [9] T. Chattaraj and R. V. Krems, *Phys. Rev. A* **94**, 023601 (2016).
- [10] L. Wang, N. Liu, S. Chen, and Y. Zhang, *Phys. Rev. A* **95**, 013619 (2017).
- [11] L. Wang, L. Wang, and Y. Zhang, *Phys. Rev. A* **90**, 063618 (2014).
- [12] Y. Lahini, Y. Bromberg, D. N. Christodoulides, and Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 163905 (2010).
- [13] I. Siloi, C. Benedetti, E. Piccinini, J. Piilo, S. Maniscalco, M. G. A. Paris, and P. Bordone, *Phys. Rev. A* **95**, 022106 (2017).
- [14] F. Zähringer, G. Kirchmair, R. Gerritsma, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 100503 (2010).
- [15] H. Schmitz, R. Matjeschk, Ch. Schneider, J. Glueckert, M. Enderlein, T. Huber, and T. Schaez, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 090504 (2009).
- [16] L. Sansoni, F. Sciarrino, G. Vallone, P. Mataloni, A. Crespi, R. Ramponi, and R. Osellame, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 010502 (2012).
- [17] A. S. Solntsev, A. A. Sukhorukov, D. N. Neshev, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 023601 (2012).
- [18] M. A. Broome, A. Fedrizzi, B. P. Lanyon, I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, and A. G. White, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 153602 (2010).
- [19] M. Karski, L. Förster, J.-M. Choi, A. Steffen, W. Alt, D. Meschede, and A. Widera, *Science* **325**, 174 (2009).
- [20] P. M. Preiss, R. Ma, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, P. Zupancic, Y. Lahini, R. Islam, and M. Greiner, *Science* **347**, 1229 (2015).
- [21] T. Fukuhara, P. Schauß, M. Endres, S. Hild, M. Cheneau, I. Bloch, and C. Gross, *Nature (London)* **502**, 76 (2013).
- [22] G. Roati, C. D’Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, and M. Inguscio, *Nature (London)* **453**, 895 (2008).
- [23] J. Ghosh, *Phys. Rev. A* **89**, 022309 (2014).
- [24] S. Derevyanko, *Sci. Rep.* **8**, 1795 (2018).

- [25] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [26] F. Evers and A. D. Mirlin, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1355 (2008).
- [27] S. Aubry and G. André, *Ann. Israel Phys. Soc.* **3**, 133 (1980).
- [28] P. G. Harper, *Proc. Phys. Soc. A* **68**, 874 (1955).
- [29] M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1954 (1979).
- [30] G. A. Domínguez-Castro and R. Paredes, *Eur. J. Phys.* **40**, 045403 (2019).
- [31] B. Yan, S. A. Moses, B. Gadway, J. P. Covey, K. R. A. Hazzard, A. M. Rey, D. S. Jin, and J. Ye, *Nature (London)* **501**, 521 (2013).
- [32] L. De Marco, G. Valtolina, K. Matsuda, W. G. Tobias, J. P. Covey, and J. Ye, *Science* **363**, 853 (2019).
- [33] A. Browaeys and T. Lahaye, *Nat. Phys.* **16**, 132 (2020).
- [34] Y. Chougale, J. Talukdar, T. Ramos, and R. Nath, *Phys. Rev. A* **102**, 022816 (2020).
- [35] G. A. Álvarez, D. Suter, and R. Kaiser, *Science* **349**, 846 (2015).
- [36] Y.-C. Cheng and G. R. Fleming, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **60**, 241 (2009).
- [37] A. F. Fidler, V. P. Singh, P. D. Long, P. D. Dahlberg, and G. S. Engel, *Nat. Commun.* **5**, 3286 (2014).
- [38] C.-L. Hung, A. González-Tudela, J. I. Cirac, and H. J. Kimble, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **113**, E4946 (2016).
- [39] D. J. Boers, B. Goedeke, D. Hinrichs, and M. Holthaus, *Phys. Rev. A* **75**, 063404 (2007).
- [40] X. Deng, S. Ray, S. Sinha, G. V. Shlyapnikov, and L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 025301 (2019).
- [41] G. L. Celardo, R. Kaiser, and F. Borgonovi, *Phys. Rev. B* **94**, 144206 (2016).
- [42] N. C. Chávez, F. Mattiotti, J. A. Méndez-Bermúdez, F. Borgonovi, and G. L. Celardo, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 153201 (2021).
- [43] G. Dufour and G. Orso, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 155306 (2012).
- [44] S. Flach, M. Ivanchenko, and R. Khomeriki, *Europhys. Lett.* **98**, 66002 (2012).
- [45] L. A. Toikka, *Phys. Rev. B* **101**, 064202 (2020).
- [46] D. Thongjaomayum, S. Flach, and A. Andrianov, *Phys. Rev. B* **101**, 174201 (2020).
- [47] S. Hermes, T. J. G. Apollaro, S. Paganelli, and T. Macrì, *Phys. Rev. A* **101**, 053607 (2020).
- [48] P. Jurcevic, B. P. Lanyon, P. Hauke, C. Hempel, P. Zoller, R. Blatt, and C. F. Roos, *Nature (London)* **511**, 202 (2014).
- [49] P. Richerme, Z.-X. Gong, A. Lee, C. Senko, J. Smith, M. Foss-Feig, S. Michalakis, A. V. Gorshkov, and C. Monroe, *Nature (London)* **511**, 198 (2014).
- [50] A. Safavi-Naini, M. L. Wall, O. L. Acevedo, A. M. Rey, and R. M. Nandkishore, *Phys. Rev. A* **99**, 033610 (2019).
- [51] T. Botzung, D. Vodola, P. Naldesi, M. Müller, E. Ercolessi, and G. Pupillo, *Phys. Rev. B* **100**, 155136 (2019).
- [52] X. Deng, G. Masella, G. Pupillo, and L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 010401 (2020).
- [53] B. Kloss and Y. Bar Lev, *Phys. Rev. B* **102**, 060201(R) (2020).
- [54] D.-M. Storch, M. van den Worm, and M. Kastner, *New J. Phys.* **17**, 063021 (2015).
- [55] V. Romero-Rochín, R. P. Duarte-Zamorano, S. Nilsen-Hofseth, and R. G. Barrera, *Phys. Rev. E* **63**, 027601 (2001).
- [56] K. Winkler, G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. Hecker Denschlag, A. J. Daley, A. Kantian, H. P. Büchler, and P. Zoller, *Nature (London)* **441**, 853 (2006).
- [57] S. Mondal, A. Kshetrimayum, and T. Mishra, *Phys. Rev. A* **102**, 023312 (2020).
- [58] W. Li, A. Dhar, X. Deng, K. Kasamatsu, L. Barbiero, and L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 010404 (2020).
- [59] D. Petrosyan, B. Schmidt, J. R. Anglin, and M. Fleischhauer, *Phys. Rev. A* **76**, 033606 (2007).
- [60] M. Valiente and D. Petrosyan, *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **41**, 161002 (2008).
- [61] F. Stellin and G. Orso, *Phys. Rev. Res.* **2**, 033501 (2020).
- [62] S. Sarkar and T. Sowiński, *Phys. Rev. A* **102**, 043326 (2020).
- [63] V. E. Kravtsov, O. M. Yevtushenko, P. Snajberk, and E. Cuevas, *Phys. Rev. E* **86**, 021136 (2012).
- [64] E. J. Torres-Herrera, A. M. García-García, and L. F. Santos, *Phys. Rev. B* **97**, 060303(R) (2018).
- [65] R. Ketzmerick, G. Petschel, and T. Geisel, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 695 (1992).
- [66] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos, *Ann. Phys. (Berlin, Ger.)* **529**, 1600284 (2017).
- [67] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos, *Phys. Rev. B* **92**, 014208 (2015).