



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**Átomos de Fermi a bajas energías
en redes ópticas en 2D**

T E S I S

Que para obtener el título de:

FÍSICO

Presenta:

Gustavo Alexis Domínguez Castro

Directora de tesis:

Dra. Rosario Paredes Gutiérrez

2016



Ciudad Universitaria, CDMX



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.

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno:

Domínguez
Castro
Gustavo
Alexis
55 43 43 09 23
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
412000469

2. Datos del tutor:

Dra.
Rosario
Paredes
Gutiérrez

3. Datos del Sinodal 1:

Dr.
Chumin
Wang
Chen

4. Datos del Sinodal 2:

Dra.
Vicenta
Sánchez
Morales

5. Datos del Sinodal 3:

Dr.
Jorge
Amin
Seman
Harutinian

6. Datos del Sinodal 4:

Dr.
Luis
Antonio
Pérez
López

7. Datos de la tesis:

Átomos de Fermi a bajas energías en redes ópticas en 2D
101 p.
2016

Our present understanding of superconductivity has arisen from a close interplay of theory and experiment. It would have been very difficult to have arrived at the theory by purely deductive reasoning from the basic equations of quantum mechanics. Even if someone had done so, no one would have believed that such remarkable properties would really occur in Nature.

John Bardeen

Agradecimientos

A mis abuelos guías espirituales, personas de gran fortaleza y disciplina.

A mis padres de quienes he aprendido los más altos valores y a mi compañero de vida, mi hermano.

A cada una de las personas que me apoyaron e hicieron de este trabajo una realidad, con especial afecto a la Dra. Rosario Paredes Gutiérrez y al maestro en ciencias Arturo Camacho Guardian.

El desarrollo de esta tesis ha sido financiado por los proyectos de investigación: DGAPA-PAPIIT (UNAM) IA101716, Estudio de turbulencia cuántica en superfluidos atómicos y DGAPA-PAPIIT (UNAM) IN107014 Líquidos cuánticos de Bose y Fermi.

Índice general

Resumen	1
1. Introducción	2
1.1. Dispersión	5
1.1.1. Colisión de dos partículas	5
1.1.2. Descomposición en ondas parciales	7
1.1.3. Dispersión en multicanal	9
1.2. Estructura Sólida	10
1.2.1. Red de Bravais	10
1.2.2. Red recíproca	12
1.2.3. Potenciales periódicos	14
1.2.4. Amarre fuerte	15
1.2.5. Modelo de Hubbard	18
1.3. Problema de Cooper	22
1.3.1. Gas de Fermi	22
1.3.2. Pares de Cooper	24
1.4. Materia ultrafría	26
1.4.1. Enfriamiento láser	26
1.4.2. Melazas ópticas	28
1.4.3. Enfriamiento evaporativo	29
1.4.4. Redes ópticas	30
1.4.5. Resonancias de Feshbach	31
1.4.6. Stimulated Raman Adiabatic Passage	32
1.5. Gas dipolar ultrafrío de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$	34
2. Planteamiento y objetivos	35
2.1. Modelo	36
2.1.1. Formalismo	38
2.2. Estados ligados	44
2.2.1. Red cuadrada	45
2.2.2. Red triangular	47
2.3. Problema de Cooper	49
2.3.1. Red Cuadrada	49
2.3.2. Red triangular	53
3. Conclusiones	59

Bibliografía	61
Artículo de investigación	62
A. Código E_B/t vs χ red cuadrada	72
B. Código E_B/t vs $K_x a$ red cuadrada	75
C. Código E_B/t vs χ red triangular	78
D. Código E_B/t vs $K_i a$ red triangular	81
E. Código Δ/t vs ε_F/t red cuadrada balanceada	84
F. Código Δ/t vs $K_x a$ red cuadrada balanceada	87
G. Código Δ/t vs $K_x a$ red cuadrada desbalanceada	90
H. Código Δ/t vs ε_F/t red triangular balanceada	93
I. Código Δ/t vs $K_i a$ red triangular balanceada	96
J. Código Δ/t vs $K_i a$ red triangular desbalanceada	99

Resumen

En esta tesis se analizó la formación de pares de Cooper y estados ligados (dímeros) de dos moléculas dipolares pertenecientes a un gas de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ enfriado a temperatura absoluta $T = 0$ K. Los pares se encuentran confinados en un arreglo conformado por redes ópticas planares con geometrías cuadrada y triangular. El problema se abordó desde la aproximación de amarre fuerte del estado sólido y el modelo de Hubbard; la energía del estado ligado fue determinada de manera variacional, mientras que el problema de Cooper se formuló de manera similar al trabajo original de L. Cooper[1]. Este formalismo introdujo dos parámetros adimensionales Λ como el cociente entre la separación de los planos y la constante de red y χ el cual caracteriza la intensidad de la interacción dipolar en las moléculas. Se mostró que la geometría cuadrada favorece la formación del estado dispersivo a una interacción dipolar débil $\chi \sim 0.23$ hasta intensidades del orden de $\chi \sim 0.6$, donde la formación del estado ligado (dímero) tiene lugar. Los pares dispersados con momento de centro de masa no nulo adquirieron el mayor valor en el gap para redes con un desbalance en la energía de Fermi, mostrándose así la formación de fases FFLO en el sistema dipolar en 2D. Los valores de gap obtenidos están en total acuerdo con los reportados en un tratamiento de los muchos cuerpos[2] a temperatura $T = 0$ K. La formación del dímero en la red triangular tuvo lugar a una intensidad de $\chi \sim 0.6$, mientras que el estado de Cooper se manifestó a una intensidad de $\chi \sim 0.2$, se mostró que para ambas geometrías el gap la energía necesaria para romper los pares de Cooper Δ depende fuertemente de la topología de las superficies de Fermi.

Se exhibió que la geometría triangular presenta mayores valores en el gap y una mayor prevalencia del estado de Cooper que en la red cuadrada, esto supondría una ventaja experimental sobre la red cuadrada y un posible incremento en la temperatura crítica T_c de la fase superfluida en una red óptica con dicha geometría.

Los cálculos numéricos fueron realizados en python 2.7.0.

Capítulo 1

Introducción

En 1911 el físico holandés H. Kamerling Onnes descubrió la superconductividad tan solo 3 años después de haber licuado helio[3], lo cual le sirvió como técnica de enfriamiento en mercurio sólido. Karmeling Onnes reportó que la resistencia eléctrica del mercurio desaparecía bruscamente al enfriarse a 4.2 K, siendo un comportamiento anómalo en esos años, puesto que se creía que la resistencia disminuía gradualmente hasta alcanzar el cero absoluto. Posteriormente, en 1937 Kapitza y F. Allen descubrieron que a 2.2 K (una temperatura alcanzada por Karmeling) el helio exhibía una nueva fase caracterizada por la ausencia de viscosidad, a esta nueva fase se le dio el nombre de superfluido[4]. El hecho que el isótopo mas abundante del helio, ^4He , es un bosón con espín cero dio lugar a relacionar la superfluidez con la condensación de Bose-Einstein; sin embargo, en 1940 Landau(desde una perspectiva fenomenológica) y Bogoliubov(desde una perspectiva microscópica) hicieron la observación que un condensado de Bose-Einstein de partículas no interactuantes no presenta una fase superfluida; es la interacción entre partículas que hace posible un superfluido[4]. El éxito obtenido en la descripción de la superfluidez reanimó a la comunidad científica por encontrar una teoría microscópica que describiera la superconductividad, tomando como punto de partida que la interacción entre los electrones es la responsable del fenómeno, no obstante, se presentan dos aparentes inconvenientes:

1. Los portadores de carga al ser fermiones exhiben el principio de exclusión de Pauli, inhabilitándolos de la macro-ocupación del estado base, como en el condensado de Bose-Einstein.
2. Al tener los electrones la misma carga eléctrica, la repulsión coulombiana imposibilitaría el apareamiento electrónico.

A fin de esclarecer estos dos puntos, surgieron múltiples contribuciones por parte de la comunidad científica, entre las que destacan el trabajo de H. Fröhlich quien propuso que la región cercana a un electrón de conducción se ve alterada por la presencia de este último(ver figura 1.1), resultando en una concentración de carga positiva en la vecindad circundante al electrón, naturalmente otro electrón se verá atraído a esta concentración de carga.

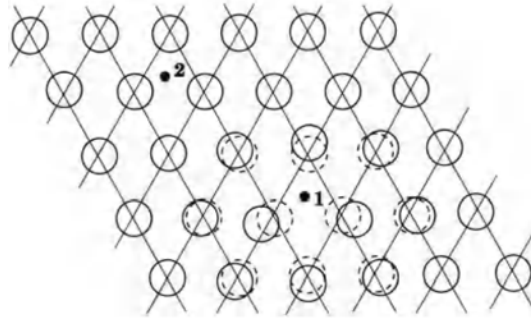


Figura 1.1: Los iones en el metal son desplazados de su posición de equilibrio(líneas discontinuas) debido a la presencia del electrón 1. El electrón 2 experimenta una interacción entre el electrón y la red, que por lo general no es de tipo eléctrico.

Este proceso no sólo resultaría en un apantallamiento de la interacción coulombiana, sino que para ciertos materiales dominaría sobre la repulsión eléctrica, resultando en una interacción atractiva entre los electrones, la cual puede considerarse como el mecanismo que estabiliza el estado superconductor.

En 1957 las ideas de Fröhlich fueron empleadas por los físicos J. Bardeen, L.N. Cooper, y J.R. Schrieffer[5] al ser los primeros en proponer una teoría microscópica de la superconductividad basada en la formación de pares "ligados" de electrones¹ como los responsables del transporte de carga eléctrica. Asociado a este par existe una energía Δ llamada gap, cuyo valor numérico fue verificado experimentalmente en la absorción de radiación infrarroja por un material superconductor.

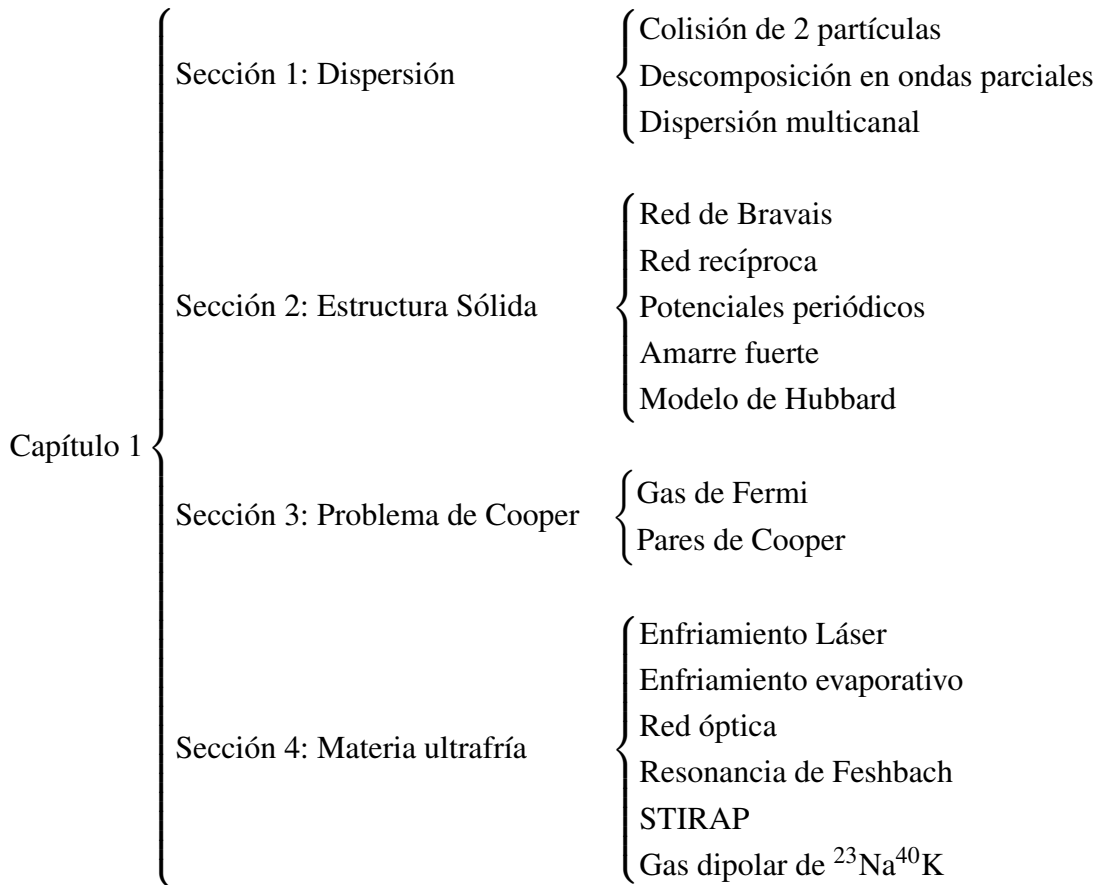
El objetivo de colocar este recuento histórico en la introducción es hacer notar al lector cómo el desarrollo de una técnica de enfriamiento(licuefacción del helio 1908) reveló 2 nuevas fases cuánticas de la materia, las cuales dieron a la comunidad científica casi 50 años de investigación para descifrar la física detrás de estos dos fenómenos. Actualmente las técnicas de enfriamiento se han modernizado de manera increíble logrando alcanzar temperaturas del orden de nK. Además, se han desarrollado métodos de manipulación atómica que permiten realizar un estudio más profundo de los sistemas cuánticos. En particular en el año 2015 se reportó [6] la creación de un gas dipolar fermiónico $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$, en el cual es posible, vía un campo eléctrico variar la interacción dipolar entre las moléculas que componen al gas. Este escenario se percibe prometedor ya que la interacción dipolar($1/r^3$) al ser de largo alcance, en comparación con la interacción de Van der Waals($1/r^6$)², ofrecería nuevos temas de investigación. En esta tesis se estudió los estados estacionarios de dos moléculas del gas fermiónico $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ confinadas en dos capas planares con una estructura geométrica, en particular la existencia de un estado de Cooper de estas dos moléculas y de un estado ligado(dímero); además, de la dependencia de estos dos estados con la intensidad dipolar y con la energía individual de las moléculas. El estudio de la formación de pares de Cooper en sistemas bidimensionales está significativamente motivada en el contexto de la superconductividad de alta temperatura descubierta en 1986[3], donde se ha mostrado[3] que los electrones superconductores conducen en capas bidimensionales.

La organización de esta tesis comprende de 3 capítulos, el primero de ellos es introductorio, el segundo integra el modelo con el cual se abordó y el último de ellos presenta las conclusiones.

¹Llamados también par de Cooper(ver sección 3).

²Típica en arreglos moleculares

Explícitamente el capítulo 1 contiene 4 secciones, tal como puede verse en el siguiente mapa conceptual:



En la primera sección se hace un repaso de los conceptos de la dispersión cuántica de dos partículas con hincapié en las bajas energías, estos conceptos dan un mejor contexto a la sección 4 donde se aborda las técnicas de enfriamiento y manipulación atómica. La sección 2 incorpora definiciones y fundamentos concernientes al estado sólido; además, de los modelos de amarre fuerte y de Hubbard los cuales serán las herramientas principales al abordar el problema. En la sección 3 se introduce el formalismo de los pares de Cooper[1], en particular el procedimiento para obtener la energía Δ del par.

En el capítulo 2 se iniciará por discutir las motivaciones e interrogantes que dieron origen a la investigación; posteriormente, se introduce el modelo que describe el contexto en el cual toda la discusión siguiente tiene lugar. Tras el modelo se plantea el formalismo y se derivan las ecuaciones que describan los estados estacionarios de las dos moléculas en el gas. En las

secciones 3 y 4 se abordarán los dos problemas centrales.

Capítulo 2	{	Sección 1: Modelo	
	{	Sección 2: Formalismo	
	{	Sección 3: Estados ligados	{
	{	Sección 4: Problema de Cooper	{
			{ Red cuadrada { Red triangular { Red cuadrada { Red triangular

Por último en el capítulo 3 se darán las conclusiones y comentarios finales del trabajo realizado.

capítulo 3 { Conclusiones

Es importante enfatizar que si bien el capítulo 1 constituye una introducción al problema que se abordará en esta tesis, incluye además de los fundamentos, la determinación de las energías de una partícula en un cristal en 2D dentro de la aproximación de amarre fuerte.

1.1. Dispersión

En esta sección se presentarán conceptos que conciernen a la dispersión cuántica de dos partículas, estos conceptos serán útiles al abordar la sección 4 de materia de ultrafría y manipulación atómica.

1.1.1. Colisión de dos partículas

La colisión de un par de partículas está determinada por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varepsilon \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (1.1)$$

Donde se ha indexado las coordenadas de las partículas con 1 y 2, además, se ha supuesto que la interacción entre las dos partículas es central. Es conveniente hacer una transformación a coordenadas de centro de masa y coordenada relativa del par, definidas de la siguiente manera:

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (1.2a)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (1.2b)$$

La ecuación (1.1) se transforma a[7]:

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) \right] \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \varepsilon \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (1.3)$$

Con $M = m_1 + m_2$ la masa total, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ la masa reducida, \mathbf{P} el momento de centro de masa y \mathbf{p} el momento relativo definidos como:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2. \quad (1.4a)$$

$$\mathbf{p} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}. \quad (1.4b)$$

Es posible proponer una separación de variables en la función $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ de la forma $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$, al sustituir esta propuesta en (1.3) resulta el siguiente par de ecuaciones:

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{P}}}{2M} \right) \Phi(\mathbf{R}) = \varepsilon_R \Phi(\mathbf{R}). \quad (1.5a)$$

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}}{2\mu} + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon_r \psi(\mathbf{r}). \quad (1.5b)$$

Donde por conservación de energía debe cumplirse que $\varepsilon = \varepsilon_R + \varepsilon_r$. La primera ecuación de (1.5) determina que el movimiento del centro de masa está descrito por una función de partícula libre, para analizar la segunda, es necesario conocer el potencial de interacción $V(r)$; sin embargo, puede notarse que el problema es equivalente al de una partícula de masa μ en presencia del potencial $V(r)$ ³:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(r) \right] \psi(r) = \varepsilon \psi(r). \quad (1.6)$$

En la región asintótica ($r \rightarrow \infty$) la solución de (1.6) tiene la forma:

$$\psi_k(r, \theta) \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.7)$$

Donde se ha supuesto que la colisión tuvo lugar en el eje z y es elástica con momento k . Esta función de onda describe una onda plana(no dispersada) mas una onda esférica con amplitud⁴ $f(\theta)$ (ver figura 3.1).

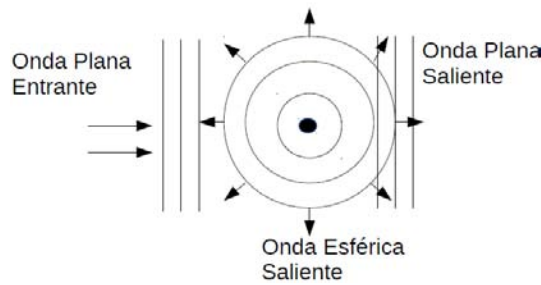


Figura 1.2: Bosquejo de la función de onda ψ_k .

La amplitud de dispersión se relaciona con la sección eficaz de dispersión σ como:

$$\sigma = \int_{\Omega} |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (1.8)$$

³Por simplicidad se removerá los subíndices de la ecuación (1.5).

⁴Llamada amplitud de dispersión

Donde en términos generales la sección eficaz de dispersión se define como el coeficiente de proporcionalidad entre el flujo de partículas dispersadas y las incidentes que recibe un detector colocado a una distancia r del centro dispersor y que subtiene un ángulo sólido $d\Omega$.

1.1.2. Descomposición en ondas parciales

Al proponer la solución de (1.6) como una separación de variables entre la parte angular y la radial $\psi(\mathbf{r}) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ se obtiene la siguiente ecuación para la parte radial[7]:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - U(r) \right] R_{kl}(r) = 0. \quad (1.9)$$

Donde:

$$k^2 = \frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2}. \quad (1.10a)$$

$$U(r) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}. \quad (1.10b)$$

En la región asintótica el potencial de interacción entre las partículas puede despreciarse⁵ quedando la ecuación (1.9) como:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{kl}(r) = 0. \quad (1.11)$$

Que es una ecuación de tipo Esférica de Bessel, cuya solución general es:

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l y_l(kr). \quad (1.12)$$

Siendo j_l y y_l las funciones esféricas de Bessel de primera y segunda especie y cuyo comportamiento asintótico($kr \gg 1$) es de la siguiente forma[8]:

$$j_{kl}(kr) \simeq \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right). \quad (1.13a)$$

$$y_{kl}(kr) \simeq -\frac{1}{kr} \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right). \quad (1.13b)$$

Sustituyendo estas ecuaciones en (1.12) se obtiene:

$$R_{kl} \simeq A_l \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) - B_l \frac{1}{kr} \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) = \frac{C_l}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right). \quad (1.14)$$

En la última igualdad se ha introducido el corrimiento de fase δ_l , cuya relación con los coeficientes A_l y B_l es:

$$A_l = C_l \sin(\delta_l). \quad (1.15a)$$

$$B_l = -C_l \cos(\delta_l). \quad (1.15b)$$

⁵En esta aproximación se está suponiendo que el potencial de interacción no es coulombiano(largo alcance).

Expresando la solución de (1.6) como una superposición de todos los valores de l :

$$\psi_k(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) P_l(\cos(\theta)) \quad (1.16)$$

Desarrollando el $\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$ en exponenciales imaginarias, la ecuación anterior toma la forma:

$$\begin{aligned} \psi_k(r, \theta) = & e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{kr} \left(\frac{e^{-\frac{il\pi}{2}} e^{i\delta_l}}{2i} \right) P_l(\cos(\theta)) - \\ & e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{kr} \left(\frac{e^{\frac{il\pi}{2}} e^{-i\delta_l}}{2i} \right) P_l(\cos(\theta)). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Suponemos que la amplitud de dispersión puede expresarse en un desarrollo de polinomios de Legendre:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} D_l P_l(\cos(\theta)). \quad (1.18)$$

Para obtener la descomposición en ondas parciales de $f(\theta)$ y ψ_k , necesitamos encontrar las incógnitas D_l y C_l , para ello se sustituye la ecuación (1.18) y la siguiente la expansión asintótica de la onda plana[8] en la expresión asintótica (1.7):

$$e^{ikz} \simeq e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} e^{-\frac{il\pi}{2}} P_l(\cos(\theta)) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} e^{\frac{il\pi}{2}} P_l(\cos(\theta)). \quad (1.19)$$

De donde se obtiene:

$$\psi_k(r, \theta) = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} \left[e^{-\frac{il\pi}{2}} + \frac{D_l}{r} \right] P_l(\cos(\theta)) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} e^{\frac{il\pi}{2}} P_l(\cos(\theta)). \quad (1.20)$$

Comparando los términos de esta última ecuación con las de (1.17), obtenemos las siguientes expresiones para los coeficientes C_l y D_l :

$$C_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}. \quad (1.21a)$$

$$D_l = \frac{(2l+1)e^{i\delta_l}}{k} \sin(\delta_l). \quad (1.21b)$$

Sustituyendo en la expansión (1.18) de la amplitud de dispersión se obtiene:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos(\theta)). \quad (1.22)$$

Considerando (1.8) se obtiene la siguiente expresión para la sección eficaz de dispersión:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l). \quad (1.23)$$

Por último introduciremos el concepto de longitud de dispersión a , el cual como veremos caracteriza completamente la dispersión a bajas energías ($\mathbf{k} \approx 0$) también llamada aproximación

de onda s . En este régimen, la contribución dominante en las cantidades físicas que se han expresado como un desarrollo de ondas parciales, se debe al término $l = 0$ [9]. Esta consideración determina que el corrimiento de fase mas importante es δ_0 , el cual, en un estudio mas profundo de la ecuación de Schrödinger está dado por[9] :

$$\tan(\delta_0) \approx -k \int_0^\infty [r j_0(kr)]^2 U(r) dr = -ka. \quad (1.24)$$

Donde a viene dada por la integral del potencial. Se puede verificar que a tiene dimensiones de longitud, he ahí la razón por la cual se le llama longitud de dispersión. Debido a que $\delta_0 \simeq 0$ podemos aproximar $\tan(\delta_0) \simeq \sin(\delta_0) \simeq \delta_0$ resultado en la siguiente relación:

$$\delta_0 = -ka \quad (1.25)$$

Sustituyendo esta última expresión en la ecuación para la amplitud de dispersión (1.22) obtenemos:

$$f \approx \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin(\delta_0) \approx \frac{\delta_0}{k} e^{i\delta_0}. \quad (1.26)$$

Puesto que $\delta_0 \simeq 0$, como una buena aproximación hacemos $e^{i\delta_0} \simeq 1$ resultando en la siguiente descripción de la amplitud de dispersión a bajas energías:

$$f \approx -a \quad (1.27)$$

Una constante que viene dada por la integral en (1.24). Con esta definición podemos expresar la sección eficaz de dispersión como:

$$\sigma = 4\pi a^2, \quad (1.28)$$

similar a una esfera sólida en la dispersión clásica; sin embargo, en la ecuación (1.28) a no representa el radio de una esfera, sino contiene información de la interacción y el acoplamiento de la solución asintótica $\tan(\delta_0) = -A_0/B_0$.

1.1.3. Dispersión en multicanal

Para concluir con nuestra discusión de la dispersión cuántica, es importante reconocer que en una colisión de dos partículas es posible obtener más de un resultado, es decir la colisión puede resultar en diferentes estados cuánticos, que por supuesto son compatibles con la conservación de energía, momento, etc. Por ejemplo, en la física de partículas se estudia la colisión de un pión π^- y un protón p , se sabe que este proceso dispersivo puede dar lugar a 3 posibles resultado tal como se muestra[10]:

$$\pi^- + p \rightarrow \begin{cases} \pi^- + p & \text{Elástico} \\ K_0 + \Lambda_0 & \text{Inelástico} \\ \pi^- + \pi^0 + \pi^0 + p & \text{Inelástico} \end{cases} \quad (1.29)$$

A cada estado final de la colisión lo llamamos canal de dispersión y a un proceso con más de un canal de dispersión lo denominamos como dispersión multicanal, el proceso (1.29) es un ejemplo de colisión con 3 canales. La manifestación de los canales dispersivos está originada en la existencia de estructura interna en las partículas que colisionan; así para ciertos valores en la energía inicial, la dispersión da lugar a un proceso inelástico, en el cual la formación de estados ligados o como en el ejemplo (1.29) la aniquilación-creación de nuevas partículas es posible.

1.2. Estructura Sólida

El objetivo de esta sección es presentar en forma breve los conceptos y definiciones pertenecientes al estado sólido, que se utilizarán al abordar el problema de los pares de Cooper en una red óptica, cabe aclarar que aunque estos conceptos surgieron en el estudio de las estructuras cristalinas de los sólidos, pueden ser utilizados en el análisis de estructuras cristalinas artificiales, es decir aquellas que son creadas por el patrón de interferencia de luz láser.

1.2.1. Red de Bravais

Uno de los conceptos más importantes en la descripción de los sólidos cristalinos es el de la red de Bravais⁶, ya que ésta especifica el arreglo periódico con el que están organizados las unidades del cristal. Las unidades pueden estar constituidas desde un solo átomo, un grupo de átomos, iones, etc.

Se define entonces a la red de Bravais en 3D como el conjunto de puntos que están organizados y orientados de tal manera que la estructura cristalina se observa idéntica desde cualquier punto. Cada punto en la red puede caracterizarse mediante un vector de posición \mathbf{R} de la forma:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3. \quad (1.30)$$

Donde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 son 3 vectores linealmente independientes cuya magnitud $|\mathbf{a}_i| = a_i$ llamada constante de red es la distancia entre sitios adyacentes, a estos vectores se les conoce como vectores primitivos; n_1 , n_2 y n_3 son números enteros. Nótese que la definición hace referencia a una red 3D, el análogo a una red en 2D solo necesita de dos vectores primitivos. En la figura 1.3 se muestran las redes de Bravais en 2D compatibles con las simetrías de rotación, traslación e inversión y que por lo tanto definen las posibles estructuras cristalinas en 2D.

⁶También llamada red real.

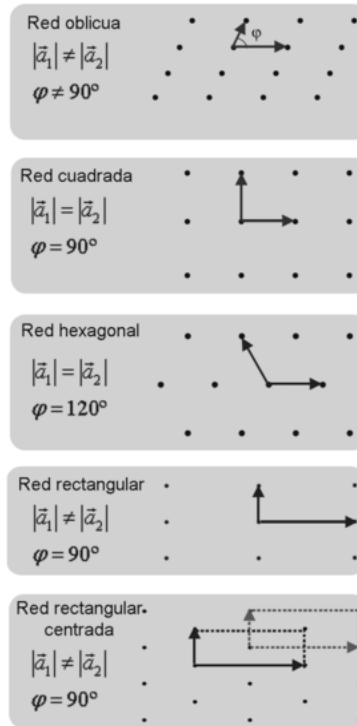


Figura 1.3: Ejemplos de redes de Bravais en 2D.

En este trabajo se consideró una red cuadrada y una triangular o triangular. En el caso de la cuadrada los vectores primitivos que definen la red son:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a(1, 0). \\ \mathbf{a}_2 &= a(0, 1). \end{aligned} \tag{1.31}$$

Para una red hexagonal los vectores primitivos estan dados de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= a(1, 0). \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3}). \end{aligned} \tag{1.32}$$

Se llama celda primitiva a una región del espacio que contenga una sola unidad en su interior y que al ser trasladada por todos los vectores \mathbf{R} de la red de Bravais llena todo el espacio sin traslaparse. Existen varias formas para definir o identificar una celda primitiva para una red Bravais dada, una de ellas es la celda de Wigner-Seitz la cual se construye como la región del espacio mas cercana a una unidad que a cualquier otra en el sólido. En la figura 1.4 se observa la celda de Wigner-Seitz en una red triangular.

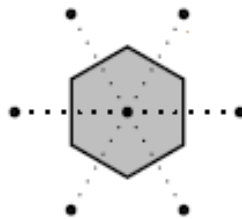


Figura 1.4: Ejemplo de Celda de Wigner-Seitz en una red triangular.

La condición de equivalencia entre los puntos de la red obliga a que ésta tenga una extensión infinita, sin embargo uno puede relajar esta condición si considera sólidos suficientemente grandes para los cuales la gran mayoría de puntos se encuentran lejos de la frontera; Se construye entonces una red finita de $\Omega = (2N_1 + 1)(2N_2 + 1)(2N_3 + 1)$ sitios considerando que los enteros n_1, n_2 y n_3 en (1.30) toman los valores $-N_i \leq n_i \leq N_i$ con $i \in \{1, 2, 3\}$. Los resultados que se mostrarán en el siguiente capítulo toman en cuenta esta consideración; es decir, se despreciarán los efectos de frontera.

1.2.2. Red recíproca

La periodicidad que caracteriza la estructura de un sólido cristalino trasciende también en algunas de sus propiedades físicas, es entonces conveniente introducir los conceptos de vector y espacio recíproco que serán útiles en la descripción física de los sólidos.

Consideremos el conjunto de vectores \mathbf{R} que definen una red real y una función de onda plana $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ es claro que no necesariamente cualquier vector de onda \mathbf{k} tendrá la periodicidad de la red,⁷ pero para ciertas elecciones de \mathbf{k} se cumple la condición:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} \Rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1. \quad (1.33)$$

Dada una red de Bravais llamamos vector recíproco a un vector de onda plana \mathbf{k} que cumpla con la condición (1.33) para todo \mathbf{R} de la red de Bravais correspondiente, al conjunto de todos los vectores recíprocos se le conoce como red recíproca.

Al igual que en la red de Bravais podemos suponer que cada vector recíproco se escribe de la forma:

$$\mathbf{k} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3 \quad (1.34)$$

Donde m_1, m_2, m_3 son enteros y $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ y \mathbf{b}_3 son los generadores de la red recíproca. Para que la ecuación (1.33) se cumpla debe tenerse:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = 2\pi m \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (1.35)$$

La cual se satisface si se exige lo siguiente:

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (1.36)$$

Un conjunto de 3 vectores linealmente independientes que cumplan con la condición (1.36) generan la red recíproca de la correspondiente red de Bravais.

De la misma forma que en la red real se definió la celda de Wigner-Seitz se define en el espacio recíproco y debido a su importancia se le conoce también por el nombre de primera zona de Brillouin.

A continuación construiremos la primera zona de Brillouin para la red cuadrada y la red triangular. Puede verificarse que para el caso de la red cuadrada los vectores recíprocos que satisfacen la condición (1.36) son:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(1, 0). \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}(0, 1). \end{aligned} \quad (1.37)$$

⁷Nos referimos a que $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ para todo \mathbf{R} en la red de Bravais.

Los cuales generan una red recíproca cuadrada, con una distancia a primeros vecinos de $|\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = \frac{2\pi}{a}$. De acuerdo a la definición que se dio de primera zona de Brillouin, procedemos a construirla trazando rectas que unan el sitio en cuestión y sus primeros vecinos, bisectamos dichas rectas y el área que encierran las 4 bisectrices es la primera zona de Brillouin, en la figura 1.5 puede observarse esta construcción.

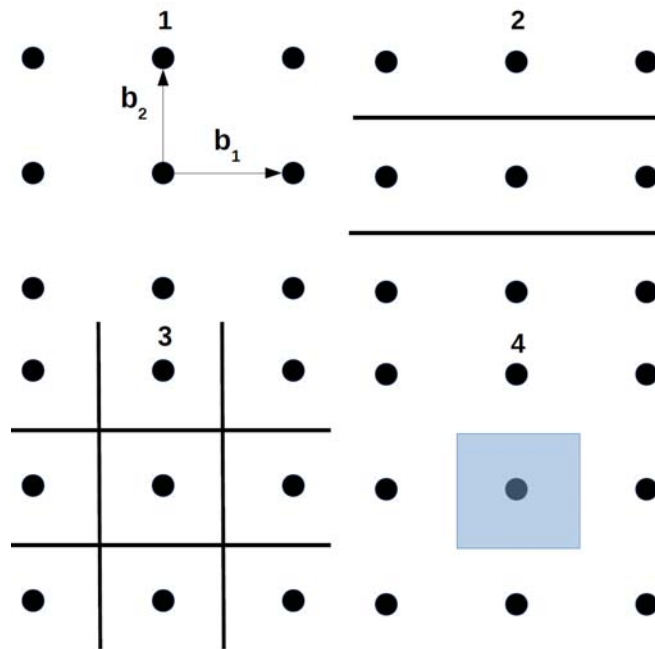


Figura 1.5: Construcción de la primera zona de Brillouin. (1) Red cuadrada. (2) Se bisecta las líneas que unen a los primeros vecinos que conecta el vector \mathbf{b}_2 y $-\mathbf{b}_2$. (3) Se bisectan las líneas que unen a los primeros vecinos que conecta los vectores \mathbf{b}_1 y $-\mathbf{b}_1$. (4) El área encerrada por las 4 bisectrices es la primera zona de Brillouin.

Los vectores recíprocos para la red triangular (1.32) son:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right). \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right). \end{aligned} \tag{1.38}$$

Estos vectores generan una red recíproca triangular con la característica de estar rotada por un ángulo $\theta = 60^\circ$ con respecto a la red real que se muestra en la figura 1.3. De la misma forma que en la red cuadrada, trazamos rectas del sitio en cuestión a sus primeros vecinos, que en este caso son 6, bisectamos dichas rectas e identificamos al área que encierran como la primera zona de Brillouin. En la figura 1.6 se muestra la geometría de las celdas de la red recíproca y la construcción de la primera zona de Brillouin de una red triangular.

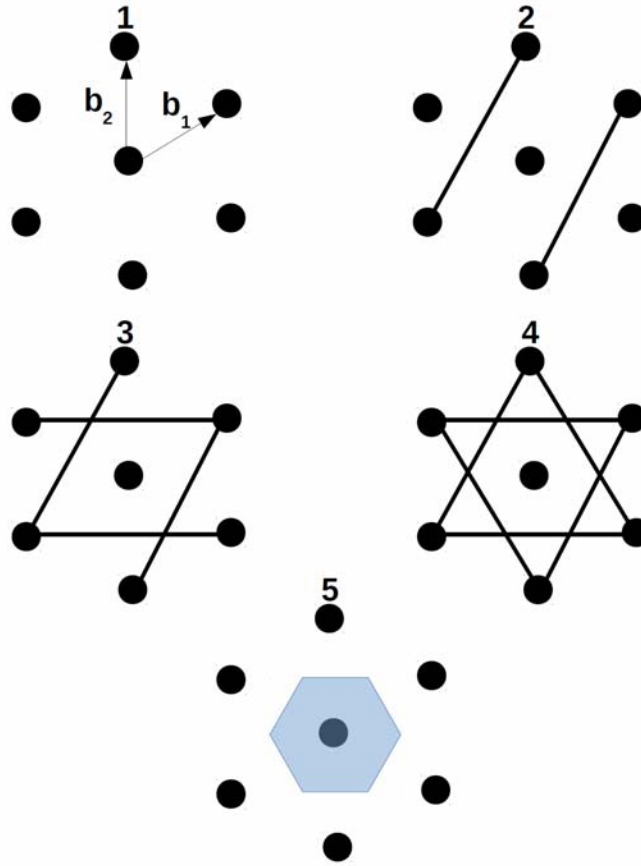


Figura 1.6: Construcción de la primera zona de Brillouin. (1) Red triangular. (2) Se bisecta las líneas que unen a los primeros vecinos que conecta el vector $\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1$ y $\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2$. (3) Se bisectan las líneas que unen a los primeros vecinos que conecta los vectores \mathbf{b}_2 y $-\mathbf{b}_2$. (4) Se bisecta las líneas que unen a los primeros vecinos que conecta el vector \mathbf{b}_1 y $-\mathbf{b}_1$. (5) El área encerrada por las 6 bisectrices es la primera zona de Brillouin.

1.2.3. Potenciales periódicos

En la aproximación de electrón independiente y red adiabática[11] se desprecia la interacción entre los electrones y el movimiento por lo general oscilatorio de la red. Debido a esta última aproximación, al estar fijas las unidades, permanecen en el arreglo periódico dado por la red real, esto permite considerar que el potencial $U(\mathbf{r})$ que contiene la interacción entre un electrón y la red tenga la periodicidad de la red de Bravais en cuestión:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}). \quad (1.39)$$

Usando la aproximación de electrón independiente, el problema se reduce a resolver la ecuación de Schrödinger de un electrón con la propiedad (1.39) en el potencial $U(\mathbf{r})$:

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi = \varepsilon\psi. \quad (1.40)$$

Aquellos electrones que satisfacen esta última ecuación son conocidos como electrones de Bloch, la función de onda⁸ $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ que los describe puede escribirse[11] como el producto de

⁸También conocida como función de Bloch

una onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ con \mathbf{k} vector recíproco, la cual reproduce el comportamiento de electrones libres (ver sección 1.3) y una función $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ periódica en la red de Bravais $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ la cual toma en cuenta los efectos del potencial $U(\mathbf{r})$ en la función de onda plana:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.41)$$

Para concluir esta discusión hacemos 4 observaciones sobre la función de Bloch (1.41):

1. La función $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red en cuestión:

$$\begin{aligned} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.42)$$

Ya que al ser \mathbf{k} un vector de la red recíproca cumple con la condición (1.33) y $u_{n\mathbf{k}}$ tiene por construcción la periodicidad de la red.

2. El vector de onda \mathbf{k} introducido en la función de Bloch no representa (como en el caso de partícula libre) el momento de la partícula en cuestión, esta afirmación puede comprobarse notando que (1.41) no es una eigenfunción del operador de momento $\hat{p} = -i\hbar\nabla$:

$$-i\hbar\nabla\psi_{n\mathbf{k}} = -i\hbar\nabla(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})) = \hbar\mathbf{k}\psi_{n\mathbf{k}} - i\hbar e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla u_{n\mathbf{k}}. \quad (1.43)$$

Que por lo general no es una constante multiplicada por $\psi_{n\mathbf{k}}$, debido a este hecho al vector \mathbf{k} en la función de Bloch se le conoce como momento del cristal.

3. Es posible restringir el momento del cristal \mathbf{k} a la primera zona de Brillouin, ya que cualquier vector \mathbf{G} fuera de la primera zona puede escribirse como $\mathbf{G} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ con \mathbf{k} en la primera zona y \mathbf{k}' un vector recíproco, la función de onda $\psi_{n\mathbf{G}}$ se define como:

$$\psi_{n\mathbf{G}} = e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}+\mathbf{k}'} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}. \quad (1.44)$$

Donde se ha definido $u_{n,\mathbf{k}+\mathbf{k}'} = e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}$.

4. El subíndice n en la función de Bloch se debe que para \mathbf{k} fijo, al sustituirse (1.41) en (1.40) uno obtiene la siguiente ecuación de eigenvalores para $u_{\mathbf{k}}$:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{i}\nabla + \mathbf{k} \right)^2 + U(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}. \quad (1.45)$$

Con la condición de periodicidad $u(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{r})$, la ecuación (1.45) es un problema Hermitiano de eigenvalores, del cual se obtiene un espectro discreto enumerado con el subíndice n , también conocido como índice de banda. La introducción del índice de banda es la característica más importante del problema de potenciales periódicos.

1.2.4. Amarre fuerte

Por simplicidad consideremos que las unidades del sólido están formadas por un solo átomo y que ϕ_n son las eigenfunciones del problema atómico $\hat{H}_{at}\phi_n = \varepsilon_n\phi_n$. La presencia del resto

de átomos en el sólido introduce modificaciones en el Hamiltoniano H_{at} esta modificación la denotaremos por⁹ $\Delta U(\mathbf{r})$, se define entonces el Hamiltoniano del cristal \hat{H} como:

$$\hat{H} = \hat{H}_{at} + \Delta U(\mathbf{r}). \quad (1.46)$$

Como todo problema cuántico el objetivo es encontrar las eigenfunciones (que en este caso son de tipo Bloch) y eigenvalores del problema:

$$\hat{H}\psi_{n\mathbf{k}} = (\hat{H}_{at} + \Delta U(\mathbf{r}))\psi_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}. \quad (1.47)$$

Una solución exacta de (1.47) para una corrección distinta $\Delta U(\mathbf{r})$ de una constante no ha sido posible encontrarla, sin embargo, es posible encontrar una expresión aproximada para la energía $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ para aquellos electrones fuertemente ligados a los átomos, ya que es de esperarse que la función de onda que los describa esté localizada alrededor de los átomos. Se propone entonces aproximar la función de Bloch $\psi_{n\mathbf{k}}$ como una combinación lineal de orbitales atómicos(LCAO) ϕ_n centrados en la posición \mathbf{R}_i de los átomos. La combinación lineal que satisface la periodicidad Bloch (1.42) es la representación de Wannier[11]:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (1.48)$$

Antes de sustituir (1.48) en (1.47), multipliquemos (1.47) por la función de onda $\phi_n^*(\mathbf{r})$ e integremos en todo el espacio, haciendo uso del hecho que:

$$\int \phi_n^*(\mathbf{r}) H_{at} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r = \int [H_{at} \phi_n(\mathbf{r})]^* \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r = \varepsilon_n \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (1.49)$$

Se obtiene:

$$(\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_n) \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r = \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (1.50)$$

Resta introducir la expansión (1.48) y evaluar las integrales. La integral izquierda de (1.50) es:

$$\begin{aligned} \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d^3 r \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \left[1 + \sum_{\mathbf{R}_i \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d^3 r \right] \end{aligned} \quad (1.51)$$

La integral del lado derecho de (1.50) es:

$$\begin{aligned} \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3 r &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d^3 r \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \left[\int \Delta U(\mathbf{r}) |\phi_n(\mathbf{r})|^2 d^3 r + \sum_{\mathbf{R}_i \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d^3 r \right]. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Finalmente se encuentra la siguiente expresión para la energía $\varepsilon_n(\mathbf{k})$:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{v_n + \sum_{\mathbf{R}_i \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \gamma_n^i}{1 + \sum_{\mathbf{R}_i \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d^3 r}. \quad (1.53)$$

⁹La corrección es periódica en la red $\Delta U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \Delta U(\mathbf{r})$

Donde se ha hecho las siguientes definiciones:

$$\gamma_n^j = \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d^3 r. \quad (1.54a)$$

$$v_n = \int \Delta U(\mathbf{r}) |\phi_n(\mathbf{r})|^2 d^3 r. \quad (1.54b)$$

Consideramos ahora que debido al amarre fuerte al que están sometidos los electrones la movilidad que tienen entre los sitios es relativamente pequeña, lo cual se traduce en un traslape despreciable de los orbitales. Tomando en cuenta este último enunciado la ecuación (1.53) se reduce a:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + v_n + \gamma_n \sum_{\langle \mathbf{R} \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \quad (1.55)$$

La notación $\langle \mathbf{R} \rangle$ indica que la suma corre a primeros vecinos del sitio donde se ha fijado el origen $\mathbf{R} = 0$. La aproximación de amarre fuerte es estrictamente aplicable para la banda s, un tratamiento para bandas superiores p,d,f necesitaría introducir la degeneración y transiciones entre diferentes bandas, este tipo de consideraciones no se discutirán aquí, por lo que nos limitaremos a banda s. Esta última estimación nos permite remover el subíndice de banda en (1.55) y considerar solamente el último término¹⁰, el cual contiene la información de la geometría de la red.

Para una red cuadrada (ver figura 1.5) los primeros vecinos tienen las siguientes posiciones

$$\langle \mathbf{R} \rangle = a(1, 0), a(0, 1), a(-1, 0), a(0, -1). \quad (1.56)$$

Siendo a la constante de red, introduciendo (1.56) en (1.55) obtenemos la siguiente relación de dispersión:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}} &= \gamma(e^{ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_x a} + e^{-ik_y a}) \\ &= 2\gamma(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)). \end{aligned} \quad (1.57)$$

En una red triangular (ver figura 1.6) son 6 primeros vecinos, cuyas posiciones son:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{R} \rangle &= -\frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), a(1, 0) \\ &\quad \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3}), a(-1, 0). \end{aligned} \quad (1.58)$$

De los cuales se obtiene la relación de dispersión:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}} &= \gamma(e^{-ik_x a/2 - ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik_x a/2 - ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a} \\ &\quad + e^{ik_x a/2 + ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a/2 + ik_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik_x a}) \\ &= 2\gamma \left[\cos(k_x a) + 2 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (1.59)$$

¹⁰El cual llamaremos relación de dispersión y lo denotaremos como $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

1.2.5. Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard considera al sólido como un arreglo de unidades situadas en una posición fija¹¹ \mathbf{i} con electrones que al tener energía cinética disponible o por efecto túnel pueden saltar de un sitio \mathbf{i} a otro \mathbf{j} costándole una energía t_{ij} en el proceso. En este último enunciado y de aquí en adelante se tomará en cuenta solo aquellos saltos pertenecientes a la misma banda s . En la figura 1.7 se muestra una representación esquemática de los saltos de los electrones en la red.

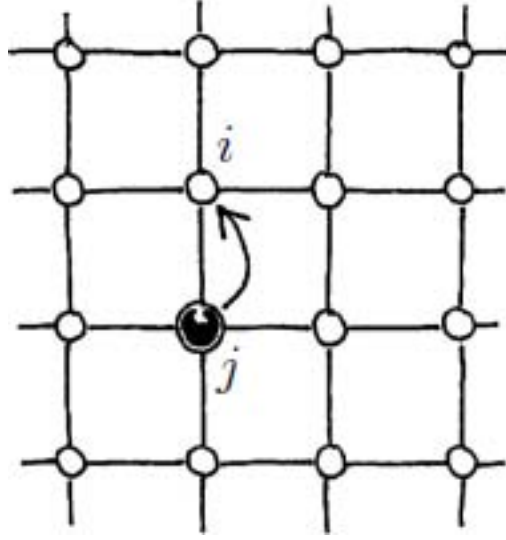


Figura 1.7: Ejemplificación de saltos en la red.

Del formalismo de la mecánica cuántica[7] se sabe que la relación de completéz en la base de posición $|\mathbf{r}\rangle$ es $\int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = \mathbf{1}$, en la red se considera una cuantización del espacio dada por la posición de los sitios \mathbf{i} resultando en una relación de completéz:

$$\sum_{\mathbf{i}} |\mathbf{i}\rangle \langle \mathbf{i}| = \mathbf{1}. \quad (1.60)$$

La suma (1.60) corre sobre todos los sitios de la red en cuestión. Recordando también que un operador \hat{A} en una base discreta $|m\rangle$ puede escribirse como $\hat{A} = \sum_{n,m} \langle m|\hat{A}|n\rangle |m\rangle \langle n|$, podemos escribir el Hamiltoniano \hat{H}_0 que describe los saltos de los electrones en los sitios de la red en la base¹² $\{|\mathbf{i}\rangle\}$:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} \langle \mathbf{i}|\hat{H}_0|\mathbf{j}\rangle |\mathbf{i}\rangle \langle \mathbf{j}| = - \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} t_{ij} |\mathbf{i}\rangle \langle \mathbf{j}|. \quad (1.61)$$

Donde $\langle \mathbf{i}|\hat{H}_0|\mathbf{j}\rangle = -t_{ij}$ el signo menos corresponde al costo energético que le toma al electrón en realizar el salto de un sitio a otro.

En la aproximación de Amarre fuerte[12], los electrones están fuertemente ligados resultando en una probabilidad de tunelaje despreciable para sitios distantes, permitiendo considerar como dominante los saltos a los sitios vecinos al electrón. Esta aproximación posibilita reducir la suma de (1.61) a primeros vecinos(denotado con $\langle \mathbf{i},\mathbf{j} \rangle$) cuyas posiciones dependen de la

¹¹Para una red de Bravais, \mathbf{i} es un punto de la red, definido por los vectores \mathbf{R} de Bravais.

¹²Formalmente este Hamiltoniano se escribe en segunda cuantización como $\hat{H}_0 = - \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} t_{ij} \hat{a}_{\mathbf{i}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{j}}$

geometría de la red; por último, si se considera que los saltos son isotrópicos el costo en la energía t_{ij} es igual $t_{ij} = t$ para cada primer vecino que el electrón tenga. Tomando en cuenta este enunciado podemos reescribir la ecuación (1.61) como:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} |\mathbf{i}\rangle \langle \mathbf{j}|. \quad (1.62)$$

Es conveniente mostrar que la ecuación (1.62) es consistente con la aproximación de amarre fuerte vista en la sección anterior. Para ello expandemos la función $\phi(\mathbf{r})$ en términos de la base $\{|\mathbf{i}\rangle\}$:

$$|\phi\rangle = \sum_{\mathbf{m}} \phi(\mathbf{m}) |\mathbf{m}\rangle. \quad (1.63)$$

Y exigimos que $|\phi\rangle$ sea solución de la ecuación de Schrödinger $\hat{H}_0 |\phi\rangle = \varepsilon |\phi\rangle$ con \hat{H}_0 en (1.62). Al hacer esto se obtiene la siguiente ecuación:

$$-t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \phi(\mathbf{j}) |\mathbf{i}\rangle = \varepsilon \sum_{\mathbf{m}} \phi(\mathbf{m}) |\mathbf{m}\rangle. \quad (1.64)$$

Haciendo el producto con el bra $\langle \mathbf{n}|$:

$$-t \sum_{\langle \mathbf{j} \rangle_n} \phi(\mathbf{j}) = \varepsilon \phi(\mathbf{n}). \quad (1.65)$$

La notación $\langle \mathbf{j} \rangle_n$ fija el sitio \mathbf{n} y corre sobre los primeros vecinos de este último. Lo siguiente es hacer la propuesta de Bloch (1.41) en los coeficientes $\phi(\mathbf{j})$:

$$\phi(\mathbf{j}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{j}). \quad (1.66)$$

Sustituyendo esta última ecuación en (1.65) y eliminando la dependencia de $u_{\mathbf{k}}$ al multiplicar por $u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_i)$ y sumar sobre todos los sitios de la red $\sum_i u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_i) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_i) = 1$. Se obtiene la siguiente ecuación para la energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t \sum_{\langle \mathbf{j} \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}}. \quad (1.67)$$

De donde para la red cuadrada uno obtiene:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad (1.68)$$

Notesé la similitud con la ecuación (1.57), de hecho puede mostrarse[13] la relación que existe entre el coeficiente t y γ . En la figura 1.8 se muestran los contornos de la relación de dispersión (1.68) en la primera zona de Brillouin, es importante notar que existen contornos cerrados y contornos abiertos. De acuerdo a (1.68) la energía que un electrón puede tener en el esquema reducido[11], es decir con el vector \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin está en el intervalo $\varepsilon_{\mathbf{k}}/t \in [-4, 4]$.

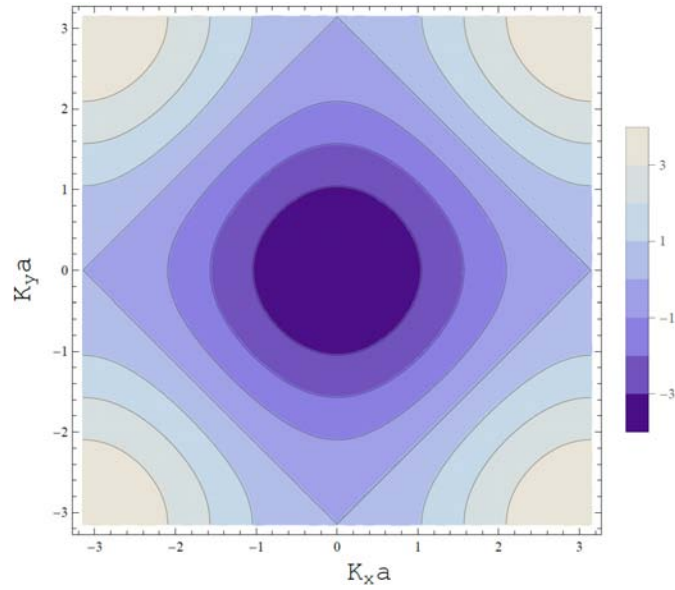


Figura 1.8: Se muestra la gráfica de contorno de la relación de dispersión (1.68) en la primera zona de Brillouin $(k_x, k_y) \in [-\pi/a, \pi/a] \times [-\pi/a, \pi/a]$ para una red cuadrada.

Para la geometría triangular se llega a la siguiente relación de dispersión:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \left[\cos(k_x a) + 2 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_y a}{2}\right) \right] \quad (1.69)$$

En la figura 1.9 se muestra los contornos de la ecuación (1.69), podemos observar que solo existen contornos cerrados y que la energía en el esquema reducido está en el intervalo $\epsilon_{\mathbf{k}}/t \in [-6, 3]$.

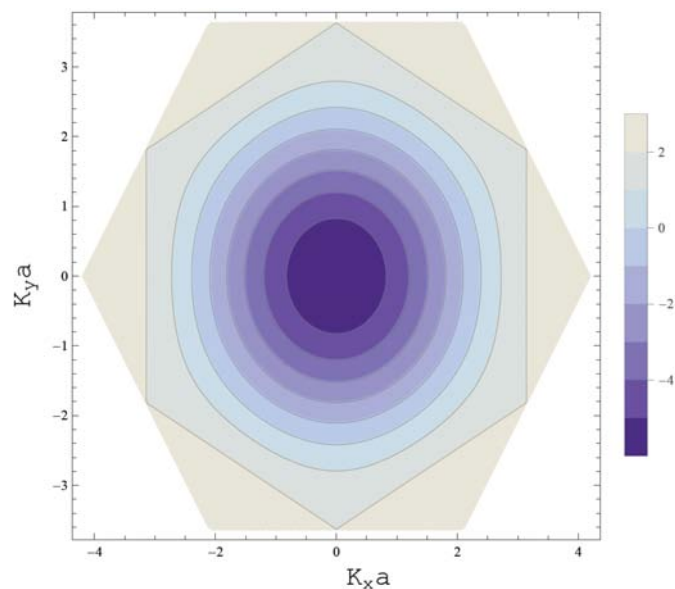


Figura 1.9: Se muestra la gráfica de contorno de la relación de dispersión (1.69) en la primera zona de Brillouin (ver figura 1.6) para una red triangular.

Dada las relaciones de dispersión es posible obtener la masa efectiva de una partícula, la cual se define como la masa que aparenta tener la partícula en un cristal según el modelo semiclásico de transporte[11]. Formalmente la masa efectiva es una matriz \mathbf{M} , cuyas componentes pueden calcularse de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\mathbf{M}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}. \quad (1.70)$$

En ambas geometrías estudiadas la matriz de masa efectiva es diagonal, su forma explícita es:

$$\mathbf{M}_c = \frac{\hbar^2}{2ta^2} \mathbf{I}. \quad \mathbf{M}_h = \frac{\hbar^2}{3ta^2} \mathbf{I}. \quad (1.71)$$

Donde los subíndices c y h corresponden a la red cuadrada y triangular respectivamente, la matriz \mathbf{I} es la matriz identidad de 2×2 . La simplicidad de la matriz \mathbf{M} permite reducir su definición a una simple constante que denotaremos como m_{eff} y cuyo valor es igual al promedio de las entradas en la diagonal de la matriz \mathbf{M} . Se obtiene entonces lo siguiente:

$$m_{eff} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2ta^2} & \text{Red cuadrada} \\ \frac{\hbar^2}{3ta^2} & \text{Red triangular} \end{cases} \quad (1.72)$$

El concepto de masa efectiva se volverá abordar en el siguiente capítulo.

La generalización del Hamiltoniano (1.62) para dos electrones en dos capas diferentes es directa, si denotamos con $|x_i\rangle$ como la posición de una partícula y con $|y_i\rangle$ a la restante, (1.62) se generaliza a:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (|x_i\rangle \langle x_j| + |y_i\rangle \langle y_j|). \quad (1.73)$$

Además si estos dos electrones interactúan mediante un potencial $V(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, el sistema queda descrito por el Hamiltoniano \hat{H} :

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (|x_i\rangle \langle x_j| + |y_i\rangle \langle y_j|) + \sum_{i,j} V_{ij} |x_i y_j\rangle \langle x_i y_j|. \quad (1.74)$$

Esta última ecuación describe el modelo de Hubbard para dos partículas.¹³

Es importante enfatizar dos puntos importantes del modelo de Hubbard, uno de ellos es la introducción de primeros vecinos no afecta directamente al término en la interacción, esto se debe a que hasta ahora no se ha dicho nada de la forma funcional de $V(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, ya que este puede ser de largo alcance, introduciendo errores no despreciables si se considera primeros vecinos; o por el caso contrario es un potencial de contacto y un tratamiento a primeros vecinos es innecesario. El otro punto es la geometría de la red, distintas redes dan distintas posiciones de los primeros vecinos, obteniéndose contribuciones diferentes para cada geometría.

Hasta ahora se ha considerado a los electrones como aquellos que realizan los saltos entre los sitios de la red, no obstante, se ha mostrado[13] que el modelo de Hubbard describe significativamente bien los estados estacionarios de partículas en una red óptica, en este escenario son moléculas o átomos los que realizan los saltos entre los pozos de potencial que genera la red óptica, que ahora juegan el papel de los sitios de un sólido real.

¹³En el formalismo de la segunda cuantización el Hamiltoniano de Hubbard es $\hat{H} = -\sum_{i,j} t_{ij} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j) + \sum_{i,j} V_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{a}_i$

1.3. Problema de Cooper

En esta sección se presentará parte del formalismo del problema de Cooper[1]. Esta teoría fue desarrollada por Leon N. Cooper en 1957 en el contexto de la superconductividad del estado sólido. En términos generales consiste en como un par de fermiones que interactúan atractivamente en presencia de un sistema de fermiones ideales en el estado base (mar de Fermi) producen un estado con energía negativa respecto a 2 veces la energía de Fermi. El objetivo de esta sección es obtener una expresión para el valor de la energía Δ , asociada al par de fermiones; para ello se iniciará por considerar un sistema de fermiones ideales a temperatura $T = 0$ K, esto con el propósito de introducir algunos conceptos que se abordarán posteriormente.

1.3.1. Gas de Fermi

Consideremos un sistema de N fermiones con masa m , no interactuantes en 3D confinados en un cubo de longitud L y volumen $V = L^3$ a temperatura $T = 0$ K. Este sistema está descrito por el siguiente Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}). \quad (1.75)$$

Con V_{ext} como:

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{r} \in V \\ \infty & \text{si } \mathbf{r} \notin V \end{cases} \quad (1.76)$$

La construcción del estado base se consigue encontrando los niveles de energía del Hamiltoniano de un fermión (\hat{h}_i), para después llenar esto niveles de una manera consistente con el principio de exclusión de Pauli. Las soluciones de \hat{h} con condiciones periódicas en la frontera son de tipo partícula libre con los vectores de onda \mathbf{k} y los niveles de energía $\epsilon_{\mathbf{k}}$ dados de la siguiente forma:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.77a)$$

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \quad n_i \in \mathbb{Z}. \quad (1.77b)$$

Siendo k^2 la norma cuadrada del vector \mathbf{k} . Es conveniente introducir la noción de espacio \mathbf{k} , el cual está definido por 3 ejes cartesianos k_x , k_y y k_z que de acuerdo a (1.77b) cada vector de onda permitido tiene como proyección en los ejes un múltiplo entero de $2\pi/L$ y ocupa un volumen $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = (2\pi/L)^3$. Esta representación permite conocer la cantidad de estados de un fermión en una región Ω en el espacio k , simplemente haciendo el recíproco entre la región Ω y el volumen asociada a un estado de un fermión:

$$\frac{\Omega}{(2\pi/L)^3} = \frac{V\Omega}{8\pi^3}. \quad (1.78)$$

Equivalentemente, la cantidad de estados por unidad de volumen en el espacio \mathbf{k} es:

$$g(\mathbf{k}) = \frac{V}{8\pi^3}. \quad (1.79)$$

De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli como máximo dos fermiones con sus proyecciones de espín opuestas pueden ocupar el estado caracterizado por el vector de onda \mathbf{k} ¹⁴; por lo que uno comienza a construir el estado base de los N fermiones colocando dos de ellos en el estado con $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ y prosiguiendo el llenado de aquellos niveles de una partícula con menor energía que aún no están ocupados. La región en el espacio \mathbf{k} que forman los estados fermiónicos ocupados es indistinguible (como una buena aproximación cuando N es suficientemente grande) a una esfera sólida de radio k_F llamado radio de Fermi y volumen $\frac{4}{3}\pi k_F^3$ (ver figura 1.10). De acuerdo a la ecuación (1.78) el número de electrones N debe relacionarse con la cantidad de estados ocupados de la siguiente manera:

$$N = 2 \frac{4\pi k_F^3}{3} \frac{V}{8\pi^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V. \quad (1.80)$$

El factor 2 en la última ecuación toma en cuenta la multiplicidad del espín, de manera similar a la ecuación (1.79), se define la densidad de electrones n como el cociente entre la ecuación (1.80) y el volumen V real:

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (1.81)$$

A la superficie esférica de radio k_F se le conoce como esfera de Fermi y recibe especial atención ya que separa los estados ocupados de los desocupados. Los fermiones en esta superficie tienen la característica de tener la máxima energía posible de un fermión para el sistema en el estado base, también llamada energía de Fermi ε_F :

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \quad (1.82)$$

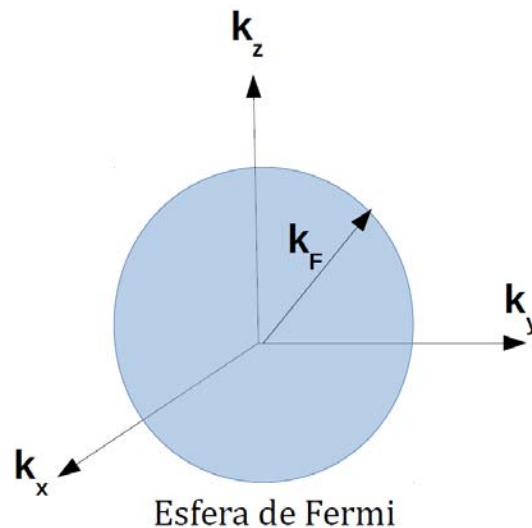


Figura 1.10: Representación esquemática de la esfera de Fermi en el espacio \mathbf{k} .

¹⁴Por simplicidad se ha supuesto que los fermiones tienen espín $s = 1/2$, para fermiones con un valor de espín diferente la degeneración es $2s + 1$.

1.3.2. Pares de Cooper

Supongamos ahora un sistema de fermiones ideales a temperatura absoluta $T = 0 \text{ K}$ y un par de fermiones adicionales que interactúan atractivamente a través de un potencial $V(r)$ donde r es la coordenada relativa, debido a el principio de exclusión de Pauli estos dos fermiones no podrán ocupar los estados dentro de la esfera de Fermi, es decir, si estos fueran ideales tendrían individualmente una energía mayor a la energía de Fermi; sin embargo, como se mostrará la interacción atractiva tendrá el efecto de reducir la energía del par por un valor $\Delta > 0$ con respecto a la energía de Fermi dando así lugar a lo que se conoce como par de Cooper en honor a Leonard Cooper.

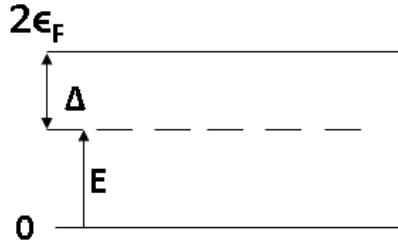


Figura 1.11: Energía del par de Cooper Δ medida con respecto a $2\epsilon_F$.

Para verificar este último enunciado, partimos de la ecuación de Schrödinger en coordenadas relativas del par (1.6):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(r) = -|\Delta| \psi(r). \quad (1.83)$$

Donde se recuerda que se busca obtener el valor de Δ con respecto a $2\epsilon_F$ (ver figura 1.11), se ha supuesto que las partículas que forman el par tienen la misma masa m , por lo tanto su masa reducida es $\mu = m/2$. En el espacio de momentos la ecuación anterior se transforma en[7]:

$$-\frac{\hbar^2}{m} (i\mathbf{q})^2 \tilde{\psi}(\mathbf{q}) + \frac{1}{V} \sum \tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \tilde{\psi}(\mathbf{q}') = -|\Delta| \tilde{\psi}(\mathbf{q}). \quad (1.84)$$

Donde se ha hecho uso de las siguientes definiciones de la transformada de Fourier y su inversa:

$$\tilde{f}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}). \quad (1.85a)$$

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tilde{f}(\mathbf{q}). \quad (1.85b)$$

En estas definiciones se está considerando que los estados en \mathbf{q} representan un conjunto discreto. Introduciendo la completitud de estos estados y tomando el límite termodinámico: $\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q$, la ecuación (1.84) se transforma en:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{\frac{\hbar^2 q^2}{m} + |\Delta|} \int \frac{d^3q'}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \tilde{\psi}(\mathbf{q}'). \quad (1.86)$$

Esta ecuación contiene dos incógnitas la función del par $\tilde{\psi}(\mathbf{q})$ y la energía Δ , para eliminar la dependencia en la función de onda proseguimos como en el trabajo original de L. Cooper[1]

considerando la aproximación de onda s , podemos considerar solamente el término $\tilde{V}(\mathbf{0}) = \tilde{V}_0$, el cual podemos sacar de la integral obteniendo:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{q}) = -\frac{\tilde{V}_0}{\frac{\hbar^2 q^2}{m} + |\Delta|} \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\mathbf{q}'). \quad (1.87)$$

Ahora integramos sobre todo el espacio $d^3 q$ de momentos:

$$\int d^3 q \tilde{\psi}(\mathbf{q}) = - \int d^3 q \frac{\tilde{V}_0}{\frac{\hbar^2 q^2}{m} + |\Delta|} \left(\int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\mathbf{q}') \right) \quad (1.88)$$

Dividiendo por el factor común $\int d^3 q \tilde{\psi}(\mathbf{q})$ se obtiene:

$$-\frac{1}{\tilde{V}_0} = \int_{\Gamma} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\frac{\hbar^2 q^2}{m} + |\Delta|}. \quad (1.89)$$

Donde la presencia del mar de Fermi se ha introducido en la región de integración Γ de la siguiente manera. Si \mathbf{q}_1 , \mathbf{q}_2 representan a los momentos del par de fermiones en cuestión, entonces debe satisfacerse que \mathbf{q}_1 , $\mathbf{q}_2 > \mathbf{k}_F$, introduciendo el momento de centro de masa \mathbf{Q} y momento relativo \mathbf{q} definidos de la siguiente manera:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2. \quad (1.90a)$$

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2}{2}. \quad (1.90b)$$

Tomando la relación inversa de estas variables con los momentos individuales se tiene:

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{Q}}{2} + \mathbf{q}. \quad (1.91a)$$

$$\mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{Q}}{2} - \mathbf{q}. \quad (1.91b)$$

Debe entonces satisfacerse las desigualdades $\mathbf{q}_1 > \mathbf{k}_F$ y $\mathbf{q}_2 > \mathbf{k}_F$, las cuales determinan la región de integración Γ como:

$$\Gamma = \left| \frac{\mathbf{Q}}{2} \pm \mathbf{q} \right| > k_F. \quad (1.92)$$

Se ha demostrado[5] que el valor de la energía Δ alcanza su máximo cuando el momento de centro de masa es nulo $\mathbf{Q} = 0$ y es lo que se considerará en adelante. Al expresar la ecuación (1.89) en términos de la energía se introduce la densidad de estados $g(\epsilon)$, que medida respecto a la energía de Fermi $\left(\frac{\hbar^2 q^2}{m} = 2 \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = 2\epsilon \Rightarrow \frac{\hbar^2 q^2}{m} = 2(\epsilon - \epsilon_F) \right)$ resulta:

$$-\frac{1}{\tilde{V}_0} = \frac{1}{V} \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \epsilon_c} \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{2(\epsilon - \epsilon_F) - |\Delta|}. \quad (1.93)$$

Donde la energía de corte ϵ_c representa un límite en la energía que pueden tomar los fermiones del par a consecuencia de la aproximación en la transformada de Fourier del potencial $\tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = \tilde{V}_0$. De acuerdo a Cooper[5] esta aproximación es válida dentro del dominio $|\epsilon - \epsilon_F| < \hbar\omega_D$ donde ω_D es la frecuencia de Debye. Se considera la energía de corte como $\epsilon_c = \hbar\omega_D$,

entonces la integración (1.93) se efectúa en una pequeña banda por encima de la energía de Fermi. Debido a que $\hbar\omega_D \ll \varepsilon_F$ se puede aproximar $g(\varepsilon) \approx g(\varepsilon_F)$, obteniéndose la siguiente ecuación para Δ :

$$\frac{1}{\tilde{V}_0} \approx \frac{g(\varepsilon_F)}{V} \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2(\varepsilon - \varepsilon_F) - |\Delta|}. \quad (1.94)$$

Cuya solución es:

$$\Delta = -2\hbar\omega_D e^{-2V/g(\varepsilon_F)|\tilde{V}_0|}. \quad (1.95)$$

De esta ecuación puede verificarse la importancia de la presencia del mar de Fermi, ya que en su ausencia se tendría $\varepsilon_F = 0$ y como $g(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$ llevaría a un gap nulo. Posterior al trabajo de Cooper, se elaboró la teoría de BCS[1] (Bardeen-Cooper-Schrieffer) la cual además de obtener un valor para el gap Δ a temperaturas finitas, determina variacionalmente la función de onda que describe el par en su estado base; sin embargo, este procedimiento hace uso de las técnicas de segunda cuantización, las cuales salen de los propósitos de este trabajo. Es por ello que nos hemos reducido a bosquejar el álgebra para obtener una expresión para el gap Δ a $T = 0$ K. Como se verá mas adelante este procedimiento sirvió de guía al abordar el problema de Cooper en una red óptica.

1.4. Materia ultrafría

Tras el descubrimiento de la superconductividad se ha generado gran interés en el estudio de diversas fases cuánticas que la materia presenta a temperaturas cercanas al cero absoluto, ejemplo de ellas son los condensados de Bose-Einstein y el estado BCS superconductor de diversos materiales. Esta inclinación por la materia ultrafría ha llevado a diversos científicos a modernizar los procedimientos de enfriamiento atómico, además de desarrollar técnicas que permitan al experimental controlar la dinámica de los átomos o moléculas que se estudian. Actualmente los experimentos en materia ultrafría hacen uso de luz láser como sistema de enfriamiento, así como de resonancias de Feshbach, foto-asociación y de redes ópticas como técnicas de control y manipulación. En esta sección se analizará los principios básicos de estas nuevas técnicas que hicieron posible la creación y manipulación de la mezcla de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ que se estudió.

1.4.1. Enfriamiento láser

El principio de equipartición de energía establece que la energía térmica por partícula por grado de libertad a temperatura T es:

$$E = \frac{1}{2}k_B T. \quad (1.96)$$

En un gas de N átomos no interactuantes sólo existe contribución cinética en la energía, es entonces posible igualar la energía cinética con $\frac{3}{2}Nk_B T$ correspondiente a los 3 grados de libertad, se obtiene entonces:

$$m \langle v^2 \rangle = 3k_B T. \quad (1.97)$$

Donde $\langle \dots \rangle$ denota el promedio sobre el ensemble y k_B es la constante de Boltzmann. De esta última relación podemos observar que una reducción en la energía cinética del gas disminuiría

su temperatura.

Fueron los físicos Hänsch y Schawlow[14] quienes por primera vez en 1975 sugirieron que el momento cinético que lleva una onda electromagnética puede ser empleado para modificar la distribución de velocidades de un gas de átomos neutros. El mecanismo de "frenamiento" propuesto puede entenderse mediante la absorción y emisión de un fotón por un átomo, para ello consideremos un átomo que por simplicidad se mueve con velocidad v_x en la dirección $+x$ y que interactúa con un haz láser con frecuencia ν_L que se propaga en dirección opuesta tal como se muestra en la figura 2.5.

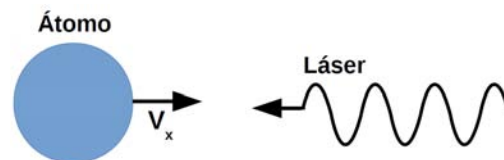


Figura 1.12: El átomo se mueve con velocidad v_x y interactúa con el láser con frecuencia ν_L que se propaga en dirección opuesta.

La frecuencia del láser es sintonizada cercana a una frecuencia de transición del átomo ν_0 por una cantidad $\delta/\nu_0 \ll 1$:

$$\nu_L = \nu_0 + \delta. \quad (1.98)$$

En el sistema de referencia del átomo la fuente del láser se mueve hacia él, experimentando un cambio en la frecuencia debido al efecto Doppler, la frecuencia percibida por el átomo ν'_L es[15]:

$$\nu'_L = \nu_L \left(1 + \frac{v_x}{c}\right) = (\nu_0 + \delta) \left(1 + \frac{v_x}{c}\right) \approx \nu_0 + \delta + \frac{v_x}{c} \nu_0. \quad (1.99)$$

Donde se ha supuesto que $v_x/c \ll 1$ siendo c la velocidad de la luz, eligiendo $\delta = -\frac{v_x}{c} \nu_0$ se consigue que $\nu'_L = \nu_0$ resultando en la absorción del fotón. Después de la absorción el átomo es llevado a uno de sus estados excitados que decaerá por emisión espontánea de un fotón con la misma frecuencia ω_L pero en una dirección arbitraria. La figura 2.6 muestra el ciclo de absorción-emisión.

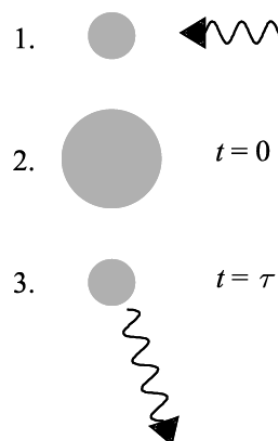


Figura 1.13: Ciclo de absorción-emisión. (1) Luz láser es dirigida al átomo. (2) El átomo absorbe el fotón llevándolo a un estado excitado.(3) El átomo decae a su estado base después de un tiempo τ .

Cada vez que este ciclo se repite hay un cambio Δp_x en el momento del átomo, por conservación de éste antes de la absorción debe tener un valor:

$$\Delta p_x = -\frac{h}{\lambda_L}. \quad (1.100)$$

Donde h es la constante de Planck y λ_L la longitud de onda del láser, el signo menos indica que el cambio en el momento es en la dirección opuesta al movimiento del átomo. Caso contrario al retroceso por emisión, que al ser en una dirección arbitraria promedia a cero. Como resultado se obtiene un "frenamiento" del átomo por absorción.

El modelo explicado describe el enfriamiento láser considerando que la dinámica entre el fotón y el átomo es clásica, sin embargo a temperaturas bajas¹⁵ los fenómenos cuánticos describen la dinámica del sistema. El tratamiento cuántico considera una aproximación semi-clásica de un átomo con solo dos niveles, el estado base y el estado excitado. De igual forma que la versión clásica se determina una fuerza de frenamiento con un valor[15][16]:

$$F(\omega) = \frac{\Delta p_{foton}}{\Delta t} = \frac{\hbar k \Gamma}{2} \frac{I/I_{sat}}{1 + I/I_{sat} + [2(\omega - \omega_0)/\Gamma]^2}. \quad (1.101)$$

Esta fuerza depende de la vida media τ ($\Gamma = 1/\tau$) del estado excitado, la razón entre la intensidad del láser y la de saturación I/I_{sat} , así también como de la frecuencia de resonancia del átomo y la frecuencia ω del láser desde el sistema de referencia del átomo. Examinado el comportamiento de esta fuerza a intensidades del láser grande $I \rightarrow \infty$ se obtiene un límite en la fuerza de frenamiento $F_{max} = \hbar k \Gamma / 2$ que representa una desaceleración máxima dada por $a_{max} = \hbar k \Gamma / 2$ contrario a la versión clásica (1.100) ($a \approx \frac{h}{\tau \lambda_L}$) que no impone ninguna restricción.

1.4.2. Melazas ópticas

En un gas más realista los átomos se mueven en cualquier dirección y para enfriarlos es necesario frenarlos en tres direcciones ortogonales mediante 3 pares de láseres tal como se muestra en la figura 1.14.

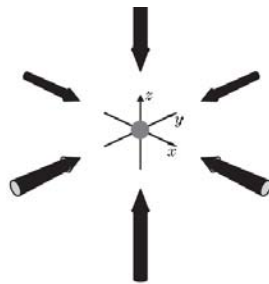


Figura 1.14: Arreglo de Melaza Óptica.

En una primera impresión podría decirse que el arreglo simétrico no tiene efecto sobre el átomo, sin embargo, las fuerzas sólo se balancean para un átomo estacionario. Para un átomo en movimiento es el efecto Doppler que lleva a un desbalance en las fuerzas de los haces

¹⁵Característico del arreglo atómico

que se propagan en un mismo eje. En el sistema de referencia del átomo, este interactúa con el haz que se propaga en dirección opuesta $F(\omega_L - \omega_0 + kv)$ y con el que se propaga en la misma dirección $F(\omega_L - \omega_0 - kv)$ resultando en una fuerza total F_{mel} :

$$F_{mel} = \frac{\hbar k \Gamma}{2} \left[\frac{I/I_{sat}}{1 + I/I_{sat} + [2(\omega_L - kv - \omega_0)/\Gamma]^2} - \frac{I/I_{sat}}{1 + I/I_{sat} + [2(\omega_L + kv - \omega_0)/\Gamma]^2} \right] \quad (1.102)$$

Asumiendo velocidades pequeñas $kv \ll \Gamma$ podemos desarrollar F_{mel} en serie de Taylor alrededor de $\delta = \omega_L - \omega_0$ obteniendo:

$$F_{mel} \approx F(\delta) - kv \frac{\partial F}{\partial \delta} - F(\delta) + kv \frac{\partial F}{\partial \delta} = -2 \frac{\partial F}{\partial \delta} kv. \quad (1.103)$$

Esta última ecuación puede escribirse de forma compacta como:

$$F_{mel} = -\alpha v \quad (1.104)$$

Que evoca a la fuerza de una partícula que se mueve en un medio viscoso (de ahí el nombre de melazas ópticas). Para que esta fuerza actúe en sentido contrario al movimiento del átomo es necesario que $\alpha = 4\hbar k^2 \frac{I}{I_{sat}} \frac{-2\delta/\Gamma}{[1+(2\delta/\Gamma)^2]^2}$ sea positiva, esto se cumple si $\delta = \omega_L - \omega_0 < 0$, es decir la frecuencia del láser debe sintonizarse por debajo de la frecuencia de resonancia, en concordancia con la aproximación clásica.

1.4.3. Enfriamiento evaporativo

La técnica de enfriamiento láser permite alcanzar temperaturas del orden de μK ; sin embargo, para el experimento del gas dipolar fermiónico [6] fue necesario alcanzar temperaturas del orden de nK . Para enfriar un gas a dicho orden de magnitud es necesario el uso del enfriamiento evaporativo. Este método consiste en dejar escapar del confinamiento a las partículas más energéticas del gas, de tal manera que las partículas que queden tengan en promedio menor energía, lo que significa menor temperatura. Explícitamente se tiene que a temperatura T la distribución de energía de los átomos es una distribución de Boltzmann:

$$f(E, T) = e^{-E/k_B T}. \quad (1.105)$$

Si suponemos que el gas tiene una temperatura T_1 , que corresponde a una distribución $f(E, T_1)$, al reducirse la intensidad del potencial de confinamiento U se tiene que aquellas partículas cuya energía E sea mayor $E > U$ escapen, el nuevo gas con menor número de partículas alcanza el equilibrio termodinámico llegando a una nueva distribución de energía $f(E, T_2)$ cuya temperatura es menor, es decir $T_2 < T_1$. En la práctica suele repetirse este proceso hasta alcanzar temperaturas del orden de nanokelvins. En la figura 1.15 se muestra el proceso de enfriamiento evaporativo.

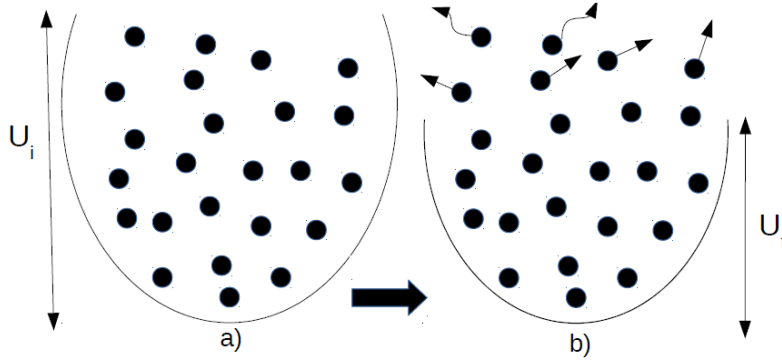


Figura 1.15: a) Se muestra partículas confinadas en un potencial con profundidad U_i . b) La profundidad del potencial se reduce $U_f < U_i$ por lo que las partículas energéticas $E > U_f$ escapan del confinamiento.

1.4.4. Redes ópticas

Una red óptica es un potencial periódico de confinamiento que se genera como resultado de el patrón de interferencia de un par o más de rayos láseres. La onda estacionaria que se genera por el traslape de los láseres es capaz de confinar átomos neutros como consecuencia de la interacción entre el campo eléctrico del láser $\vec{E}(\vec{r}, t)$ y el dipolo eléctrico \vec{d} inducido en el átomo:

$$V_{dip} = -\vec{d} \cdot \vec{E}(\vec{r}) \propto \alpha(\omega_L) |\vec{E}(\vec{r})|^2. \quad (1.106)$$

Donde $\alpha(\omega_L)$ es la polarizabilidad de un átomo que por lo general depende de la frecuencia del láser ω_L , la cual usualmente es lejana a la frecuencia ω_0 de transición electrónica del átomo que se está confinando, esto con el fin de despreciar efectos de emisiones espontáneas.

El cambio en la energía $\Delta\epsilon(\vec{r})$ que induce (1.106) en los niveles atómicos está dado de la siguiente forma[17]:

$$\Delta\epsilon(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \alpha(\omega_L) \langle \vec{E}(\vec{r}, t)^2 \rangle_t \propto \frac{I(\vec{r})}{\hbar\Delta\omega}. \quad (1.107)$$

Donde $I(\vec{r})$ es la intensidad del láser y $\Delta\omega = \omega_L - \omega_0$, este cambio en la energía es interpretado como un potencial efectivo $V_{opt} = \Delta\epsilon(\vec{r})$, que de acuerdo con (1.107) sigue el patrón espacial de la intensidad del láser. La fuerza conservativa a la que están sometidos los átomos viene dada por la relación:

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla V_{opt}(\vec{r}). \quad (1.108)$$

De donde se destacan dos casos conocidas en la literatura[18] por "Desentonamiento rojo" ($\Delta\omega < 0$) para el cual la interacción (1.108) es atractiva, confinando los átomos en la red óptica y "Desentonamiento azul" ($\Delta\omega > 0$) para el cual la interacción efectiva entre el dipolo y la red óptica es repulsiva.

En esta tesis se estudió la interacción de dos moléculas polares en una red óptica con geometría cuadrada y triangular. La red cuadrada es generada por 4 rayos láser, que en pares se propagan en dirección contraria y ortogonalmente al otro par. Si consideramos que la red está en el plano xy y que los láseres tienen un número de onda k_L y frecuencia ω_L , entonces el traslape puede

expresarse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} E_z(x,t) &= E_0 \cos(k_L x - \omega t) + E_0 \cos(k_L x + \omega t) = 2E_0 \cos(k_L x) \cos(\omega t). \\ E_x(y,t) &= E_0 \cos(k_L y - \omega t) + E_0 \cos(k_L y + \omega t) = 2E_0 \cos(k_L y) \cos(\omega t). \end{aligned} \quad (1.109)$$

Tomando el promedio temporal de (1.109) se obtiene :

$$\begin{aligned} \langle E_z(x,t)^2 \rangle &= 2E_0^2 \cos^2(k_L x). \\ \langle E_x(y,t)^2 \rangle &= 2E_0^2 \cos^2(k_L y). \end{aligned} \quad (1.110)$$

Dando así lugar a un potencial óptico V_{opt} cuya forma funcional es la siguiente:

$$V_{opt}(x,y) = V_0(\cos^2(k_L x) + \cos^2(k_L y)). \quad (1.111)$$

Donde $k_L = 2\pi/\lambda_L$ y $V_0 \propto \alpha(\omega_L)E_0^2$. La red triangular es generada por 3 láseres en el plano xy que se propagan con un ángulo de 120° entre cada haz, el potencial que generan tiene la siguiente forma:

$$V_{opt}(x,y) = V_0(3 + 4\cos(3kx/2)\cos(\sqrt{3}ky/2) + 2\cos(\sqrt{3}ky)). \quad (1.112)$$

Una de las características importantes de los potenciales ópticos que podemos observar de (1.111) y (1.112) pero que es consecuencia directa de (1.107), es que la profundidad del potencial V_0 puede ser ajustada por el experimental simplemente aumentando o disminuyendo la intensidad del láser, permitiendo así una variedad amplia de experimentos.

1.4.5. Resonancias de Feshbach

La resonancia de Feshbach¹⁶ es la herramienta principal en el control de la interacción entre los átomos en los gases ultrafríos, la función principal de este procedimiento consiste en modificar la intensidad efectiva con la que dos átomos interactúan por medio de un campo magnético externo, consiguiendo enlazar dos átomos cuando colisionan a baja energías ($\mathbf{k} \approx 0$). Para dar una idea general de la física detrás de una resonancia de Feshbach consideremos dos canales en el proceso de colisión, cuyas curvas de energía de interacción tienen la forma mostrada en la figura 1.16; por convención, el canal abierto corresponde a los estados dispersivos de los dos átomos y el canal cerrado es aquel que soporta un estado ligado(molécula).

¹⁶En memoria al físico Herman Feshbach.

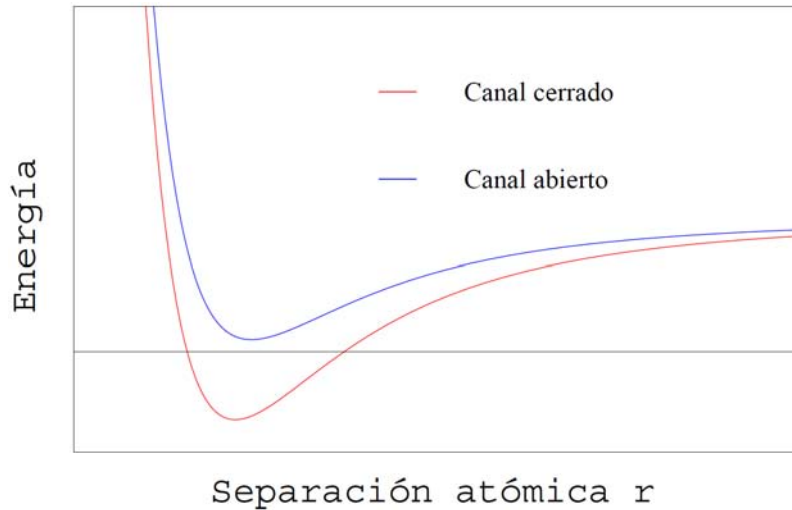


Figura 1.16: Curvas de energía de interacción en la coordenada relativa del par de átomos, la línea horizontal representa $E = 0$.

Una resonancia de Feshbach ocurre cuando el estado molecular en el canal cerrado está energéticamente cercano al fondo de los estados dispersivos del canal abierto ($E = 0$). La brecha de energía entre ambos estados puede ser variada por efecto Zeeman al aplicarse un campo magnético al gas. El acomplamiento del estado dispersivo y molecular ocurre a cierta intensidad de campo magnético B_0 para el cual se ha mostrado[19] que la longitud de dispersión diverge y cambia de signo, tal como se puede apreciar en la figura 1.17.

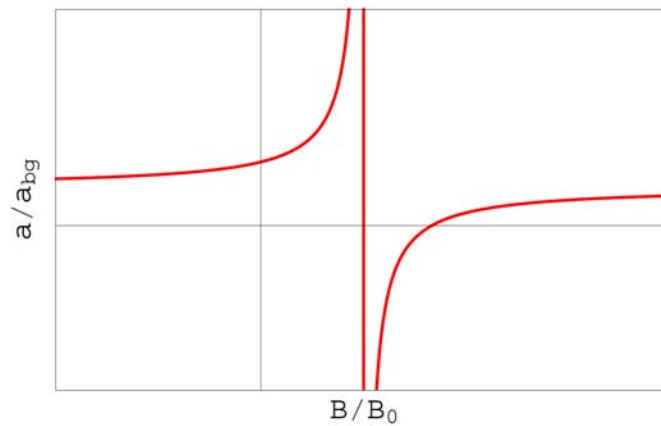


Figura 1.17: Cerca de la resonancia la longitud de dispersión a depende del campo magnético B como: $a = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0}\right)$, Δ es la amplitud de resonancia y a_{bg} la longitud de dispersión del canal abierto.

La divergencia en la longitud de dispersión ha sido asociada[10] con la formación de un estado molecular entre los átomos que colisionan. A las moléculas formadas mediante resonancias de Feshbach se le conocen como moléculas de Feshbach.

1.4.6. Stimulated Raman Adiabatic Passage

En la sección anterior se discutió como la resonancia de Feshbach lleva a la formación de un estado molecular, este procedimiento tiene la desventaja que los átomos que forman la

molécula de Feshbach están débilmente ligados ($\sim 0.15\text{eV}$), esto debido a que la molécula no es producida en su estado base vibracional, ocasionando que las vibraciones entre los átomos disocian a la molécula en un tiempo muy corto como para que el gas alcance equilibrio termodinámico. Es necesario entonces llevar a la molécula a su estado base vibracional; es aquí donde el proceso conocido por sus siglas en inglés como STIRAP (STImulated Raman Adiabatic Passage) se propone como mecanismo de transferencia de moléculas de Feshbach al estado base vibracional.

Para comprender la idea básica que hay detrás de STIRAP consideremos por simplicidad un sistema de 3 estados cuánticos¹⁷. Denotemos con $|a\rangle$ el estado inicial (Molécula de Feshbach), $|f\rangle$ un estado excitado y $|b\rangle$ el estado base vibracional, debido a que los estados $|a\rangle$ y $|b\rangle$ tienen la misma paridad¹⁸, las reglas de selección [21] prohíben la transición de dichos estados mediante la absorción o emisión de un fotón, sin embargo, la transición es permitida por procesos que involucren 2 fotones. Para llevar a cabo el proceso, el gas molecular es expuesto a dos campos eléctricos con la siguiente forma:

$$\mathbf{E}(t) = E_1 \mathbf{e}_1 \cos(\omega_1 t) + E_2 \mathbf{e}_2 \cos(\omega_2 t). \quad (1.113)$$

Donde E_i , \mathbf{e}_i son la amplitud y el vector de polarización del campo eléctrico, la frecuencia ω_1 y ω_2 de los fotones se relaciona con la energía de los estados $|a\rangle$ y $|b\rangle$ como:

$$\hbar(\omega_1 + \omega_2) = (E_b - E_a). \quad (1.114)$$

El proceso se describe de la siguiente manera: el fotón con frecuencia ω_1 es absorbido causando la transición del estado $|a\rangle$ al estado $|f\rangle$, mediante emisión estimulada el segundo fotón con frecuencia ω_2 lleva la transición del estado $|f\rangle$ al estado base $|b\rangle$. La figura 1.18 describe este proceso.

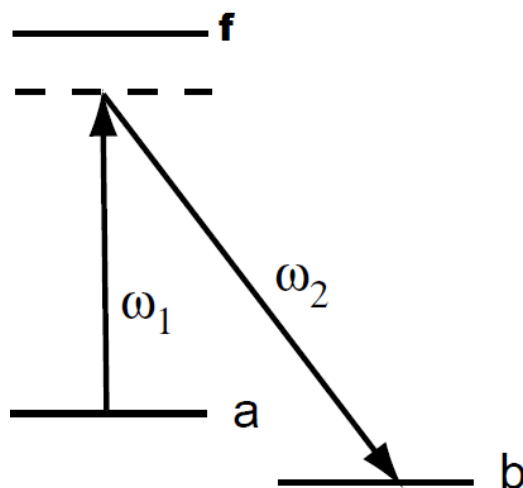


Figura 1.18: Se describe el proceso STIRAP.

El uso de STIRAP tiene la ventaja de no calentar significativamente el gas molecular y de no destruir las moléculas ya formadas durante el proceso. La mezcla de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ estudiada

¹⁷Una buena aproximación para átomos alcalinos como sodio y potasio [20].

¹⁸Ambos estados están caracterizados por $L = 0$.

Capítulo 2

Planteamiento y objetivos

En 1957 Cooper [1] encontró que electrones interactuando atractivamente en la presencia de un mar de Fermi pueden formar un estado ligado; incluso si su energía es mayor a cero. Estudios recientes [23] muestran la posibilidad de la formación del par en sistemas quasi-bidimensionales; como por ejemplo: dos planos paralelos de moléculas confinadas en una red óptica. Por otra parte la creación del gas dipolar fermiónico de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ abre la oportunidad de investigar si la interacción dipolar entre las moléculas es capaz de sustentar un estado de Cooper cuando el gas es confinado en una red óptica. Para averiguar esta interrogante es necesario discutir tres diferencias entre el contexto en el cual se investigó la formación del par molecular y el contexto de Cooper[1]. La primera de ellas puede verificarse en la sección 1.3, donde se bosqueja el álgebra que permitió conocer el valor del gap Δ sin hacer mención alguna de la presencia de una estructura cristalina, donde por lo general se lleva a cabo la conducción de electrones; de hecho, puede verse de (1.84) que dicha estructura fue sustituida por una caja de volumen V con condiciones periódicas a la frontera. La segunda se refiere al énfasis en la formación del par para electrones con momento relativo \mathbf{k} nulo y la última, se relaciona con la naturaleza de la interacción atractiva, en la teoría de BCS esta interacción esta originada por el intercambio de fonones entre electrones. En nuestro contexto se hizo énfasis en la existencia de una estructura geométrica en la red, no se limitó la exploración de formación de pares de Cooper con momento relativo nulo, sino que se consideró al momento relativo \mathbf{k} como una variable en la primera zona de Brillouin y en lo que concierne a la naturaleza de la interacción, las moléculas al estar confinadas en una red óptica, no existen vibraciones de la red que lleven al intercambio de fonones, es puramente la interacción dipolar de la cual se espera la formación del par.

Tras responder la interrogante sobre la existencia de soluciones de tipo par de Cooper en moléculas dipolares, se generan nuevas cuestiones (las cuales se le darán respuesta) acerca del comportamiento del gap Δ como por ejemplo:

1. ¿Cómo se compara la forma funcional de la energía del par Δ con la obtenida en la teoría de BCS?
2. ¿Cuál es la dependencia de Δ con la magnitud de interacción entre las moléculas?
3. ¿Cuál es la dependencia de Δ con el momento relativo \mathbf{k} ?
4. ¿Es el par con momento relativo igual a cero el favorecido para sistemas compuestos por dos especies con energía de Fermi diferente?

El interés en estudiar la formación de pares de Cooper reside en el hecho físico que la posibilidad de su existencia indica inestabilidad, la cual es asociada a la inestabilidad que se genera en la formación del estado superfluido, la descripción teórica del superfluido del gas de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ fue elaborada recientemente[2] pronosticando una temperatura crítica entre 6 y 20 nk. Los resultados que se obtengan complementarían a la investigación previamente mencionada.

Al tratarse de moléculas es conveniente investigar la formación de estados ligados, los cuales dan lugar a lo que se conoce como dímero; la importancia de averiguar la formación del dímero permitiría conocer las condiciones para las cuales el par de Cooper o el dímero es el estado cuántico preferencial para dos moléculas, también ofrecería una puerta en la investigación de la dispersión elástica de los dímeros[24], tema que es de interés en el ámbito experimental de la materia ultrafría. El tratamiento de los estados ligados fue puramente destinado a conocer la energía de ligadura o una cota de ésta mediante método variacional estándar[7].

2.1. Modelo

Consideremos moléculas dipolares de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ colocadas en un arreglo paralelo de dos redes ópticas(A y B) en 2D cuya constante de red a es la misma para ambos planos, la separación entre los planos tiene un valor λ y los dipolos están alineados perpendicularmente a la red, tal y como se puede observar en la figura 2.1.

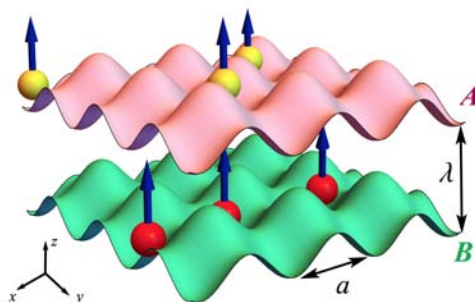


Figura 2.1: Representación esquemática del gas dipolar de Fermi en la red óptica. Las flechas indican la dirección del momento dipolar \mathbf{p} .

De acuerdo a la electrodinámica clásica[25] la interacción entre dos dipolos \mathbf{p}_A y \mathbf{p}_B está dada como¹:

$$V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \frac{\mathbf{p}_A \cdot \mathbf{p}_B - 3(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_A)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_B)}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|^3}. \quad (2.1)$$

Donde $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector unitario en la dirección $\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$, siendo \mathbf{r}_A y \mathbf{r}_B las posiciones de los dipolos:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_A &= x_A \hat{\mathbf{x}} + y_A \hat{\mathbf{y}} + z_A \hat{\mathbf{z}}. \\ \mathbf{r}_B &= x_B \hat{\mathbf{x}} + y_B \hat{\mathbf{y}} + z_B \hat{\mathbf{z}}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

¹En unidades cgs

Definiendo $\rho^2 = (x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2$ y notando de la figura 2.1 que la distancia interplanar en la dirección $\hat{\mathbf{z}}$ es igual a $\lambda = (z_A - z_B)$ se obtiene la siguiente reducción de (2.1):

$$V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \frac{\mathbf{p}_A \cdot \mathbf{p}_B - 3(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_A)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_B)}{(\rho^2 + \lambda^2)^{3/2}}. \quad (2.3)$$

Simplifiquemos ahora el numerador de (2.3), para ello consideramos la alineación de los dipolos $\mathbf{p}_A = d\hat{\mathbf{z}}$, $\mathbf{p}_B = d\hat{\mathbf{z}}$ siendo d la intensidad dipolar y escribamos de forma explícita el vector normal $\hat{\mathbf{n}}$:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{(x_A - x_B)\hat{\mathbf{x}} + (y_A - y_B)\hat{\mathbf{y}} + (z_A - z_B)\hat{\mathbf{z}}}{(\rho^2 + \lambda^2)^{1/2}}. \quad (2.4)$$

Se obtiene lo siguiente:

$$\mathbf{p}_A \cdot \mathbf{p}_B - 3(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_A)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_B) = d^2 - \frac{3d^2\lambda^2}{\rho^2 + \lambda^2}. \quad (2.5)$$

Sustituyendo esta última expresión en (2.3) y simplificando se llega a:

$$V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = d^2 \frac{\rho^2 - 2\lambda^2}{(\rho^2 + \lambda^2)^{5/2}}. \quad (2.6)$$

En principio, una molécula en el plano A experimenta la interacción dipolar entre las moléculas del mismo plano A y del plano B; sin embargo, se ha mostrado[26] que la interacción intraplanar puede despreciarse cuando la distancia interplanar λ es menor que la constante de red a . Por ejemplo, tal como se considerará para $\lambda = 0.75a$ la interacción dipolar interplanar es aproximadamente 5 veces más intensa que la interacción intraplanar[2]. Esta diferencia en magnitudes permite concentrarnos solamente en la interacción entre moléculas pertenecientes a distintos planos; más aún, en dos de las moléculas descritas. La reducción al problema de dos cuerpos aparenta ser una estimación cruda; no obstante, veremos que esta aproximación reproduce los mismos resultados que el tratamiento de los muchos cuerpos a temperatura $T = 0$ K[2].

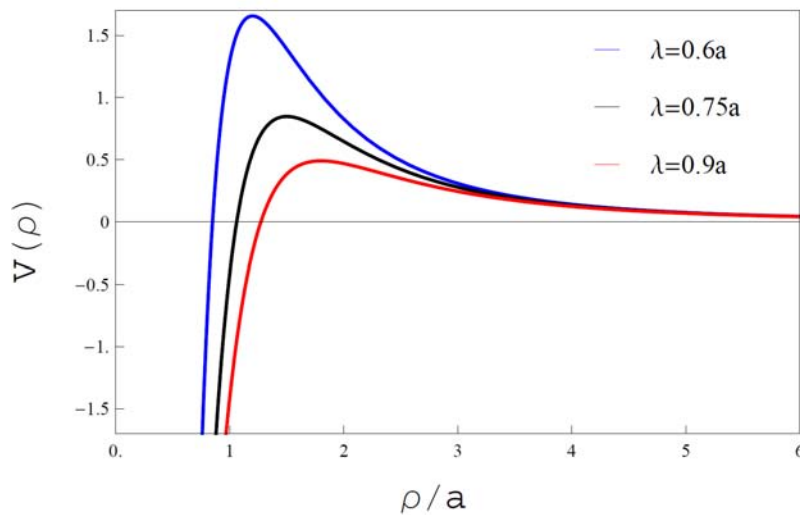


Figura 2.2: Potencial Dipolar (2.6) para distintos valores en la separación intraplanar λ . El mínimo se ubica en $\rho = 0$ y tiene un valor de $V(0) = -2d^2\lambda^3$.

En la figura 2.2 se muestra el perfil del potencial (2.6), este potencial es atractivo para distancias $\rho < \lambda\sqrt{2}$ y repulsivo para $\rho > \lambda\sqrt{2}$. El carácter repulsivo del potencial no contradice las condiciones del problema de Cooper, puesto que el "tamaño" de un par de Cooper no debería exceder la distancia interplanar λ ; no obstante, no se descarta que el comportamiento repulsivo de origen a nuevos resultados.

Ahora es conveniente introducir dos parámetros adimensionales, el cociente entre la separación planar y la constante de red $\Lambda = \lambda/a$ y la intensidad efectiva de interacción $\chi = \frac{m_{eff}d^2}{\lambda\hbar^2}$ siendo m_{eff} la masa efectiva. Considerando que la distancia planar está dada como: $\rho = a|\mathbf{i}|$. La ecuación (2.6) se reescribe como:

$$V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \frac{d^2}{a^3} \frac{|\mathbf{i}|^2 - 2\Lambda^2}{(|\mathbf{i}|^2 + \Lambda^2)^{5/2}}. \quad (2.7)$$

Escribiendo el término $\frac{d^2}{a^3}$ en términos de los parámetros adimensionales:

$$\frac{d^2}{a^3} = \frac{m_{eff}d^2}{\lambda\hbar^2} \frac{\hbar^2\lambda}{a^3m_{eff}} = \chi\Lambda \frac{\hbar^2}{a^2m_{eff}}. \quad (2.8)$$

Obteniéndose el siguiente coeficiente:

$$\frac{d^2}{a^3} = \begin{cases} 2t\chi\Lambda & \text{Red cuadrada} \\ 3t\chi\Lambda & \text{Red triangular} \end{cases} \quad (2.9)$$

De donde se obtiene la siguiente forma del potencial dipolar:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 2t\chi\Lambda \frac{|\mathbf{i}|^2 - 2\Lambda^2}{(|\mathbf{i}|^2 + \Lambda^2)^{5/2}} & \text{Red cuadrada} \\ 3t\chi\Lambda \frac{|\mathbf{i}|^2 - 2\Lambda^2}{(|\mathbf{i}|^2 + \Lambda^2)^{5/2}} & \text{Red triangular} \end{cases} \quad (2.10)$$

La ganancia de reescribir (2.6) con los parámetros χ y Λ está motivada por dos aspectos, uno de ellos es que no genera ninguna dificultad al momento de hacer cálculos numéricos puesto que los resultados que se obtengan estarán en unidades del parámetro de tunelaje t , la última se debe a que permite ver los dos parámetros que el experimento permite variar, la intensidad dipolar χ y la distancia intraplanar Λ . Los experimentos en la mezcla $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ fueron hechos considerando una constante de red de $a = 532$ nm y un momento dipolar máximo de 0.8 D. Debido a que consideramos moléculas en su estado base confinadas por una red óptica cuya profundidad V_0 es mayor que la energía de retroceso[27], tenemos que para una distancia interplanar $\lambda \approx 0.75a$ se obtiene $0.4 < \chi < 2.0$ como rango de intensidad dipolar. Los cálculos numéricos realizados fueron hechos considerando este rango.

2.1.1. Formalismo

Supongamos que el potencial de confinamiento es lo suficientemente fuerte para considerar la última banda y que la aproximación de amarre fuerte es válida. En este escenario podemos describir los estados estacionarios de las dos moléculas dipolares mediante el modelo de Hubbard (ver sección 2):

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} (|x_{\mathbf{i}}\rangle \langle x_{\mathbf{j}}| + |y_{\mathbf{i}}\rangle \langle y_{\mathbf{j}}|) + \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} V_{\mathbf{ij}} |x_{\mathbf{i}} y_{\mathbf{j}}\rangle \langle x_{\mathbf{i}} y_{\mathbf{j}}|. \quad (2.11)$$

Donde se recuerda que en esta notación, se denota por² $|x_i\rangle$ al ket de una partícula en el sitio $\mathbf{i} = a(i_x, i_y)$, siendo a la constante de red. Sea $|\phi\rangle$ el vector de estado que describe a las dos partículas; el cual, de acuerdo al formalismo de la mecánica cuántica podemos expandirlo en términos de base discreta de posiciones $|x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}\rangle$:

$$|\phi\rangle = \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} |x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}\rangle \langle x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'} | \phi \rangle = \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}) |x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}\rangle. \quad (2.12)$$

Nótese que debido a la distinguibilidad entre las moléculas del plano A y B no fue necesario expandir el vector de estado $|\phi\rangle$ en términos de una base antisimétrica. Evaluando el efecto de la parte ideal de \hat{H} en la expansión (2.12) se obtiene:

$$\begin{aligned} & \left(-t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} |x_{\mathbf{i}}\rangle \langle x_{\mathbf{j}}| + |y_{\mathbf{i}}\rangle \langle y_{\mathbf{j}}| \right) |\phi\rangle = \\ & -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}) \delta_{\mathbf{n}\mathbf{j}} |x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{n}'}\rangle + \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}) \delta_{\mathbf{n}'\mathbf{j}} |x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{i}}\rangle \\ & = -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\mathbf{n}'} \phi(x_{\mathbf{j}}, y_{\mathbf{n}'}) |x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{n}'}\rangle - t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\mathbf{n}} \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{j}}) |x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{i}}\rangle \end{aligned}$$

Para el término de interacción se tiene:

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} |x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}\rangle \langle x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}| \right) |\phi\rangle = \\ & \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} V(x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}) \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}) \delta_{\mathbf{n}'\mathbf{j}} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{i}} |x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}\rangle. = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} V(x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}) \phi(x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}) |x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}\rangle. \end{aligned}$$

Reacomodando estos dos términos y exigiendo que $|\phi\rangle$ sea solución de la ecuación de Schrödinger $\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\phi\rangle &= -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\mathbf{n}} \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{j}}) |x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{i}}\rangle + \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} V(x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}) \phi(x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}) |x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} E \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}) |x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}\rangle. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Haciendo el producto interno con el Bra $\langle x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}|$:

$$\begin{aligned} \langle x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'} | \hat{H} | \phi \rangle &= -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\mathbf{n}'} \phi(x_{\mathbf{j}}, y_{\mathbf{n}'}) \delta_{\mathbf{i}\mathbf{m}} \delta_{\mathbf{n}'\mathbf{m}'} - t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\mathbf{n}} \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{j}}) \delta_{\mathbf{n}\mathbf{m}} \delta_{\mathbf{i}\mathbf{m}'} \\ &+ \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} V(x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}) \phi(x_{\mathbf{i}}, y_{\mathbf{j}}) \delta_{\mathbf{i}\mathbf{m}} \delta_{\mathbf{j}\mathbf{m}'} = \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} E \phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'}) \delta_{\mathbf{n}\mathbf{m}} \delta_{\mathbf{n}'\mathbf{m}'}. \end{aligned}$$

De donde se obtiene la siguiente ecuación para los coeficientes $\phi(x_{\mathbf{n}}, y_{\mathbf{n}'})$:

$$E \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}) = -t \sum_{\langle \mathbf{j} \rangle_{\mathbf{m}}} \phi(x_{\mathbf{j}}, y_{\mathbf{m}'}) - t \sum_{\langle \mathbf{j} \rangle_{\mathbf{m}'}} \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{j}}) + V(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}) \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}). \quad (2.14)$$

²Formalmente debería escribirse como $|x_{\mathbf{i}}\rangle \oplus \mathbf{1}$

En esta última ecuación la notación $\langle \mathbf{j} \rangle_{\mathbf{m}}$ ($\langle \mathbf{j} \rangle_{\mathbf{m}'}$) indica que fijado el sitio \mathbf{m} (\mathbf{m}') la suma corre sobre los primeros vecinos de este.

En una red cuadrada simple los primeros vecinos de cualquier sitio son 4, tal como puede verse en la figura 2.3.

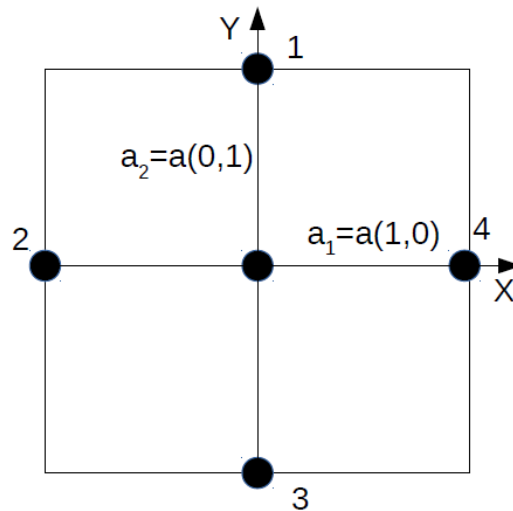


Figura 2.3: Representación esquemática de una red cuadrada simple. Los vectores primitivos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 tienen coordenadas $\mathbf{a}_1 = a(1,0)$ y $\mathbf{a}_2 = a(0,1)$.

Colocando el origen de coordenadas en el centro, se obtiene las siguientes posiciones para los primeros vecinos:

$$\begin{aligned}
 1 &: a(0,1). \\
 2 &: a(-1,0). \\
 3 &: a(0,-1). \\
 4 &: a(1,0).
 \end{aligned}
 \tag{2.15}$$

Al introducir las posiciones de los primeros vecinos en (2.14) se obtiene la siguiente ecuación en diferencias:

$$\begin{aligned}
 E\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}) &= -t[\phi(x_{\mathbf{m} \pm \mathbf{a}_1}, y_{\mathbf{m}'}) + \phi(x_{\mathbf{m} \pm \mathbf{a}_2}, y_{\mathbf{m}'}) \\
 &+ \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}' \pm \mathbf{a}_1}) + \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}' \pm \mathbf{a}_2})] + V(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'})\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}).
 \end{aligned}
 \tag{2.16}$$

Haciendo la propuesta :

$$\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}) = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}).
 \tag{2.17}$$

Con \mathbf{K} el momento de centro de masa, \mathbf{R} y \mathbf{r} el vector de centro de masa y coordenada relativa, definidos como:

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}
 \tag{2.18a}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}.
 \tag{2.18b}$$

La propuesta (2.17) es una reminiscencia a la función de Bloch (1.41), puesto que es el producto de una onda plana $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}$ y una función $\psi(\mathbf{r})$; sin embargo, al ser la interacción dipolar

no periódica, se destruye la periodicidad que pueda tener la función de onda que describa a las moléculas en la red. Es por ello que no se exige la condición periódica en $\psi(\mathbf{r})$. Dada la propuesta (1.41) podemos calcular los términos a primeros vecinos en ϕ :

$$\begin{aligned}
\phi(x_{\mathbf{m}\pm\mathbf{a}_1}, y_{\mathbf{m}'}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm\frac{K_x a}{2}} \psi(\mathbf{r} \pm a\hat{\mathbf{i}}). \\
\phi(x_{\mathbf{m}\pm\mathbf{a}_2}, y_{\mathbf{m}'}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm\frac{K_y a}{2}} \psi(\mathbf{r} \pm a\hat{\mathbf{j}}). \\
\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'\pm\mathbf{a}_1}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm\frac{K_x a}{2}} \psi(\mathbf{r} \mp a\hat{\mathbf{i}}). \\
\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'\pm\mathbf{a}_2}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm\frac{K_y a}{2}} \psi(\mathbf{r} \mp a\hat{\mathbf{j}}).
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Sustituyendo en (2.16) y eliminando el factor común $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$ se obtiene:

$$\begin{aligned}
E\psi(\mathbf{r}) &= -t[e^{\frac{K_x a}{2}} \psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}) + e^{-\frac{K_x a}{2}} \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}}) + e^{\frac{K_y a}{2}} \psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{j}}) \\
&+ e^{-\frac{K_y a}{2}} \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{j}}) + e^{\frac{K_x a}{2}} \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}}) + e^{-\frac{K_x a}{2}} \psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}) \\
&+ e^{\frac{K_y a}{2}} \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{j}}) + e^{-\frac{K_y a}{2}} \psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{j}})] + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Organizando un poco esta última ecuación se llega a:

$$\begin{aligned}
E\psi(\mathbf{r}) &= -2t\left[\cos\left(\frac{K_x a}{2}\right) (\psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}) + \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}})) + \right. \\
&\left. \cos\left(\frac{K_y a}{2}\right) (\psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{j}}) + \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{j}}))\right] + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{2.21}$$

La cual podemos simplificar de la siguiente forma:

$$E\psi(\mathbf{r}) = [\xi \cdot \hat{\mathbf{T}} + V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}). \tag{2.22}$$

Donde se hizo las siguientes definiciones:

$$\xi = -2t \left(\cos\left(\frac{K_x a}{2}\right), \cos\left(\frac{K_y a}{2}\right) \right). \tag{2.23a}$$

$$\hat{\mathbf{T}}\psi(\mathbf{r}) = (\psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}) + \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}}), \psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{j}}) + \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{j}})). \tag{2.23b}$$

$$\hat{H} = \xi \cdot \hat{\mathbf{T}} + V(\mathbf{r}). \tag{2.23c}$$

La ecuación (2.22) será fundamental en el análisis tanto del problema de Cooper como el de los estados ligados en la red cuadrada.

Se realizó el mismo análisis para una red de geometría triangular. En este caso existen 6 primeros vecinos para cada sitio, tal como puede verse en la figura 2.4.

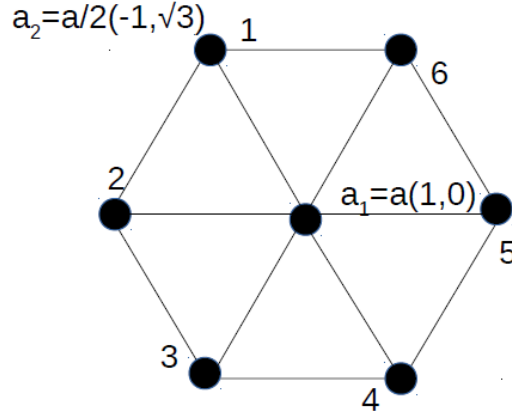


Figura 2.4: Representación esquemática de la red triangular. Los vectores primitivos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 tienen coordenadas $\mathbf{a}_1 = a(1,0)$ y $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3})$.

Colocando el origen de coordenadas en el punto central se obtiene las siguientes coordenadas para los 6 primeros vecinos:

$$\begin{aligned}
 1 &: \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3}). \\
 2 &: a(-1, 0). \\
 3 &: -\frac{a}{2}(1, \sqrt{3}). \\
 4 &: \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}). \\
 5 &: a(1, 0). \\
 6 &: \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}).
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

Al introducir las posiciones de los primeros vecinos en la ecuación (2.14) se obtiene:

$$\begin{aligned}
 E\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}) &= -t[\phi(x_{\mathbf{m} \pm \hat{\mathbf{a}}_2}, y_{\mathbf{m}'}) + \phi(x_{\mathbf{m} \pm (\hat{\mathbf{a}}_1 + \hat{\mathbf{a}}_2)}, y_{\mathbf{m}'}) + \phi(x_{\mathbf{m} \pm \hat{\mathbf{a}}_1}, y_{\mathbf{m}'}) \\
 &\quad + \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}' \pm \hat{\mathbf{a}}_2}) + \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}' \pm (\hat{\mathbf{a}}_1 + \hat{\mathbf{a}}_2)}) + \phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}' \pm \hat{\mathbf{a}}_1})] \\
 &\quad + V(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'})\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'}).
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

De igual manera que en la red cuadrada se hace la propuesta (2.17) y se expresa los coeficientes

$\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'})$ en términos de la onda plana $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$ y la función $\psi(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}
\phi(x_{\mathbf{m}\pm\hat{\mathbf{a}}_2}, y_{\mathbf{m}'}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm i(-K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4)} \psi\left(\mathbf{r} + \frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} \pm \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right). \\
\phi(x_{\mathbf{m}\pm\hat{\mathbf{a}}_1}, y_{\mathbf{m}'}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm iK_x a/2} \psi(\mathbf{r} \pm a\hat{\mathbf{i}}). \\
\phi(x_{\mathbf{m}\pm(\hat{\mathbf{a}}_1+\hat{\mathbf{a}}_2)}, y_{\mathbf{m}'}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm i(K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4)} \psi\left(\mathbf{r} \pm \left(\frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} + \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right)\right). \\
\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'\pm\hat{\mathbf{a}}_2}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm i(-K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4)} \psi\left(\mathbf{r} \pm \left(\frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} - \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right)\right) \\
\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'\pm\hat{\mathbf{a}}_1}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm iK_x a/2} \psi(\mathbf{r} \mp a\hat{\mathbf{i}}). \\
\phi(x_{\mathbf{m}}, y_{\mathbf{m}'\pm(\hat{\mathbf{a}}_1+\hat{\mathbf{a}}_2)}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{\pm i(K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4)} \psi\left(\mathbf{r} \mp \left(\frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} + \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right)\right).
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Al sustituir en (2.25), eliminar el factor común $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$ y organizando las exponenciales imaginarias en cosenos, se obtiene:

$$\begin{aligned}
E\psi(\mathbf{r}) &= -2t \left[\cos\left(\frac{K_x a}{2}\right) \psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}) + \cos\left(\frac{K_x a}{4} - \frac{K_y a\sqrt{3}}{4}\right) \psi\left(\mathbf{r} + \frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} - \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right) \right. \\
&+ \cos\left(\frac{K_x a}{4} + \frac{K_y a\sqrt{3}}{4}\right) \psi\left(\mathbf{r} - \frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} - \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right) + \cos\left(\frac{K_x a}{2}\right) \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}}) \\
&+ \cos\left(\frac{K_x a}{4} - \frac{K_y a\sqrt{3}}{4}\right) \psi\left(\mathbf{r} - \frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} + \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right) + \cos\left(\frac{K_x a}{4} + \frac{K_y a\sqrt{3}}{4}\right) \psi\left(\mathbf{r} - \frac{a\hat{\mathbf{i}}}{2} + \frac{a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}}{2}\right) \left. \right] \\
&+ V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Organizando esta última ecuación obtenemos:

$$E\psi(\mathbf{r}) = [\xi_1 \cdot \hat{\mathbf{T}}_1 + \xi_2 \cdot \hat{\mathbf{T}}_2 + \xi_3 \cdot \hat{\mathbf{T}}_3 + V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}). \tag{2.28}$$

Donde se ha definido:

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= -2t(\cos(K_x a/2), \cos(K_x a/2)). \\
\hat{\mathbf{T}}_1 \psi(\mathbf{r}) &= (\psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}), \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}})). \\
\xi_2 &= -2t(\cos(K_x a/4 - K_y a\sqrt{3}/4), \cos(K_x a/4 - K_y a\sqrt{3}/4)). \\
\hat{\mathbf{T}}_2 \psi(\mathbf{r}) &= (\psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}/2 - a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}/2), \psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}}/2 + a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}/2)). \\
\xi_3 &= -2t(\cos(K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4), \cos(K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4)). \\
\hat{\mathbf{T}}_3 \psi(\mathbf{r}) &= (\psi(\mathbf{r} - a\hat{\mathbf{i}}/2 - a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}/2), \psi(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{i}}/2 + a\sqrt{3}\hat{\mathbf{j}}/2)). \\
\hat{H} &= \xi_1 \cdot \hat{\mathbf{T}}_1 + \xi_2 \cdot \hat{\mathbf{T}}_2 + \xi_3 \cdot \hat{\mathbf{T}}_3 + V(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{2.29}$$

La ecuación (2.28) será para el caso de la red triangular el punto de partida en el problema de Cooper y de los estados ligados.

2.2. Estados ligados

El objetivo de esta sección es investigar la formación de el estado ligado o dímero de dos de las moléculas del gas de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$, en particular obtener la energía de ligadura o una cota de ésta. Para ello se hará uso de el método variacional estándar[7]:

$$E_B = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (2.30)$$

Siendo $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r})$ una función prueba y \hat{H} dado por las ecuaciones (2.22) y (2.28):

$$\hat{H} = \begin{cases} \xi \cdot \hat{\mathbf{T}} + V(\mathbf{r}) & \text{Red cuadrada.} \\ \xi_1 \cdot \hat{\mathbf{T}}_1 + \xi_2 \cdot \hat{\mathbf{T}}_2 + \xi_3 \cdot \hat{\mathbf{T}}_3 + V(\mathbf{r}) & \text{Red triangular.} \end{cases} \quad (2.31)$$

Se sugirió usar las siguientes funciones prueba:

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{r}) &= Ae^{-\gamma r}. \\ \psi_2(\mathbf{r}) &= Ae^{-\gamma r^2}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Donde A es el factor de normalización, r es la distancia intraplano de las moléculas $r = \sqrt{\mathbf{x} + \mathbf{y}}$ y γ el parámetro de minimización, el cual fue seleccionado bajo la condición:

$$\frac{dE_B}{d\gamma} = 0. \quad (2.33)$$

Las funciones de onda (2.32) evocan al estado base del átomo de hidrógeno y la función del estado base del oscilador armónico. En las figuras 2.5 y 2.6 se compara la energía E_B/t que se obtiene para la geometría cuadrada y triangular con las funciones de prueba.

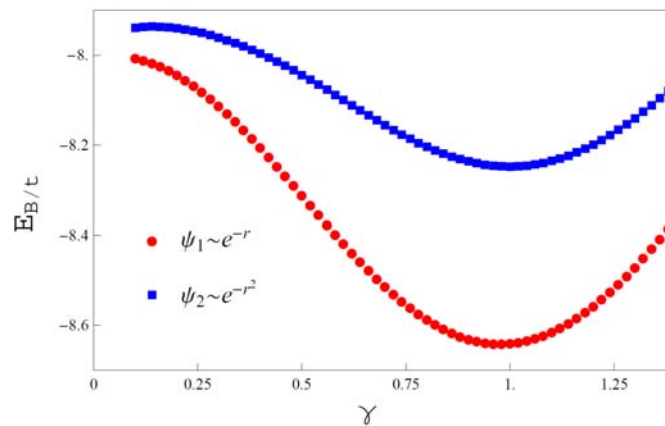


Figura 2.5: Se muestra la energía del estado ligado E_B/t con función de parámetro de minimización γ en la red cuadrada.

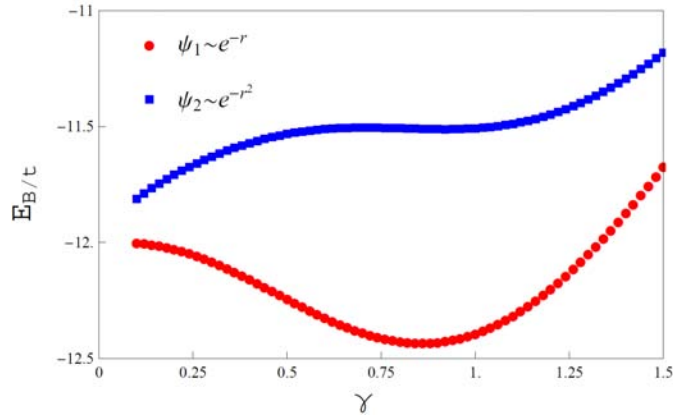


Figura 2.6: Se muestra la energía del estado ligado E_B/t con función de parámetro de minimización γ en la red triangular.

Tal como puede verse la función de onda $\psi_1(\mathbf{r}) = Ae^{-\gamma r}$ resulta en una menor energía, podemos argüir a este resultado basados en que la amplitud de probabilidad del estado base de un estado ligado decae asintóticamente como $e^{-\gamma r}$. Esta conclusión y su verificación sugiere usar la función de prueba ψ_1 en posteriores cálculos para ambas geometrías.

2.2.1. Red cuadrada

El cálculo numérico de la ecuación (2.30) con \hat{H} dado por la ecuación (2.22) consideró un número total de sitios de $\Omega = 251,000$. El código empleado puede encontrarse en el apéndice A. En la figura 2.7 se muestra la dependencia de la energía de ligadura E_B/t con la intensidad de interacción χ para un momento de centro de masa nulo $\mathbf{K} = 0$. Se puede notar que la formación del dímero es favorable a una intensidad $\chi \approx 0.6$ y que conforme la interacción aumenta la energía varía como $E_B/t \sim -\chi^2$.

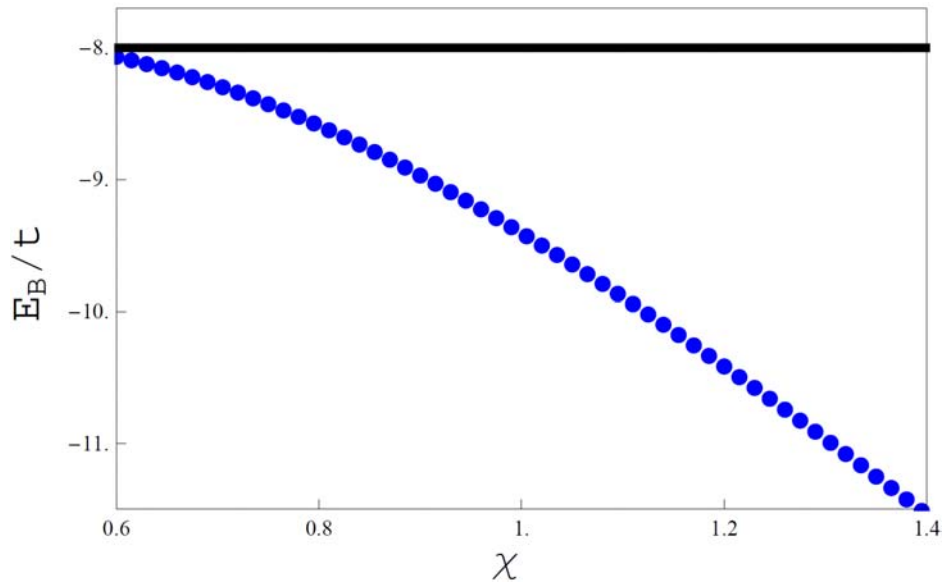


Figura 2.7: Se muestra la energía variacional del estado ligado E_B/t en la red cuadrada como función de la intensidad dipolar χ . La línea negra corresponde a la mínima energía de los estados dispersivos de (1.68).

Posteriormente se investigó la formación del dímero con momento de centro de masa nulo; es decir, la dependencia de la energía de ligadura E_B con el vector \mathbf{K} de centro de masa. Se averiguó la variación con la componente $K_x a$ en la primera zona de Brillouin dejando $K_y = 0$, dicha dependencia se muestra en la figura 2.8. El código numérico puede encontrarse en el apéndice B.

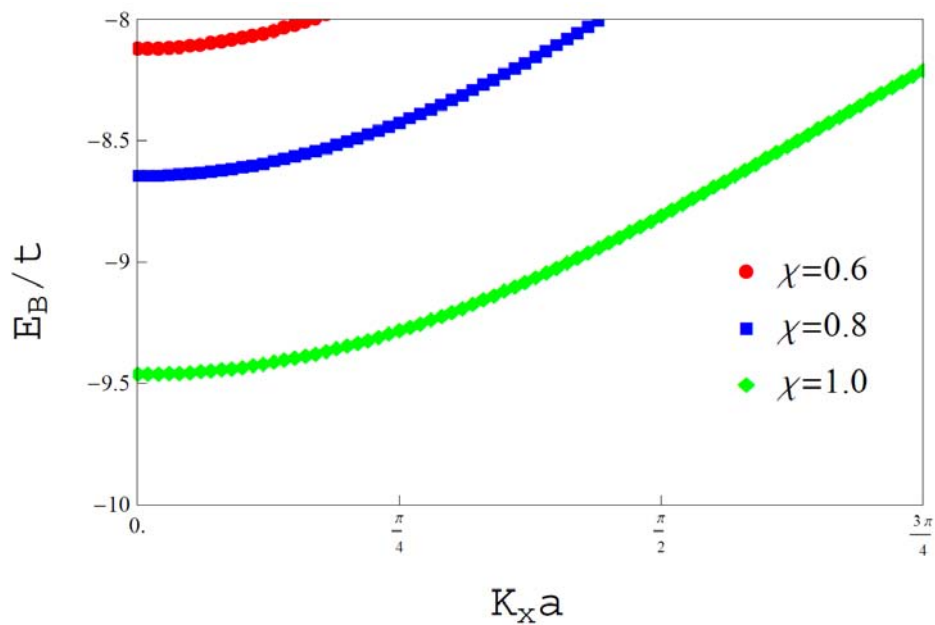


Figura 2.8: Se muestra la energía de ligadura E_B/t como función de $K_x a$ en la primera zona de Brillouin de una red cuadrada $K_x a \in [0, \pi/a]$.

Tal como es de esperarse el dímero con momento nulo es favorecido. Conforme el momen-

to aumenta la energía de ligadura disminuye como $E_B/t \sim K_x^2$ hasta alcanzar el mínimo de los estados dispersivos en donde, el estado ligado no se forma. La información obtenida da conocimiento de los rangos de interacción χ para los cuales el estado de Cooper tiene posibilidad de formarse sin competir con la formación del dímero.

2.2.2. Red triangular

Los cálculos numéricos en la geometría triangular consideraron un total de sitios de $\Omega = 103,041$, los códigos concernientes a esta sección pueden encontrarse en los apéndices C y D. En la figura 2.9 se observa la energía de ligadura E_B/t como función de la intensidad de interacción χ . Notesé que en la red triangular la formación del dímero es favorecida hasta una valor de la interacción $\chi \approx 0.6$.

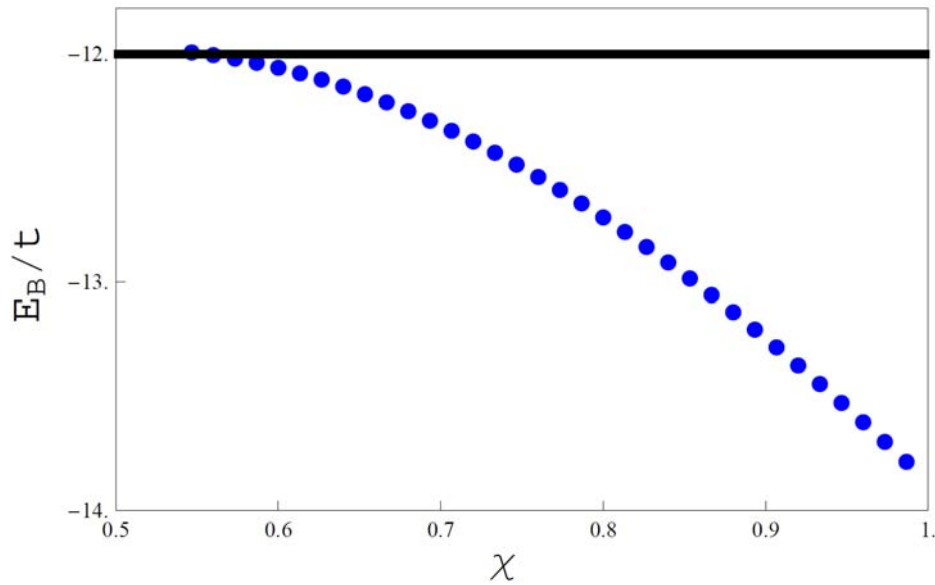


Figura 2.9: Se muestra la energía del estado ligado E_B/t en la red triangular como función de la intensidad dipolar χ . La línea negra corresponde a la mínima energía de los estados dispersivos (1.69).

Debido a la antisimetría entre la componente K_x y K_y en (1.69), se determinó la dependencia de la energía de ligadura E_B/t para cada componente manteniendo la otra nula. El caso con $K_y = 0$ se muestra en la figura 2.10.

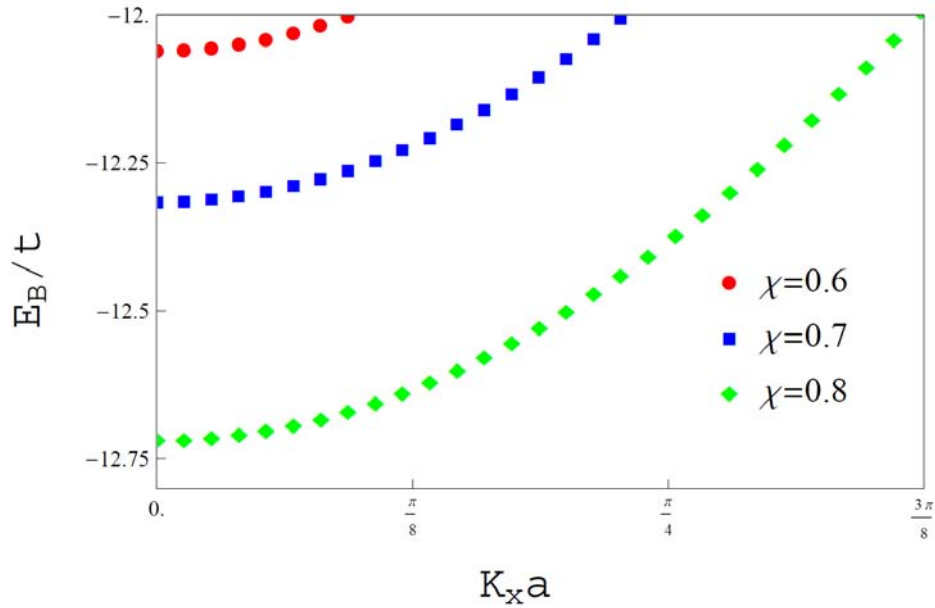


Figura 2.10: Se muestra la energía del estado ligado E_B/t en la red triangular como función de $K_x a$ en una red triangular.

Comparando con la figura 2.8 se puede observar que la geometría triangular es mas susceptible al incremento en momento de centro de masa, puesto que para un valor de $K_x a = \frac{3\pi}{8}$ la energía del estado ligado alcanza la mínima energía de los estados dispersivos. La figura 2.11 muestra la energía de ligadura como función de $K_y a$, manteniendo $K_x = 0$

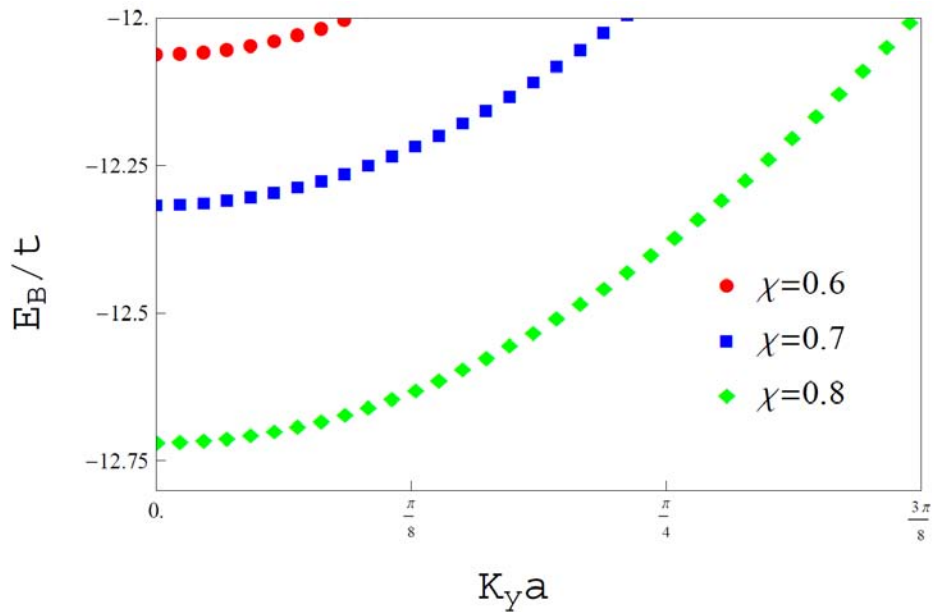


Figura 2.11: Se muestra la energía del estado ligado E_B/t en la red triangular como función de $K_y a$ en una red triangular.

Podemos observar que ambas gráficas son muy similares tanto en los valores numéricos como en su forma funcional. La energía E_B/t en la red triangular se comporta como $E_B/t \sim K_i^2$

donde i puede ser x o y según sea el caso.

2.3. Problema de Cooper

En esta sección se analizará la formación de par molecular de Cooper en la geometría cuadrada y triangular, se mostrará también el comportamiento de la energía Δ del par como función de la energía de Fermi ε_F y del momento de centro de masa \mathbf{K} de la ecuación (2.17), a la par de mostrar los resultados se discutirá dichos resultados.

2.3.1. Red Cuadrada

Partimos de la ecuación (2.22) y de la transformada inversa de Fourier en la función de onda $\psi(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.34)$$

Al sustituir (2.34) en (2.22) y notar que el operador $\hat{\mathbf{T}}$ al aplicarse a la onda plana $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ resulta en:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{T}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} &= (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}e^{iq_x a} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}e^{-iq_x a}, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}e^{iq_y a} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}e^{-iq_y a}) \\ &= 2e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}(\cos(q_x a), \cos(q_y a)). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Eliminando factores comunes de ambos lados de la igualdad se obtiene:

$$\sum_{\mathbf{q}} E e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left(-4t \cos\left(\frac{K_x a}{2}\right) \cos(q_x a) - 4t \cos\left(\frac{K_y a}{2}\right) \cos(q_y a) + V(\mathbf{r}) \right) \quad (2.36)$$

Si se define:

$$E_{\mathbf{K},\mathbf{q}} = -4t \left(\cos\left(\frac{K_x a}{2}\right) \cos(q_x a) + \cos\left(\frac{K_y a}{2}\right) \cos(q_y a) \right). \quad (2.37)$$

La ecuación (2.36) se simplifica a:

$$\sum_{\mathbf{q}} (E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}) \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.38)$$

Multiplicando por $e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}}$ y sumando sobre todos los sitios de la red obtenemos:

$$\sum_{\mathbf{q}} (E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}) \psi(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{r}} e^{-i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}.$$

$$\sum_{\mathbf{q}} (E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}) \psi(\mathbf{q}) \Omega \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}.$$

$$(E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}'}) \psi(\mathbf{q}') = \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \right).$$

$$(E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}'}) \psi(\mathbf{q}') = \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) \tilde{V}(\mathbf{q}' - \mathbf{q})$$

Donde se ha definido la transformada de Fourier de una función $f(\mathbf{r})$ como:

$$f(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.39)$$

Siendo Ω el número de sitios en la red. Al dividir entre $E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}'}$ se obtiene:

$$\psi(\mathbf{q}') = \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) \frac{\tilde{V}(\mathbf{q}' - \mathbf{q})}{E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}'}} \quad (2.40)$$

Al introducir otra suma $\sum_{\mathbf{q}'}$ en (2.40) obtenemos:

$$\sum_{\mathbf{q}'} \psi(\mathbf{q}') = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \psi(\mathbf{q}) \frac{\tilde{V}(\mathbf{q}' - \mathbf{q})}{E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}'}} = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \psi(\mathbf{q}') \frac{\tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}} \quad (2.41)$$

En la última igualdad se intercambio los índices mudos \mathbf{q} y \mathbf{q}' . Reacomodando la ecuación (2.41):

$$\sum_{\mathbf{q}'} \psi(\mathbf{q}') \left(1 - \sum_{\mathbf{q}} \frac{\tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}} \right) = 0 \quad (2.42)$$

Esta igualdad debe cumplirse para todo \mathbf{q}' , en consecuencia podemos asumir con toda certeza lo siguiente:

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{\tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}} = 1 \quad (2.43)$$

Introducimos ahora dos elementos importantes que se discutieron en la sección 3:

1. Se hace la aproximación de ondas (ver capítulo 1); es decir, se toma el valor de \mathbf{q}' como nulo $\mathbf{q}' = \mathbf{0}$.
2. Debido a que se buscan soluciones tipo Cooper hacemos la sustitución $E = \varepsilon_F^B + \varepsilon_F^A - \Delta$ en (2.43), es decir se buscan soluciones que tengan menor energía que la energía de Fermi de las dos moléculas.

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{\tilde{V}(\mathbf{q})}{\varepsilon_F^B + \varepsilon_F^A - \Delta - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}} = 1 \quad (2.44)$$

3. El ingrediente crucial en el problema de Cooper es la presencia de un mar de Fermi; es decir, de estados cuánticos ocupados, que debido al principio de exclusión de Pauli están prohibidos a las dos moléculas en cuestión. Es por ello que la suma en (2.43) se restringe a aquellos vectores \mathbf{q} en la primera zona de Brillouin correspondiente que satisfagan las desigualdades $\varepsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{K}}{2}}^A > \varepsilon_F^A$ y $\varepsilon_{-\mathbf{q}+\frac{\mathbf{K}}{2}}^B > \varepsilon_F^B$ con $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ dado por la ecuación (1.68) y (1.69) según sea el caso. Nótese que en nuestro contexto el mar de Fermi está constituido por las moléculas restantes del gas de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$.

Se determinó numéricamente el valor del gap Δ como función del momento de centro de masa \mathbf{K} y la energía de Fermi para redes balanceadas y no balanceadas. Los cálculos numéricos consideraron $\Omega = 251,000$. Un mayor número de sitios producía los mismos resultados.

Como punto de partida consideremos que las redes de los planos A y B están balanceadas $\varepsilon_F^A = \varepsilon_F^B$. Bajo esta condición se investigó la dependencia de Δ con respecto a la energía de

Fermi de una capa. La figura 2.12 muestra dicha dependencia para diferentes valores de la intensidad de interacción χ . Por simplicidad se asumió $K_x = K_y = 0$. Círculos, cuadrados y rombos corresponden a valores de $\chi = 0.4, 0.5, 0.6$ respectivamente. El código empleado se muestra en el apéndice E.

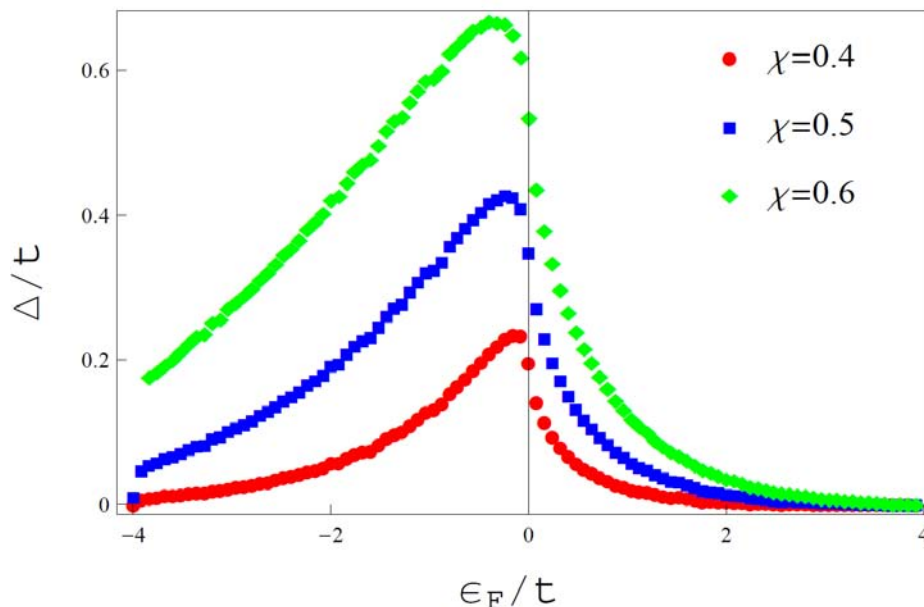


Figura 2.12: Gap Δ/t como función de la energía de Fermi en una red balanceada cuadrada $\varepsilon_F^A = \varepsilon_F^B = \varepsilon_F$.

En esta gráfica puede observarse que la energía del par es creciente hasta alcanzar un máximo como función de la energía de Fermi, luego muestra un comportamiento decreciente de tipo $\Delta \sim e^{-\varepsilon_F/\alpha}$ siendo $\alpha \sim \chi$. También podemos notar que conforme se incrementa la interacción, la energía Δ incrementa, pero aun mas interesante es el hecho que el máximo se recorre a la izquierda; es decir, a valores con menor energía de Fermi. Esto se debe a que los estados disponibles en la red se reducen conforme se incrementa el factor de llenado o la interacción (ver figura 2.13). Inhibiendo así el transporte en la red y con ello la formación de pares de Cooper.

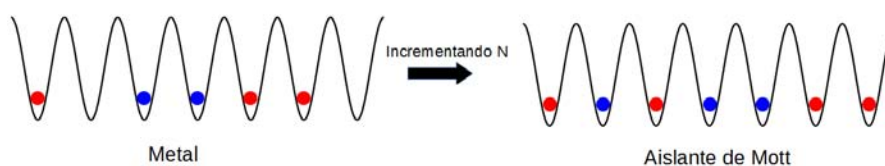


Figura 2.13: Se muestra como los sitios en la red se van llenando conforme se incrementa el factor de llenado, inhibiendo así el transporte en la red. A este estado se le conoce como aislante de Mott.

Debido a la simetría entre la componente K_x y K_y en la ecuación (2.37), es suficiente indagar la formación de pares de Cooper como función de K_x para $K_y = 0$. En la figura 2.14 se muestra Δ como función de K_x en la primera zona de Brillouin para una energía Fermi de $\varepsilon_F = -0.5t$. El código que proporcionó los resultados puede encontrarse en el apéndice F.

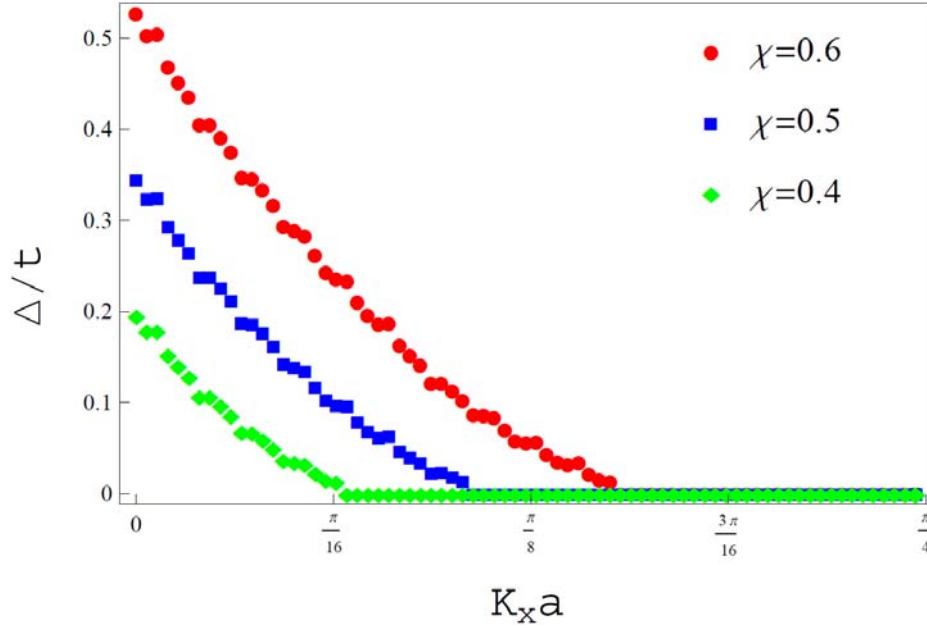


Figura 2.14: Gap Δ/t como función de $K_x a$ para una red balanceada cuadrada con $\varepsilon_F^A = \varepsilon_F^B = -0.5t$.

De esta última figura podemos notar que el par favorecido es aquel con momento de centro de masa nulo, tal como predice la teoría de BCS. Conforme el momento aumenta el valor del gap disminuye a consecuencia que la energía cinética domina a la interacción dipolar. Por último se investigó la formación de pares de Cooper como función de K_x con K_y nulo para energías de Fermi distintas en los planos A y B. En la figura 2.15 se muestran círculos, cuadrados, rombos y triángulos correspondientes a diferencias en energía de Fermi $\Delta\varepsilon = \varepsilon_F^A - \varepsilon_F^B$ de $\Delta\varepsilon_F = 0.1, 0.2, 0.3$ y 0.5 para un valor de la interacción $\chi = 0.5$ y ε_F^A fija a $\varepsilon_F^A = -0.5t$. En el apéndice G puede encontrarse el código numérico.

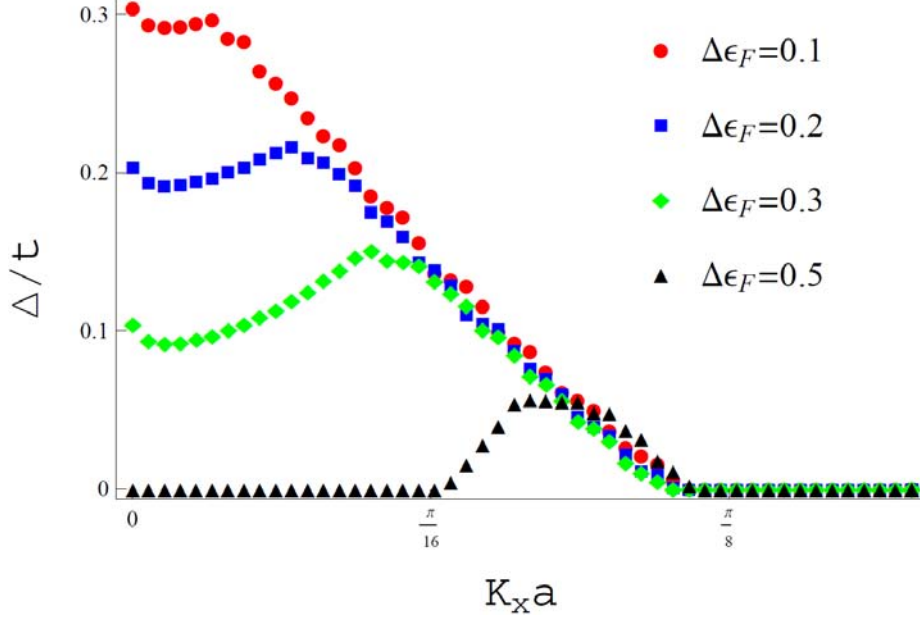


Figura 2.15: Δ/t como función de $K_x a$ para energías de Fermi diferentes en cada plano en la red cuadrada. Se fijó el valor $\varepsilon_F^A = -0.5t$.

Podemos observar que conforme la diferencia en energía de Fermi incrementa el par favorecido tiene momento de centro de masa no nulo; sin embargo, para diferencias mayores $\Delta\varepsilon \approx 0.8$ el par no se forma. La formación del par con momento finito muestra la formación de la fase FFLO (Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov) en el sistema de moléculas dipolares. La fase FFLO se produce cuando un metal superconductor³ es sometido a un campo magnético, el cual por efecto Zeeman produce una diferencia en la energía de Fermi de electrones con espín arriba $|\uparrow\rangle$ y espín abajo $|\downarrow\rangle$. Al formarse el estado superconductor en el metal se origina la formación de pares de Cooper con momento \mathbf{q} correspondiente a la diferencia entre las superficies de Fermi. En nuestro contexto la diferencia en energía de Fermi se puede originar desbalanceado el número de moléculas en cada capa.

2.3.2. Red triangular

El objetivo ahora es averiguar la existencia de pares de Cooper en una red con geometría triangular. Se procederá de manera similar a la red cuadrada, con la diferencia que partiremos de la ecuación (2.28) derivada para la geometría en cuestión.

Evaluemos el efecto de los operadores $\mathbf{T}_i \forall i \in 1,2,3$ de la ecuación (2.28) en la onda plana $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ de la expansión (2.34):

$$\begin{aligned}
 \mathbf{T}_1 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} &= e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (e^{iq_x a}, e^{-iq_x a}). \\
 \mathbf{T}_2 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} &= e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (e^{i(q_x a/2 - q_y a\sqrt{3}/2)}, e^{i(-q_x a/2 + q_y a\sqrt{3}/2)}). \\
 \mathbf{T}_3 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} &= e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (e^{i(-q_x a/2 - q_y a\sqrt{3}/2)}, e^{i(q_x a/2 + q_y a\sqrt{3}/2)}).
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

³De baja temperatura; es decir, descrito por la teoría de BCS

Al sustituir (2.34) en (2.28) se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} E e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [-4t \cos(K_x a/2) \cos(q_x a) \\ &\quad - 4t \cos(K_x a/4 - K_y a\sqrt{3}/4) \cos(q_x a/2 - q_y a\sqrt{3}/2) \\ &\quad - 4t \cos(K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4) \cos(q_x a/2 + q_y a\sqrt{3}/2) + V(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (2.46)$$

Al definir el parámetro $E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}$ para la red triangular:

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{K},\mathbf{q}} &= -4t (\cos(K_x a/2) \cos(q_x a) + \cos(K_x a/4 - K_y a\sqrt{3}/4) \cos(q_x a/2 - q_y a\sqrt{3}/2) \\ &\quad + \cos(K_x a/4 + K_y a\sqrt{3}/4) \cos(q_x a/2 + q_y a\sqrt{3}/2)). \end{aligned} \quad (2.47)$$

La ecuación (2.46) se reduce a:

$$\sum_{\mathbf{q}} (E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}) \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.48)$$

Repetiendo el mismo procedimiento que en la red cuadrada se llega a la ecuación:

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{\tilde{V}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}} = 1 \quad (2.49)$$

Nuevamente haciendo uso de la aproximación de onda s ($\mathbf{q}' = \mathbf{0}$):

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{\tilde{V}(\mathbf{q})}{E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}} = 1 \quad (2.50)$$

Sustituimos $E = \varepsilon_F^A + \varepsilon_F^B - \Delta$ y se restringimos la suma (2.50) a aquellos vectores \mathbf{q} que cumplan la condición:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{q+\frac{\mathbf{k}}{2}} &> \varepsilon_F^A. \\ \varepsilon_{-q+\frac{\mathbf{k}}{2}} &> \varepsilon_F^B. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Con $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ dada por la ecuación (1.69). Los cálculos numéricos para la red triangular consideraron un total de sitios de $\Omega = 103,041$. La razón por la cual el número de sitios es menor que en la red cuadrada es debido a que la geometría triangular implicó un tiempo mayor de cómputo, por lo que se eligió el menor número de sitios que reproduciera los mismos resultados hasta 4 cifras decimales. Los códigos numéricos pueden encontrarse en los apéndices H, I y J.

Como punto de partida se averiguó el comportamiento del gap Δ con respecto a la energía de Fermi ε_F para redes balanceadas $\varepsilon_F = \varepsilon_F^A = \varepsilon_F^B$. En la figura 2.16 se muestra la variación del gap Δ con respecto a la energía de Fermi.

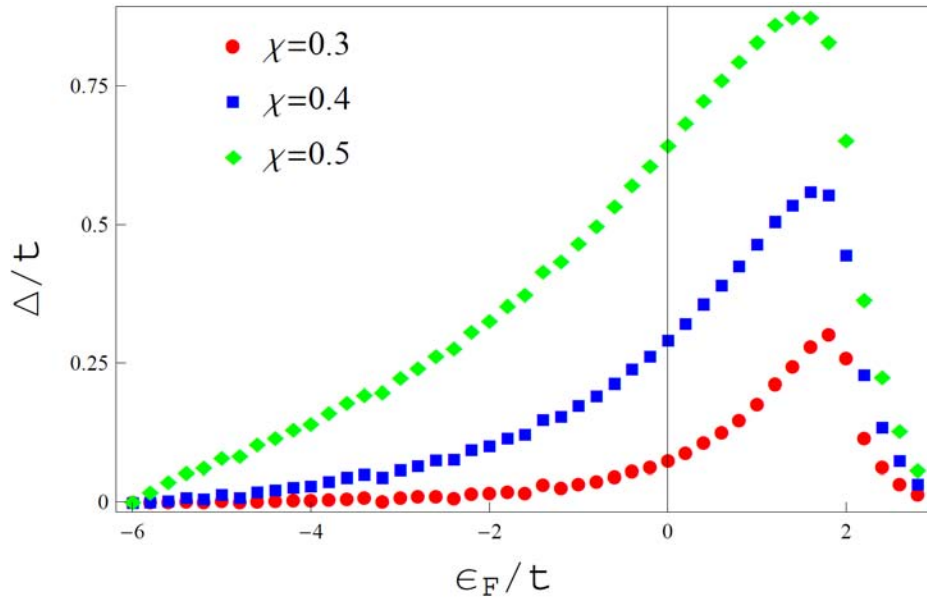


Figura 2.16: Se muestra Δ/t como función de la energía de Fermi en una red balanceada triangular $\varepsilon_F^A = \varepsilon_F^B = \varepsilon_F$.

De igual forma que en la red cuadrada se observa que el máximo del gap se recorre a la izquierda conforme el valor de la intensidad χ aumenta. Puede observarse también que la red triangular arroja mayores valores del gap para un valor fijo en la intensidad χ . Se determinó la dependencia del gap Δ con respecto a K_x y K_y de centro de masa manteniendo una nula, en la figura 2.17 se muestra el caso $K_y = 0$.

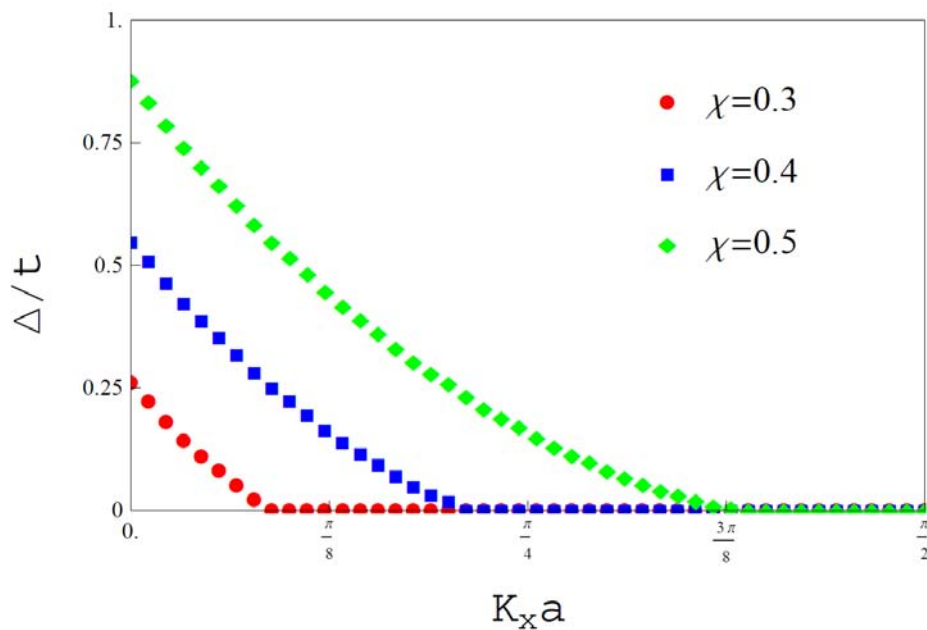


Figura 2.17: Se muestra Δ/t como función de $K_x a$ manteniendo $K_y = 0$ en una red triangular balanceada $\varepsilon_F = 1.5t$.

Debido a que la relación (2.47) no presenta simetría entre K_x y K_y (como en el caso de la

red cuadrada) se indagó como varia el gap con respecto a $K_y a$ manteniendo $K_x = 0$, dicho datos se muestran en la figura 2.18.

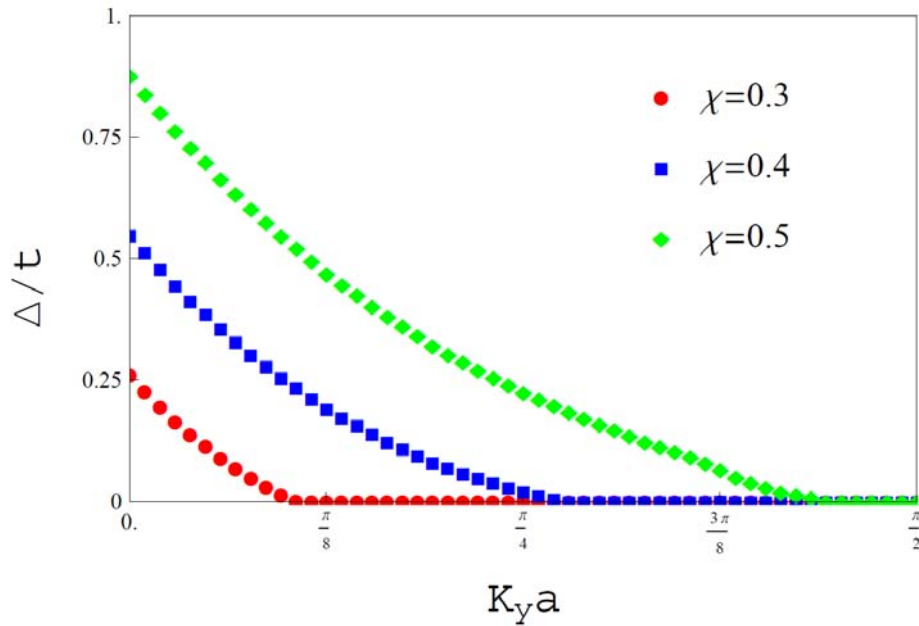


Figura 2.18: Se muestra Δ/t como función de $K_x a$ manteniendo $K_y = 0$ en una red triangular balanceada $\varepsilon_F = 1.5t$.

De esta última gráfica podemos observar que el gap como función de $K_y a$ prevalece a valores mayores en comparación con la figura 2.17. Al igual que en la red cuadrada se investigó la formación del par de Cooper para redes ópticas con un desbalance en la energía de Fermi. De la figura 2.19 se puede observar la dependencia del gap Δ/t con respecto a $K_x a$ en la primera zona de Brillouin, manteniendo $K_y = 0$. Círculos, cuadrados, rombos y triángulos denotan diferencias de energía de Fermi de $\Delta\varepsilon_F = 0.2, 0.4, 0.6$ y 0.8 respectivamente. Se puede observar que la red triangular es capaz de sustentar estados FFLO con un valor del gap mayor que en la red cuadrada.

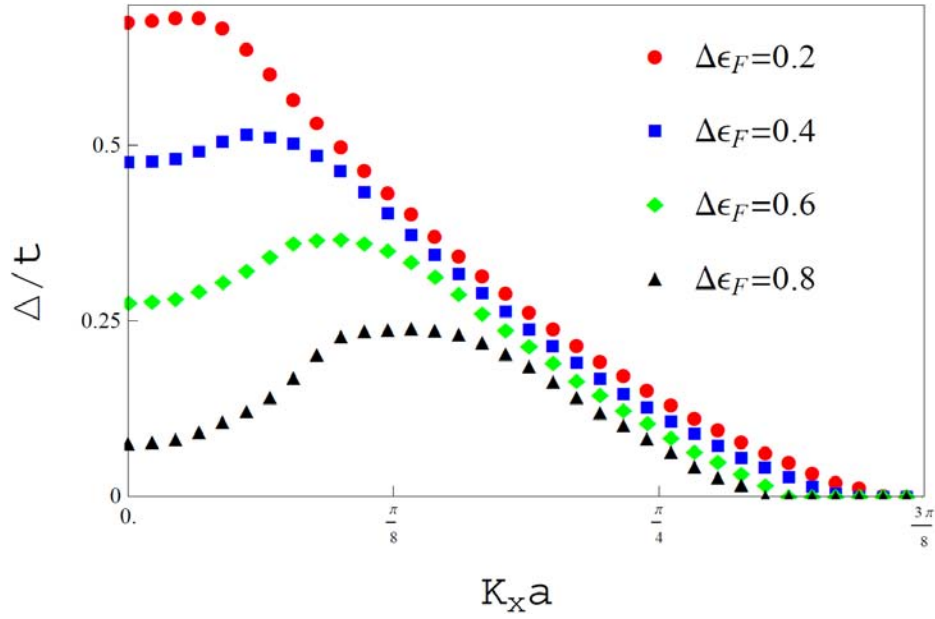


Figura 2.19: Se muestra Δ/t como función de $K_x a$ en una red triangular no balanceada $\varepsilon_F^A \neq \varepsilon_F^B$, se fija $\varepsilon_F^A = 1.5t$.

Se repitió el análisis anterior manteniendo $K_x = 0$ y variando $K_y a$ en la primera zona de Brillouin en redes desbalanceadas. En la figura 2.20 se muestra dicha dependencia.

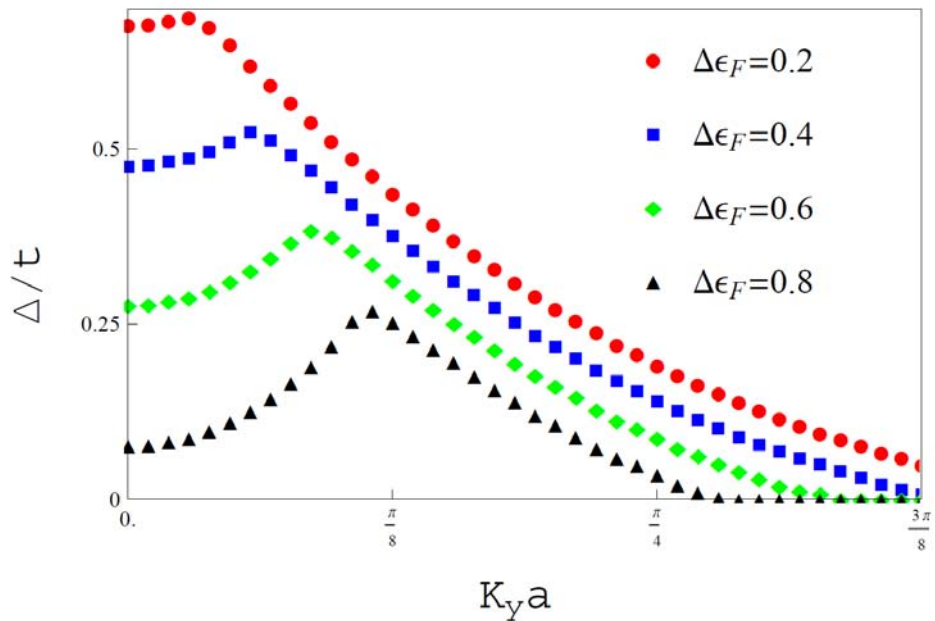


Figura 2.20: Se muestra Δ/t como función de $K_y a$ en una red triangular no balanceada $\varepsilon_F^A \neq \varepsilon_F^B$, se fija $\varepsilon_F^A = 1.5t$.

Se observa que el gap alcanza un máximo mayor que el que se muestra en la figura 2.19, destaca también que a valores pequeños en la diferencia de energía de Fermi ($\Delta\varepsilon_F^A = 0.2, 0.4$) el gap prevalece en mayor medida como función de $K_y a$, sin embargo; a una diferencia de

$\Delta\varepsilon_F = 0.6$ el gap prevalece en igual medida como función de $K_x a$ y $K_y a$. Por último a una diferencia de $\Delta\varepsilon_F = 0.8$ el gap perdura mas como función de $K_x a$.

Capítulo 3

Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado el problema de estados dispersados y estados ligados de dos moléculas polares pertenecientes a dos diferentes capas planas de una red óptica en 2D. En particular, el problema de los estados dispersados se estudió en presencia de un gas de Fermi de moléculas confinadas a una temperatura absoluta de $T = 0$ K. La investigación se vio motivada por la realización de un gas dipolar fermiónico de moléculas de $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ en su estado base[6], el amplio control en la interacción dipolar entre las moléculas que el grupo experimental reportó y la más importante, el estudio de la fase superfluida[2] del gas en cuestión. Esta última generó la cuestión de averiguar si siguiendo el esquema de Cooper[1] se puede obtener soluciones de tipo par de Cooper cuya energía gap fuera consistente con las obtenidas en el problema de muchos cuerpos. En particular, el propósito del presente trabajo fue investigar la citada interrogante para dos geometrías cristalinas: cuadrada y triangular.

Para abordar el problema se consideraron dos aspectos, la presencia de la estructura cristalina en 2D y la interacción entre los dipolos. La aproximación de amarre fuerte y el modelo de Hubbard permitieron incorporar la existencia de la red en términos de los parámetros t y χ que caracterizan la energía de los saltos en la red y la intensidad de la interacción dipolar. Haciendo uso del esquema de Cooper en una red óptica fue posible caracterizar el gap para las redes cuadrada y triangular. Así mismo se determinó la energía del estado ligado (dímero) entre las dos moléculas mediante el método variacional estándar, el conocimiento de dicho estado estacionario permitió determinar los rangos de interacción dipolar χ para los cuales el par de Cooper es el estado base de las dos moléculas. En ambas geometrías se encontró que el gap Δ como función del parámetro χ es creciente, este resultado es análogo a estudios de formación de pares de Cooper bajo interacción de contacto, donde la interacción está caracterizada por la longitud de dispersión a .

A continuación describiremos las conclusiones para cada geometría por separado.

Red cuadrada: La manifestación del estado ligado (dímero) se dio a un valor de la interacción $\chi \sim 0.6$, conforme la interacción incrementa la energía se comporta como $E_B/t \sim -\chi^2$. Se determinó que el estado molecular con la máxima energía de ligadura es aquel con momento de centro de masa nulo, es decir $\mathbf{K} = 0$. La existencia de soluciones tipo par de Cooper se dieron a partir de una intensidad de interacción $\chi \sim 0.23$ y una energía de Fermi de $\epsilon_F = -0.5t$. Para valores más grandes en la interacción se encuentra que Δ depende fuertemente de la topología de las superficies de Fermi (ver figura 2.12), mostrando un comportamiento creciente cuando estas últimas son cerradas y un descenso abrupto cuando pasan a ser abiertas. Se averiguó la existencia del par para un momento de centro de masa \mathbf{K} no nulo en redes con energía de

Fermi simétrica $\varepsilon_F^A = \varepsilon_F^B$ donde se encontró que el par con momento nulo es el que presenta un mayor valor en el gap, tal como la teoría de BCS predice para el caso homogéneo. Los pares con momento no nulo resultaron ser los favorecidos en redes con un desbalance en energía de Fermi, este resultado tiene un impacto directo en la existencia de la fase FFLO en el sistema dipolar en 2D, en congruencia con [22] investigación reciente bajo interacción de contacto en 3D.

En la figura 3.1 se muestra la dependencia del gap Δ con la temperatura que arroja el tratamiento de los muchos cuerpos [2].

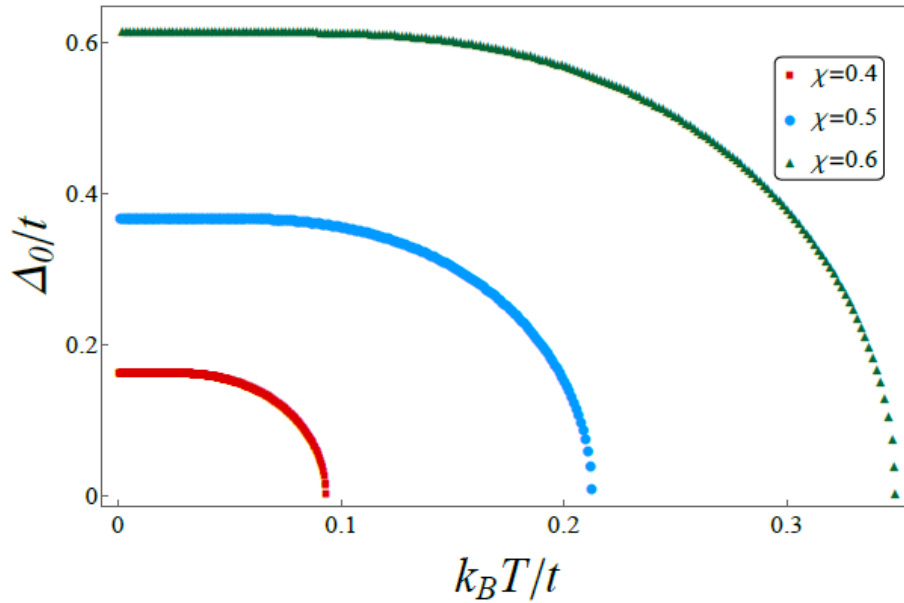


Figura 3.1: Se muestra valor del gap Δ como función de la temperatura. Ver [2].

Comparando los valores a temperatura $T = 0$ K con los obtenidos en esta investigación encontramos una coincidencia bastante acertada, confirmando así que en este caso particular la esencia de los muchos cuerpos es bien capturada en el problema de Cooper.

Red triangular: De acuerdo al método variacional estándar el estado ligado se manifestó a una interacción $\chi \sim 0.6$. La energía de ligadura incrementa (en valor absoluto) de forma cuadrática con la interacción, al igual que en la red cuadrada la molécula con momento de centro de masa nulo presentó la máxima energía de ligadura. El par de Cooper tiene lugar a una interacción de $\chi \sim 0.2$ y una energía de Fermi $\varepsilon_F \sim 1.9t$. Esta geometría presentó valores del gap Δ mayores que en la red cuadrada tanto en redes balanceadas como desbalanceadas, la formación de la fase FFLO también tuvo lugar en la red triangular, se observó que dicha fase prevalece en mayor medida en la geometría en cuestión. Estos resultados permiten concluir que la red óptica triangular ofrece una mayor prevaencia del estado de Cooper; este hecho supondría una ventaja al experimental. Podría también esperarse que la temperatura crítica de la fase superfluida incremente en comparación con la geometría cuadrada, dicha hipótesis tendra que esperar un tratamiento riguroso de los muchos cuerpos.

Bibliografía

- [1] L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 118 (1956).
- [2] A. Camacho-Guardian and R. Paredes, Arxiv preprint cond-mat 1505.03811. <http://arxiv.org/abs/1505.03811> (2015).
- [3] Michael Tinkham, Introduction to Superconductivity, (Dover Publications, 1996).
- [4] Yuli V. Nazarov, Jeroen Danon, Advanced Quantum Mechanics, (Cambridge University Press 2013).
- [5] J. Bardeen, L.N. Cooper, and J.R. Schrieffer. Theory of Superconductivity, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [6] J. Woo, Sebastian A. Will and Martin W. Zwierlein, Ultracold Dipolar Gas of Fermionic $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ Molecules in Their Absolute Ground State, Phys. Rev. Lett. **114** 205302 (2015).
- [7] E. Merzbacher, Quantum Mechanics 3 Edición (John Wiley & Sons, 1998).
- [8] George B. Arfken, Hans J. Weber and Frank E. Harris, Mathematical Methods for Physicists Seventh Edition (ELSEVIER, 2013).
- [9] Roman P. Advanced Quantum Theory, Addison Wesley, 1 edition (1965).
- [10] John R. Taylor, Scattering Theory (Dover Publications, 1983).
- [11] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, Solid State Physics (Brooks/Cole 1976).
- [12] Wolfgang Nolting, Fundamentals of Many-body Physics, Springer, (2009).
- [13] M. L. Wall and L. D. Carr, Emergent timescales in entangled quantum dynamics of ultracold molecules in optical lattices, New Journal of Physics **11** (2009).
- [14] T.W. Hänsch and A.L. Schawlow, Cooling of Gases by Laser Radiation, Optics Communications, Volume 13, Number 1 (1974).
- [15] Christopher J. Foot, Atomic Physics (Oxford University Press, 2005).
- [16] H. J. Metcalf and P. van der Straten, Laser Cooling and Trapping (Springer-Verlag, New York 1999).
- [17] C. Trefzger, C. Menotti, Ultracold Dipolar Gases in Optical Lattices, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **44**, 193001 (2011).

- [18] R. Grimm and M. Weidemuller, Optical Dipole Traps For Neutral Atoms, arXiv:physics/9902072v1, (1999).
- [19] C. Cohen-Tannoudji and D. Guéry-Odelin, *Advances in Atomic Physics* (World Scientific, 2011).
- [20] J. W. Park, C. H. Wu, I. Santiago, T.G. Tiecke, S. Will, P.Ahmadi and M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. A* **85**, 051602 (2012).
- [21] Peter Atkins and Ronald Friedman, *Molecular Quantum Mechanics* 5 edición (Oxford 2011).
- [22] J. P. Martikainen, Cooper Problem in a lattice, *Phys. Rev.* **78**, 035602 (2008).
- [23] D. S. Petrov, M. Holzmann and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551 (2000).
- [24] A. Camacho-Guardian, G.A. Domínguez-Castro and R. Paredes, Bound states and Cooper pairs of molecules in 2D optical lattices bilayer, *Ann. Phys. (Berlin)* No.0, 1-8 (2016).
- [25] John David Jackson, *Classica Electrodynamics* Third Edition (John Wiley & Sons, Inc).
- [26] A. -L. Gadsbølle and G. M. Brunn, Harmonically trapped dipolar fermions in a two-dimensional square lattice, *Phys. Rev. A* **85** 021604(R) (2012).
- [27] Bloch I, *Ultracold Quantum Gases in Optical Lattices*, *Nat. Phys.* **1**, (2005).
- [28] Daniel E. Sheehy, Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state of two-dimensional imbalanced Fermi gases, <http://arxiv.org/pdf/1407.8021.pdf>, (2014).
- [29] Eleazar Neri Medina, *Propiedades termodinámicas de una mezcla producida por la reconversión entre fermiones y bosones ideales a bajas temperaturas*, Tesis para obtener el título de físico, (2009).
- [30] Mark Newman, *Computational Physics* (2013).

www.ann-phys.org

adp

annalen
der **physik**

WILEY-VCH

REPRINT

Bound states and Cooper pairs of molecules in 2D optical lattices bilayer

A. Camacho-Guardian, G. A. Domínguez-Castro, and R. Paredes*

Received 23 November 2015, revised 5 February 2016, accepted 2 March 2016

Published online 4 April 2016

We investigate the formation of Cooper pairs, bound dimers and the dimer-dimer elastic scattering of ultracold dipolar Fermi molecules confined in a 2D optical lattice bilayer configuration. While the energy and their associated bound states are determined in a variational way, the correlated two-molecule pair is addressed as in the original Cooper formulation. We demonstrate that the 2D lattice confinement favors the formation of zero center mass momentum bound states. Regarding the Cooper pairs binding energy, this depends on the molecule populations in each layer. Maximum binding energies occur for non-zero (zero) pair momentum when the Fermi system is polarized (unpolarized). We find an analytic expression for the dimer-dimer effective interaction in the deep BEC regime. The present analysis represents a route for addressing the BCS-BEC crossover in dipolar Fermi gases confined in 2D optical lattices within the current experimental panorama.

1 Introduction

Recent advances in experimental research on cooling and trapping macroscopic samples of ultracold molecules represent the main support for theoretically investigating quantum phases, in particular, those resulting as a function of dimensionality and anisotropy. We can mention density ordered [1], Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [2, 3], Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov-type (FFLO) [4, 5] and high T_c superfluid Fermi phase among others [6, 7]. Of particular interest is the experimental realization of fermionic superfluidity in 2D since it represents the quantum simulator of high T_c superfluidity and superconductivity, phenomena that are perhaps among the most fundamental and long standing condensed matter problems. The many-body phases here referred may arise in molecular ultracold gases as

a consequence of microscopic few body interactions, namely, the suppression of bimolecular chemical reactions when polar molecules are confined in quasi-2D configurations [8] and the essential mechanism of two-particle quantum collisions that leads either, to binding scattering of pairs or bound dimeric molecules. Nowadays, one of the major successes in a laboratory of quantum matter is the capability of handling externally, both, the two-body interactions and adjusting/tuning light structures where the molecules can move. In this context, it is worth to mention the current experiments performed with confined ultracold $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ molecules in which absolute ground state has been achieved [9], as well as the experimental realization of ultracold dipolar magnetic atoms in 2D where the interaction can be varied externally [10]. This system is very versatile in the sense that the interaction between molecules can be varied by changing the dipolar moment in each molecule, both in magnitude and direction, via externally applied electric or magnetic fields [11].

In this work we address the formation of Cooper pairs, bound states and dimer-dimer elastic scattering of dipolar Fermi molecules confined in a 2D square crystalline environment. For this purpose we consider molecules with its electric dipole moment aligned perpendicular to a double array of square optical lattices layers (see Fig. 1). This system can be thought as fermions in two different hyperfine states confined in a 2D square optical lattice with an effective interaction given by a dipolar interaction between molecules. We investigate the formation of both, bound molecular states and Cooper pairs [12], as a function of dipolar molecule interactions, maintaining fixed the ratio of the inter-layer spacing to the lattice constant defining the square lattice. The bound dimeric pairs problem is solved with the standard

* Corresponding author E-mail: rosario@fisica.unam.mx
Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,
Apartado Postal 20-364, México D. F. 01000, Mexico

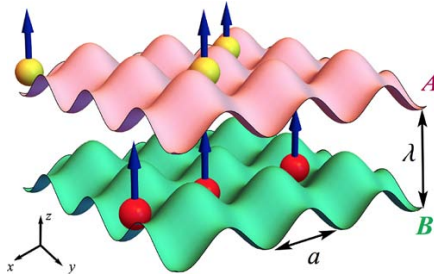


Figure 1 Schematic representation of the dipolar Fermi gas. Polar molecules in the up (down) layer can be mapped into the specie labeled with \uparrow (\downarrow) when the gas is described in a 2D layer.

variational method, while the two-molecule scattering problem is analyzed as in the original Cooper situation, considering the formation of a bound pair resulting from the exclusion principle when a degenerated Fermi gas exists. We also investigate the formation of Cooper pairs for unbalanced Fermi energies of each species, molecules lying in layers A and B respectively. As it is well known such binding pairs are the precursors of the FFLO phases [4, 5].

Previous studies for atoms with contact pseudo-potential interactions confined in a 3D lattice [13] have shown qualitative and quantitative differences of the Cooper problem with respect to the homogeneous situation, namely, pairs with nonzero center of mass momentum can be favored if the Fermi energy of each “spin” state of fermions differs [14–16]. Here, besides demonstrating these results for 2D lattices, we determined the dependence of the binding energy on the interaction strength of the long range dipolar interaction between molecules. Regarding the scattering of dimers composed of molecules we find an analytic formula to describe dimer-dimer interactions in the deep BEC regime when bound states are already formed. This result is promising in a double manner, on the one hand, current experiments with ultracold dipolar molecules allow to test the present model, and thus the achievement of superfluidity of the BEC phase, and on the other hand, the deep BEC regime can be addressed theoretically since the terms defining the many-body Hamiltonian are already set. Together with the existent literature concerning both, the study of dipolar gases at zero and finite temperature in homogeneous environments [17–20], and analysis taking into account lattice confinements [21, 22], the present analysis dealing with few-body states of fermions is a key ingredient of the many-body systems dealing with the BEC-BCS crossover.

This work is organized in 6 sections. First in section 2 the model is introduced. Then, section 3 deals with the Cooper problem for both cases, balanced and unbalanced Fermi species populations. In sections 4 and 5 we concentrate in the analysis of bound states and their elastic scattering. Finally in section 6 we present a summary of our investigation.

2 Model

To address the study depicted above we consider the following model: polar Fermi molecules are placed in a couple of 2D parallel square optical lattices, of lattice constant a , with the dipoles aligned perpendicular to the bilayer arrangement (see Fig. 1). As we explain below, this assumption allows us to neglect the intra-layer interaction and to concentrate in the dominant interlayer interaction [23, 24]. The interlayer interaction is given by

$$V(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B) = d^2 \frac{r^2 - 2\lambda^2}{(r^2 + \lambda^2)^{5/2}}, \quad (1)$$

being d the dipole moment, λ the separation among the layers, and r the intra-planar distance $r = |\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B| = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2}$, with A, B the labels for Fermi molecules in each layer. Considering this definition, here and hence forth all the distances are considered within a single layer. It is convenient to introduce two dimensionless parameters, the scaled separation among layers $\Lambda = \lambda/a$, and the effective interaction strength $\chi = a_d/\lambda = m_{eff}d^2/(\hbar^2\lambda)$, written in terms of the effective mass of an isotropic lattice $m_{eff} = \hbar^2/2ta^2$, being t the hopping strength among nearest neighbors. For current experiments [9] having $a = 532\text{nm}$, it is possible to induce dipole moments as large as $0.8D$. We are considering molecules in its absolute ground state, in those experiments having strong lattice confinement, the recoil energy $E_r = \hbar^2k^2/2m$ (where m is the molecular mass and $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ the wave vector defining the square lattices $V_{latt}(\mathbf{r}) = V_0(\sin^2(k_x x) + \sin^2(k_y y))$) is much smaller than the intensity of the optical confinement V_0 , thus implying that for a separation $\lambda \approx 0.75a$ one obtains $0.4 < \chi < 2.0$. All of our calculations were performed taking into account these values for the parameters.

It is important to stress that in general intra-layer interactions are not negligible. Depending on intra-layer interaction strength between molecules, namely $g = a_d/a$, formation of different phases (checkerboard and stripes) as well as instabilities can arise. However, for the values of the parameters here used g remains always in the weakly interaction regime [25–28] and thus

intra-layer interactions can be neglected. This approximation holds when the inter-layer spacing λ is smaller than the lattice constant a . For instance for $\lambda = 0.75a$ the inter-layer repulsion $V(\mathbf{x}_A = \mathbf{x}_B)/t$ is larger than the intra-layer interaction strength g , by a factor of $V(\mathbf{x}_A = \mathbf{x}_B)/(gt) = 5$, while for a spacing of $\lambda = 0.5a$, the quotient between intra and inter-layer interaction strength is $V(\mathbf{x}_A = \mathbf{x}_B)/(gt) = 16$.

3 Cooper problem

Schrödinger equation for the two body wave function $\Phi(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B)$ is,

$$(\hat{T}_A + \hat{T}_B + \hat{V}(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B)) \Phi(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B) = E\Phi(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B), \quad (2)$$

where \hat{T}_α is an operator that includes the kinetic energy and the optical lattice confinement. Because of the form for the interaction among fermions of types A and B , the two-body Schrödinger equation can be rewritten in terms of the center of mass and relative intraplanar coordinates \mathbf{R} and \mathbf{r} respectively. Considering this observation and following the same reasoning as that in the original Cooper formulation, one can propose a two-molecule wave function as the product $\Phi(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} u_{\mathbf{K}}(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$, being \mathbf{K} the center of mass wave vector in the reciprocal space belonging to the first Brillouin zone, $u_{\mathbf{K}}(\mathbf{R})$ a periodic function having half period of the square lattice and $\psi(\mathbf{r})$ a relative wave function to be determined. In this ansatz we have assumed both, that the lattice is deep enough to consider the lowest band only and that the tight binding approximation holds. It is important to note that because of the distinguishability of the molecules A and B it is not necessary to write the antisymmetric wave function for the pair. It is straightforward to show that the equation that $\psi(\mathbf{r})$ satisfies is,

$$(\xi_{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{T}}_D + V(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

where $\xi_{\mathbf{K}} = -2t(\cos(K_x a/2), \cos(K_y a/2))$ and $\hat{\mathbf{T}}_D \psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=x,y} (\psi(\mathbf{r} + \delta_i) + \psi(\mathbf{r} - \delta_i))$, where $\delta_i = a\hat{e}_i$, $\hat{\mathbf{T}}_D$ is the 2×2 identity matrix and \hat{e}_i the unit vector along the i direction. The energy of the ideal Fermi gas within the tight binding approximation with lattice momentum \mathbf{K} is given by $\epsilon_{\mathbf{K}} = -2t(\cos(K_x a) + \cos(K_y a))$.

Expanding the wave function for the relative coordinate $\psi(\mathbf{r})$ in terms of the relative momenta \mathbf{q}

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\mathbf{q}} \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4)$$

and defining

$$E_{\mathbf{K},\mathbf{q}} = -4t(\cos(K_x a/2) \cos(q_x a) + \cos(K_y a/2) \cos(q_y a)),$$

one ends with Eq. (3) written in the momentum representation,

$$(E - E_{\mathbf{K},\mathbf{q}}) \psi(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{q}'} V(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \psi(\mathbf{q}'). \quad (5)$$

Here it is important to stress the qualitative difference of the present study with respect to the original homogeneous Cooper 3D situation [12]. Namely, that the dependence of the center of mass and the relative wave vectors can never be decoupled when the pair is scattered in the presence of the lattice. In view of the last equation we arrive to an equation for the energy E that reads,

$$1 = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\mathbf{q}}' \frac{V(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{E_{\mathbf{K},\mathbf{q}'} - E}, \quad (6)$$

where the prime in the sum indicates that the sum has to be restricted to the allowed states. These values of \mathbf{q} are, as in the Cooper problem, associated to a pair of molecules interacting in the presence of a quiescent Fermi sea. Thus, the amplitudes for states already occupied are forbidden as a consequence of the exclusion principle. This means that in the sum we should include states, vectors with relative momentum \mathbf{q} , that simultaneously satisfy

$$\epsilon_{\frac{\mathbf{k}}{2} + \mathbf{q}} > \epsilon_F^A \text{ and } \epsilon_{\frac{\mathbf{k}}{2} - \mathbf{q}} > \epsilon_F^B. \quad (7)$$

In accordance with the above argument we look for solutions in the s-wave approximation $\psi(\mathbf{r})$ having energies $E = \epsilon_F^A + \epsilon_F^B - \Delta$, with $\Delta > 0$, that is, with less energy than the sum of Fermi energy of each layer. Investigation of these energies lead us to determine the energy gap, for different values of the parameter that characterizes the interaction, as a function of the center of mass momentum vector \mathbf{K} and of the Fermi energy in layers A and B . All of our numerical calculations were done considering $N_x = N_y = 5 \times 10^2$. Numerical calculations with larger values of sites produce the same results. It is important to emphasize that the density of states has a divergence at $\epsilon_F = 0$, and thus the results presented are valid away from the half filling, namely away from $\epsilon_F = 0$.

First, we concentrate in studying the dependence of the energy gap as a function of the Fermi energy for symmetric lattices. Namely $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B$. In Fig. (2) we plot Δ as a function of the Fermi energy, considering several values of χ for a fixed value of the interlayer separation. For simplicity we assume $K_x = K_y = 0$. Squares, circles

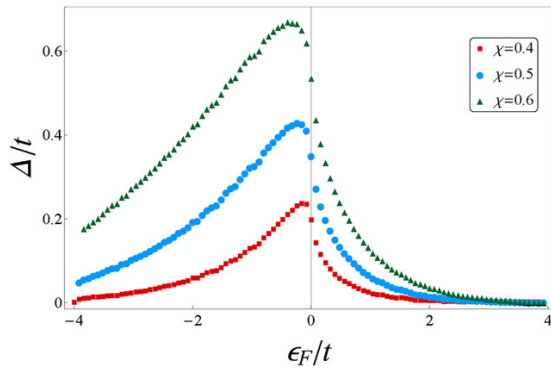


Figure 2 Energy gap Δ as a function of the Fermi energy in a symmetric lattice $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B$.

and triangles, correspond to $\chi = 0.4, 0.5$ and 0.6 respectively. As in the study performed for 3D square lattices [13], we found that the binding energy increases and reaches a maximum value as a function of the Fermi energy. Then, when Fermi surfaces change from close to open the binding energy shows an exponential decay of the form $\Delta \sim \exp^{-\epsilon_F/\alpha}$, being $\alpha \sim \chi$. We also notice that as the interaction strength increases the binding energy has a maximum value that becomes shifted as the Fermi energy decreases. As it is well known an insulating phase can be reached either, by increasing the filling factor or by increasing the interaction strength, that is, the transport in the lattice become inhibited as a consequence of having most of the states already occupied thus preventing the formation Cooper pairs, or because of entering at the regime where the interactions dominate. Accordingly, our results in Fig. (2) exhibit this behavior as a function of the interaction strength χ .

Next, for illustrating the influence of the energy gap on the center of mass momentum \mathbf{K} , in Fig. (3) we plot the dimensionless energy gap Δ/t as a function of $K_x a$ assuming $K_y = 0$ for $\chi = (0.4, 0.5, 0.6)$. In this case we have considered similar circumstances as those in Fig. (2) ($\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0.5t$). We observe that the maximum value of Δ occurs for center of mass momentum near $\mathbf{K} = 0$. As before, the largest the effective interaction is, the greater the binding energy become.

To complement the study of the Cooper problem we analyze the dependence of the energy gap on the center of mass momentum for non-symmetric values of the Fermi energy in layers A and B . To exemplify that formation of pairs also happens in this case, we select $\chi = 0.5$ and determine the behavior of Δ for unbalanced Fermi energies $\Delta\epsilon = \epsilon_A - \epsilon_B$. In Fig. (4) we plot several curves of the binding energy associated to unequal Fermi

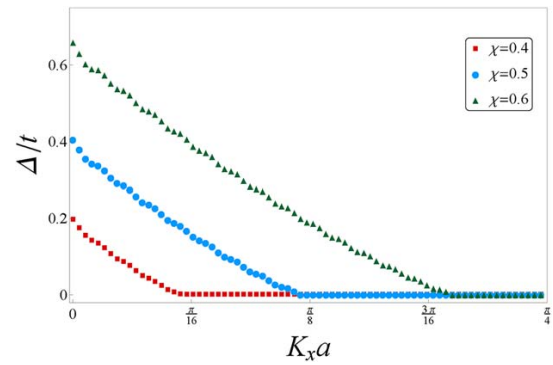


Figure 3 Δ as a function of $K_x a$ for symmetric Fermi energies $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0.5t$. We selected $K_y = 0$. From top to bottom $\chi = 0.4, 0.5$ and 0.6 .

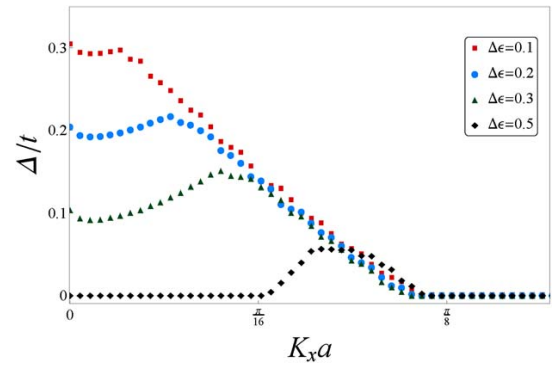


Figure 4 Δ as a function of $K_x a$ for non-symmetric Fermi energies. We selected for the Fermi energy of one layer $\epsilon_F^A = -0.5t$ $K_y = 0$ and $\chi = 0.5$. From top to bottom $\Delta\epsilon = 0.1, 0.2, 0.3$ and 0.5 .

energies $\Delta\epsilon = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5$, we keep $\epsilon_F^A = -0.5t$ fixed. We find, as in the previous study for two-body contact interactions in 3D [13], that in systems with unequal Fermi energies formation of Cooper pairs of nonzero center of mass momentum is favored. We also reach the conclusion that when the difference among the Fermi energies ϵ_F^A and ϵ_F^B is too large, the Cooper pair cannot be formed. One can explain this behavior as caused by the imbalance in the filling factors which results in the impossibility of pairing molecules of type A lying on the surface with other molecules having largest Fermi energy. However, by properly adjusting the populations of molecules in each layer, the binding energy can be maximized and therefore FFLO phases can be observed.

In Fig. (5) on the left we illustrate the possible pairs that can be formed in our model. We should point out that for typical experiments with ultracold molecules

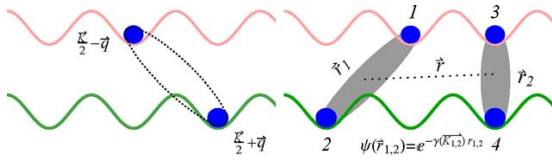


Figure 5 We illustrate in this scheme the possible Cooper pairs (dotted lines) and dimers that can be formed in the bilayer array. On the left Cooper pairs are shown, while on the right shadow ellipses illustrate a couple of bound dimers of molecules. Bound states in real space has an exponentially decay, while Cooper pairs does not.

confined them in square optical lattices in 2D, this cartoon represent plausible size of pairs. As it is well known Cooper pairs look like bound states in the momentum representation but it have an algebraic decay in the space representation, in contrast with a true bound state that has an exponential decay. It is interesting to note that functional integral calculations of the BCS state at $T = 0$ [22] predicts similar values for the binding energy as those here obtained for the two-body problem.

4 Bound states of molecules

Now we investigate the existence of true bound states in the square lattice, namely, dimers composed of two molecules. To determine the energy of the dimer we use the standard variational method [29], proposing a two molecule wave function describing the bound pair. We investigate this energy taking into account the presence of the lattice as well as the dependence on the effective interaction between molecules measured in terms of the parameter χ , for a fixed value of the bilayer array $\lambda = 0.75a$. To study the behavior of the energy, we propose an ansatz for the two body wave function,

$$\Phi_B(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}), \quad (8)$$

with $\psi(\mathbf{r}) = Ae^{-\gamma r}$, being γ a variational parameter and A a normalization constant. \mathbf{K} is the reciprocal center of mass wave vector in the first Brillouin zone. We numerically solve the equation $H\Phi(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B) = E_B\Phi(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B)$. Our calculations were done considering $N_x = N_y = 250$. In Fig. (6) we plot the energy as a function of χ (squares). As can be appreciated from this figure, the trial wave function that we choose does not allow the formation of bound states for arbitrary values of χ . In turn, solutions start to appear from a particular value of χ , that is, for smaller values of $\chi \approx 0.51$ the molecules form a scattered pair. The inset of this figure includes several curves of

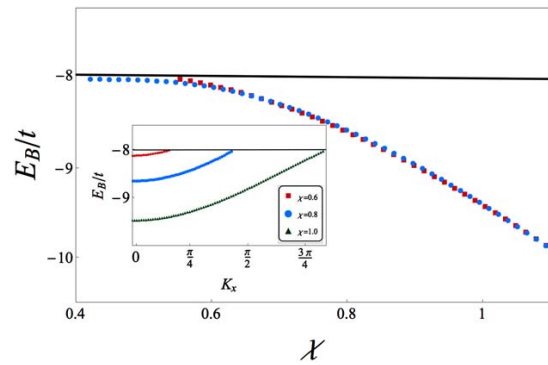


Figure 6 Energy of bound states E_B as a function of χ . We show both, the solution of Eq. (6) in the absence of Fermi surfaces (circles), and the variational energy (squares). In the inset we plot curves of E_B as a function of the center of mass reciprocal vector along x direction for $\chi = 0.6, 0.8, 1.0$. The solid line at $-8t$ is the minimal energy of a pair of free fermions in presence of the optical lattice, namely, indicates the bottom of the continuum.

E_B as a function K_x for $\chi = 0.6, 0.8, 1.0$. Because of the symmetry of the square lattice, analogous results for E_B as a function of K_y are obtained. As Fig. (6) demonstrate, formation of bound states is favored for the center of mass $\mathbf{K} = 0$ as in the unpolarized Fermi system.

For comparison purposes we solve Eq. (6) without the constrains provided by the Fermi sea. Such a procedure provides the energy of the bound state but does not give any information about the wave function. The energy of the bound state using Eq. (6) is plotted in Fig. (6) in circles. As shown in this figure, for weak interactions the ansatz (8) is a good approximation for the two body wave function.

5 Scattering of bound molecules

To complete the analysis of the problem for the bound states we now investigate the elastic scattering of interacting pairs, that is, the scattering among dimers composed of two molecules. In Fig. (5) we show schematically two bound pairs of molecules lying in the bilayer array. The molecules composing those bound pairs are labeled with numbers 1 and 2, and 3 and 4 respectively. We assume that these dimers form a couple of rigid dumbbells with a bound energy E_B and a wave function $\phi_B(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B)$. The dumbbells do not have vibrational nor rotational degrees of freedom. Thus, although molecules interact each other, the dumbbell tunnel across jointly. The four-body

Hamiltonian of such a system is,

$$H = \sum_{s=1}^4 \hat{T}_s + \hat{V}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + \hat{V}(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4) + \hat{V}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4) + \hat{V}(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2), \quad (9)$$

where the operator \hat{T}_i contains, as before, the kinetic energy and the lattice confinement potential. We look for solutions $\hat{H}\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4) = E\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4)$. For this purpose we first define the center of mass and relative coordinates in terms of \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, 4$, as follows,

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, & \mathbf{r}_2 &= \mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_4, \\ \mathbf{r} &= \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2, & \mathbf{R} &= \frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2}, \end{aligned} \quad (10)$$

being $\mathbf{R}_1 = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$ and $\mathbf{R}_2 = (\mathbf{x}_3 + \mathbf{x}_4)/2$. The wave function ϕ is symmetric with respect to the permutation of the dimers and antisymmetric with respect to permutations of molecules within the same lattice. We proceed in the same way as in the Cooper problem expressing the Schrödinger equation in terms of \mathbf{R}_i and \mathbf{r}_i coordinates, considering tunneling of nearest neighbor only. The ideal term in this case becomes:

$$\begin{aligned} & \sum_{s=1}^4 \hat{T}_s \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}, \mathbf{R}) = \\ & -J \sum_{i=x,y} \phi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r} \pm \delta_i, \mathbf{R} \pm \frac{\delta_i}{2}\right) \\ & + \phi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r} \mp \delta_i, \mathbf{R} \pm \frac{\delta_i}{2}\right), \end{aligned} \quad (11)$$

where J is the tunneling coupling constant of dimerized molecules, $J = \frac{t}{2}$. Since the interaction between molecules is independent of \mathbf{R} , a solution of the form $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}) U_{\mathbf{K}}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$ can be proposed, being \mathbf{K} the reciprocal wave vector of the center of mass of the four-body system, and $U_{\mathbf{K}}(\mathbf{R})$ a periodic function with half-period of the square lattice. After we substitute this ansatz into the four-body Schrödinger equation, multiply by $U_{\mathbf{K}}^*(\mathbf{R})$, and sum over the vectors \mathbf{R} we obtain,

$$\begin{aligned} E\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}) &= \\ & -2J \sum_{i=x,y} \cos\left(\frac{K_i a}{2}\right) (\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r} \pm \delta_i) + \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r} \mp \delta_i)) \\ & + (V(r_1) + V(r_2)) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}) + \left(V\left(\left|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right|\right) \right. \\ & \left. + V\left(\left|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right|\right) \right) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (12)$$

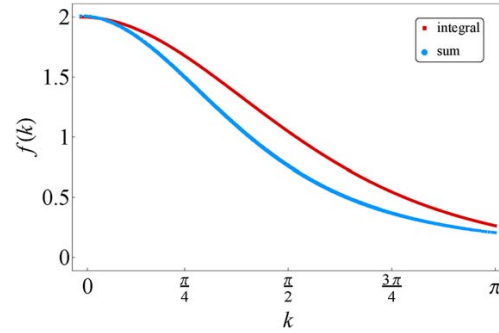


Figure 7 We illustrate the ratio among of the effective interaction potential $V_{eff}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ in Eq. (14) to the dipolar interaction potential between molecules $V_{dip}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$.

In the deep BEC regime, namely when the wave function describing each bound pair is sharply localized, one can write a decoupled solution of the form $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}) \approx \psi(r_1)\psi(r_2)\varphi(\mathbf{r})$, where $\psi(r_1)$ and $\psi(r_2)$ are the variational wave functions describing the bound pairs determined above. In addition to these substitution, one can write $\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. Then, after summing over the \mathbf{r}_1 and \mathbf{r}_2 coordinates, we obtain the equation for $\varphi_{\mathbf{q}}$,

$$\begin{aligned} E\varphi_{\mathbf{q}} &= 2 \left[\xi_B - 4J \sum_{i=x,y} \cos\left(\frac{K_i a}{2}\right) \cos(q_i a) \right] \varphi_{\mathbf{q}} \\ & + \sum_{\mathbf{q}'} \varphi_{\mathbf{q}'} V_{eff}(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \end{aligned} \quad (13)$$

where $\xi_B = E_B + 8t$ and the effective interaction potential is given by,

$$\begin{aligned} V_{eff}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') &= \\ & \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} V(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cos\left(\left(\mathbf{q} - \mathbf{q}'\right) \cdot \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right) \psi^2(r_1)\psi^2(r_2). \end{aligned} \quad (14)$$

This effective potential comes from the interaction between molecules belonging to different dimers. When the sums over \mathbf{r}_1 and \mathbf{r}_2 are replaced by an integral $V_{eff}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = 2 \frac{V(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{\left(\left|\frac{\mathbf{q} - \mathbf{q}'}{4\gamma(x)}\right|^2 + 1\right)^3}$. Thus, from this expression for the effective interaction between dimers one arrives to the conclusion that the dimer-dimer interaction is screened by a factor of $f(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) = f(k)$ where $f(k) = \frac{2}{\left(\frac{k^2}{4\gamma(x)} + 1\right)^3}$. In Fig. (7) we plot $f(k)$ as a function of k , blue and red curves correspond to discrete sums over \mathbf{r}_1 and \mathbf{r}_2 and the analytic expression when the sums are replaced by integrals respectively. This behavior is

reminiscent of the well known result for contact interactions in 3D homogeneous space [30] where the effective interaction between dimers formed by atoms changes from $2a$ to $0.6a$, being a the s -wave scattering length.

Our analysis for the dimer-dimer elastic scattering leads us to obtain an analytic expression for the effective potential among dimers in the deep BEC regime. Thus, with this information one can write the many-body Hamiltonian describing dimers lying on 2D square lattice arrays, namely,

$$\hat{H}_d = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_d(\mathbf{k}) - \mu) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{eff}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{q}-\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}, \quad (15)$$

where $\epsilon_d(\mathbf{k}) = \xi_B - 2J \sum_{i=x,y} \cos(k_i a)$, and the subscript d make explicit the fact that single components are the Bose dimers formed by pairs of molecules [31, 32].

6 Final remarks

We have solved the problems of Cooper pairs, molecular bound states and scattering of bound dimers, of dipolar Fermi molecules confined in a double array of square optical lattices in 2D. We determined the influence of both, the finite range interaction potential and the lattice confinement on the optimal binding energy of the Cooper pairs, the bound states or dimers composed of two molecules and the dimer-dimer elastic scattering. Numerical calculations for square lattices of size $N_x = N_y = 5 \times 10^2$ allowed us to demonstrate that zero center of mass momentum bound pairs are favored, while being this picture modified in the case of Cooper pairs. Polarized and unpolarized populations in each layer produce maximum binding energies for non-zero and zero pair momentum center of mass pair momentum respectively. We also found that the binding energy of Cooper pairs is maximized as the inter-molecule interaction strength increases. In addition to the two-molecule problem we studied the elastic scattering between dimers formed by two molecules and found a closed formula for the effective dimer-dimer interactions in the deep BEC regime where bound pairs are already formed.

Given the correspondence among two-component Fermi systems confined in 2D crystalline environments and the model here proposed, the present study is promising for achieving superfluidity in 2D lattices within the current experimental research. For instance, for the model here considered the critical temperature associated with the superfluid phases is between 6nK

and 20nK for gases of Fermi molecules of NaK [22]. Even more, considering the possibility of externally modifying the electric or magnetic fields [9], to controlling two-molecule interactions, our model provides the specific form that the dimer-dimer interaction must have in the deep BEC from a theoretical perspective.

Acknowledgments. This work was partially funded by grant IN107014 DGAPA (UNAM). A.C.G. acknowledges scholarship from CONACYT.

Key words. Ultracold Fermi Gases, BEC-BCS crossover, Few Body Physics.

References

- [1] M. M. Parish and E.M. Marchetti, Phys. Rev. Lett. **108**, 145304 (2012).
- [2] V. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971).
- [3] J. Kosterlitz and D. Thouless, J. Phys. C **6**,12 (1973).
- [4] P. Fulde and R. A. Ferrell, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).
- [5] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1136 (1964).
- [6] A. Perali, D. Nelson, and A.R. Hamilton, Phys. Rev. Lett. **110**, 146803 (2013).
- [7] Q. Chen, J. Stajic, S. Tan, and K. Levin, Phys. Rep **412**, 1 (2005).
- [8] M. H. G. de Miranda, et al., Nat. Phys. **7**, 502 (2011).
- [9] J. W. Park, S.A. Will, and M.W. Zwierlein, Phys. Rev. Lett. **114**, 205302 (2015).
- [10] A. Frisch, M. Mark, K. Aikawa, S. Baier, R. Grimm, A. Petrov, S. Kotochigova, G. Quémener, M. Lepers, O. Dulieu, and F. Ferlaino, Phys. Rev. Lett. **115**, 203201 (2015).
- [11] G. Quémener and P. Julienne, Chem. Rev. **112**, 4949 (2012).
- [12] L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [13] J. -P. Martikainen, Phys. Rev. A **78**, 035602 (2008).
- [14] M. Valiente and D. Petrosyan, J. Phys. B. **41**, 161002 (2008).
- [15] M. Wouters and G. Orso, Phys. Rev. A **73**, 012707 (2006).
- [16] M. Valiente, Phys. Rev. A **81**, 042102 (2010).
- [17] A. G. Volosniev, N. T. Zinner, D. V. Fedorov, A. S. Jensen, and B. Wunsch, J. Phys. B **44**, 125301 (2011).
- [18] N. T. Zinner, J. R. Armstrong, A. G. Volosniev, D. V. Fedorov, and A. S. Jensen, Few Body Syst **53**, 369 (2012).
- [19] A. Pikovski, M. Klawunn, G. V. Shlyapnikov, and L. Santos, Phys. Rev. Lett. **105**, 215302 (2010).
- [20] A. C. Potter, E. Berg, D. -W. Wang, B. I. Halperin and E. Demler, Phys. Rev. A **105**, 220406 (2010).
- [21] T. Vanhala, J. Baarsma, M. Heikkinen, M. Troyer, A. Harju, and P. Törmä, Phys. Rev. B **91**, 144510 (2015).
- [22] A. Camacho-Guardian and R. Paredes, Arxiv preprint cond-mat 1505.03811. <http://arxiv.org/abs/1505.03811> (2015).

- [23] M. A. Baranov, *Phys. Rep* **464**, 71 (2008).
- [24] M. A. Baranov, M. Dalmonte, G. Pupillo, and P. Zoller, *Chem. Rev* **12**, 5012 (2012).
- [25] A. -L. Gadsbølle and G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **85**, 021604(R) (2012).
- [26] K. Mielsonson and J. K. Freericks, *Phys. Rev. A* **83**, 043609 (2011).
- [27] E. G. C. P. van Loon, M. I. Katsnelson, and M. Leshchko, *Phys. Rev. B* **92**, 081106(R) (2015).
- [28] Z. Wu, J. K. Block, and G. M. Bruun, *Phys. Rev. B* **91**, 224504 (2015).
- [29] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics Third Edition* (Butterworth Heinemann, 1977)
- [30] D. S. Petrov, C. Salomon, and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 0900404 (2004).
- [31] C. Trefzger, C. Menotti, B. Capogrosso-Sansone, and M. Lewenstein, *J. Phys. B* **88**, 193001 (2011).
- [32] K. Góral, L. Santos, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett* **88**, 170406 (2002).

Apéndice A

Código E_B/t vs χ red cuadrada

```
from math import exp,cos,pi,sqrt
from numpy import dot,empty

Nx=250
Ny=250
pts=50
K=[0,0]
Lambda=0.75

def f1(x,y,b):
    f1=exp(-b*(x**2+y**2)**(1/2.))
    return f1

def td1(x,y,b,f1):
    td1=[f1(x-a,y,b)-2*f1(x,y,b)+f1(x+a,y,b),f1(x,y-a,b)-&
    &2*f1(x,y,b)+f1(x,y+a,b)]
    return td1

def V(x,y,chi):
    V=(2*Lambda*chi*(x**2+y**2-2*Lambda**2)/(x**2+y**2+Lambda**2)**(5/2.))
    return V

def ek(kx,ky):
    ek=[-2*cos(0.5*kx),-2*cos(0.5*ky)]
    return ek

def g1(b,kx,ky,chi):
    s1=0
    t1=0
    for i in range(-Nx,Nx+1):
        for j in range(-Ny,Ny+1):
            s1 += f1(i,j,b)*dot(ek(kx,ky),td1(i,j,b,f1))+&
            &f1(i,j,b)*V(i,j,chi)*f1(i,j,b)
```

```

    t1 += f1(i, j, b)*f1(i, j, b)
g1=s1/t1
return g1

def ks(p):
    ks1=[]
    for i in range(0, p+1):
        ks1.append((pts)**(-1)*i)
    return ks1

ks2=ks(pts)
M8=empty([pts+1, 2], float)
l=[]

epsilon=1e-6
z=0.5*(1+sqrt(5))
epsilon2=1e-3

i=0
for w1 in ks2:
    x11=0.1
    x44=4
    x22=x44-(x44-x11)/z
    x33=x11+(x44-x11)/z

    f11=g1(x11, K[0], K[1], w1)
    f22=g1(x22, K[0], K[1], w1)
    f33=g1(x33, K[0], K[1], w1)
    f44=g1(x44, K[0], K[1], w1)

    while x44-x11>epsilon:
        if f22<f33:
            x44, f44=x33, f33
            x33, f33=x22, f22
            x22=x44-(x44-x11)/z
            f22=g1(x22, K[0], K[1], w1)
        else:
            x11, f11=x22, f22
            x22, f22=x33, f33
            x33=x11+(x44-x11)/z
            f33=g1(x33, K[0], K[1], w1)
    if abs(4-0.5*(x11+x44))<epsilon2 or abs(0.1-0.5*(x11+x44))<epsilon2:
        M8[i:]=[w1, 0]
        i +=1
    else:
        M8[i:]=[w1, g1(0.5*(x11+x44), K[0], K[1], w1)-&

```

```
&4*(cos(0.5*K[0])+cos(0.5*K[1]))]
i +=1
print i

outfile=open("evschi.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.7f" % column)
    outfile.write("\n")
outfile.close()
```

Apéndice B

Código E_B/t vs $K_x a$ red cuadrada

```
from math import exp,cos,pi,sqrt
from numpy import dot,empty

Nx=250
Ny=250
chi=0.5
Lambda=0.75

def f1(x,y,b):
    f1=exp(-b*(x**2+y**2)**(1/2.))
    return f1

def td1(x,y,b,f1):
    td1=[f1(x-a,y,b)-2*f1(x,y,b)+f1(x+a,y,b),f1(x,y-a,b)-&
    &2*f1(x,y,b)+f1(x,y+a,b)]
    return td1

def V(x,y):
    V=(2*Lambda*chi*(x**2+y**2-2*Lambda**2)/(x**2+y**2+Lambda**2)**(5/2.))
    return V

def ek(kx,ky):
    ek=[-2*cos(0.5*kx),-2*cos(0.5*ky)]
    return ek

def g1(b,kx,ky):
    s1=0
    t1=0
    for i in range(-Nx,Nx+1):
        for j in range(-Ny,Ny+1):
            s1 += f1(i,j,b)*dot(ek(kx,ky),td1(i,j,b,f1))+&
            &f1(i,j,b)*V(i,j)*f1(i,j,b)
            t1 += f1(i,j,b)*f1(i,j,b)
```

```

g1=s1 / t1
return g1

def ks(p):
    ks1=[]
    for i in range(-p,p+1):
        ks1.append([pi*Nx**(-1)*i,0])
    return ks1

ks2=ks(Nx)
M8=empty([2*Nx+1,2],float)
l=[]

epsilon=1e-6
z=0.5*(1+sqrt(5))
epsilon2=1e-3

i=0
for w1 in ks2:
    x11=.01
    x44=6
    x22=x44-(x44-x11)/z
    x33=x11+(x44-x11)/z

    f11=g1(x11,w1[0],0)
    f22=g1(x22,w1[0],0)
    f33=g1(x33,w1[0],0)
    f44=g1(x44,w1[0],0)

    while x44-x11>epsilon:
        if f22<f33:
            x44,f44=x33,f33
            x33,f33=x22,f22
            x22=x44-(x44-x11)/z
            f22=g1(x22,w1[0],0)
        else:
            x11,f11=x22,f22
            x22,f22=x33,f33
            x33=x11+(x44-x11)/z
            f33=g1(x33,w1[0],0)
    if abs(6-0.5*(x11+x44))<epsilon2 or abs(0.01-0.5*(x11+x44))<epsilon2:
        M8[i:]=[w1[0],0]
        i +=1
    else:
        M8[i:]=[w1[0],g1(0.5*(x11+x44),w1[0],0)-4*(cos(0.5*w1[0])+1)]
        i +=1

```

```
print i

outfile=open("E05.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.7f" % column)
    outfile.write("\n")
outfile.close()
```

Apéndice C

Código E_B/t vs χ red triangular

```
from math import exp,cos,pi,sqrt
from numpy import dot,arange,array,empty

Nx=120
Ny=120
a=1
l=0.75

a1=array([1,0],float)
a2=array([-0.5,0.5*sqrt(3)],float)
Red=[]

def f1(x,y,b):
    f1=exp(-b*(x**2+y**2)**(1/2.))
    return f1

def td1(x,y,b,g):
    td1=[g(x-0.5*a,y-0.5*a*sqrt(3),b),g(x+0.5*a,y+0.5*a*sqrt(3),b)]
    return td1

def ek1(kx,ky):
    ek1=[cos(0.25*kx*a+0.25*ky*a*sqrt(3)),cos(0.25*kx*a+0.25*ky*a*sqrt(3))]
    return ek1

def td2(x,y,b,g):
    td2=[g(x+0.5*a,y-0.5*a*sqrt(3),b),g(x-0.5*a,y+0.5*a*sqrt(3),b)]
    return td2

def ek2(kx,ky):
    ek2=[cos(0.25*kx*a-0.25*ky*a*sqrt(3)),cos(0.25*kx*a-0.25*ky*a*sqrt(3))]
    return ek2

def td3(x,y,b,g):
```

```

td3=[g(x+a,y,b),g(x-a,y,b)]
return td3

def ek3(kx,ky):
ek3=[cos(0.5*kx*a),cos(0.5*ky*a)]
return ek3

def V(x,y,d):
V=(3*1*d*(x**2+y**2-2*1**2)/(x**2+y**2+1**2)**(5/2.))
return V

for i in range(-Nx,Nx+1):
for j in range(-Nx,Nx+1):
Red.append(a1*i+a2*j)
print len(Red)

def g1(b,d):
s1=0
n1=0
for w in Red:
s1 +=-2*f1(w[0],w[1],b)*dot(ek1(0,0),td1(w[0],w[1],b,f1))-&
&2*f1(w[0],w[1],b)*dot(ek2(0,0),td2(w[0],w[1],b,f1))-&
&2*f1(w[0],w[1],b)*dot(ek3(0,0),td3(w[0],w[1],b,f1))+&
&f1(w[0],w[1],b)*V(w[0],w[1],d)*f1(w[0],w[1],b)
n1 +=f1(w[0],w[1],b)*f1(w[0],w[1],b)
g1=s1/n1
return g1

h=arange(0.5,1.05,0.05)
M8=empty([len(h),2],float)

epsilon=1e-6
z=0.5*(1+sqrt(5))
epsilon2=1e-3
i=0

for d in h:
x11=0.1
x44=2
x22=x44-(x44-x11)/z
x33=x11+(x44-x11)/z

f11=g1(x11,d)
f22=g1(x22,d)
f33=g1(x33,d)
f44=g1(x44,d)

```



```

while x44-x11>epsilon:
    if f22<f33:
        x44, f44=x33, f33
        x33, f33=x22, f22
        x22=x44-(x44-x11)/z
        f22=g1(x22, d)
    else:
        x11, f11=x22, f22
        x22, f22=x33, f33
        x33=x11+(x44-x11)/z
        f33=g1(x33, d)
    if abs(0.1-0.5*(x11+x44))<epsilon2 or abs(2-0.5*(x11+x44))<epsilon2:
        M8[i:]=[d,0]
        i +=1
    else:
        M8[i:]=[d, g1(0.5*(x11+x44), d)]
        i +=1

outfile=open("hexchiK0.dat", "w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.7f" % column)
    outfile.write("\n")
outfile.close()

```

Apéndice D

Código E_B/t vs $K_i a$ red triangular

```
from math import exp,cos,pi,sqrt
from numpy import dot,arange,array,empty

Nx=120
Ny=120
a=1
l=0.75
d=1.3

a1=array([1,0],float)
a2=array([-0.5,0.5*sqrt(3)],float)
Red=[]

def f1(x,y,b):
    f1=exp(-b*(x**2+y**2)**(1/2.))
    return f1

def td1(x,y,b,g):
    td1=[g(x-0.5*a,y-0.5*a*sqrt(3),b),g(x+0.5*a,y+0.5*a*sqrt(3),b)]
    return td1

def ek1(kx,ky):
    ek1=[cos(0.25*kx*a+0.25*ky*a*sqrt(3)),cos(0.25*kx*a+0.25*ky*a*sqrt(3))]
    return ek1

def td2(x,y,b,g):
    td2=[g(x+0.5*a,y-0.5*a*sqrt(3),b),g(x-0.5*a,y+0.5*a*sqrt(3),b)]
    return td2

def ek2(kx,ky):
    ek2=[cos(0.25*kx*a-0.25*ky*a*sqrt(3)),cos(0.25*kx*a-0.25*ky*a*sqrt(3))]
    return ek2
```

```

def td3(x,y,b,g):
    td3=[g(x+a,y,b),g(x-a,y,b)]
    return td3

def ek3(kx,ky):
    ek3=[cos(0.5*kx*a),cos(0.5*ky*a)]
    return ek3

def V(x,y):
    V=(3*1*d*(x**2+y**2-2*1**2)/(x**2+y**2+1**2)**(5/2.))
    return V

for i in range(-Nx,Nx+1):
    for j in range(-Ny,Ny+1):
        Red.append(a1*i+a2*j)
print len(Red)

def g1(b,kx):
    s1=0
    n1=0
    for w in Red:
        s1 +=-2*f1(w[0],w[1],b)*dot(ek1(kx,0),td1(w[0],w[1],b,f1))-&
        &2*f1(w[0],w[1],b)*dot(ek2(kx,0),td2(w[0],w[1],b,f1))-&
        &2*f1(w[0],w[1],b)*dot(ek3(kx,0),td3(w[0],w[1],b,f1))+&
        &f1(w[0],w[1],b)*V(w[0],w[1])*f1(w[0],w[1],b)
    n1 +=f1(w[0],w[1],b)*f1(w[0],w[1],b)
    g1=s1/n1
    return g1

def ks(p):
    ks1=[]
    for i in range(0,p+1):
        ks1.append([(4/3.)*pi*i*(Nx)**(-1),0])
    return ks1

ks2=ks(Nx)
print len(ks2)
M8=empty([Ny+1,2],float)
i=0

epsilon=1e-6
z=0.5*(1+sqrt(5))
epsilon2=1e-3
i=0

for v in ks2:

```

```

x11=0.1
x44=2
x22=x44-(x44-x11)/z
x33=x11+(x44-x11)/z

f11=g1(x11,v[0])
f22=g1(x22,v[0])
f33=g1(x33,v[0])
f44=g1(x44,v[0])

while x44-x11>epsilon:
    if f22<f33:
        x44,f44=x33,f33
        x33,f33=x22,f22
        x22=x44-(x44-x11)/z
        f22=g1(x22,v[0])
    else:
        x11,f11=x22,f22
        x22,f22=x33,f33
        x33=x11+(x44-x11)/z
        f33=g1(x33,v[0])
    if abs(0.1-0.5*(x11+x44))<epsilon2 or abs(2-0.5*(x11+x44))<epsilon2:
        M8[i:]=[v[0],0]
        i +=1
        print i
    else:
        M8[i:]=[v[0],g1(0.5*(x11+x44),v[0])]
        i +=1
        print i

outfile=open("hexkxchi13.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.7f" % column)
    outfile.write("\n")
outfile.close()

```

Apéndice E

Código Δ/t vs ε_F/t red cuadrada balanceada

```
from math import cos, sin, pi
from numpy import arange, array, empty, loadtxt
import random as rn

Nx=250
Ny=250
error=1e-8
K=array([0,0], float)
Chi=0.5
Lambda=0.75
DFV=loadtxt("Transformada_Lambda75_501.dat", float)

def E(q,k):
    return -4*(cos(0.5*k[0])*cos(q[0])+cos(0.5*k[1])*cos(q[1]))

def E1(q):
    return -2*(cos(q[0])+cos(q[1]))

def G(q, Ef, delta):
    return (2*Ef-delta-E(q,K))**(-1)

Fermi=arange(-4.0,4.0,0.08)
M8=empty([len(Fermi),2], float)

i=0
for w9 in Fermi:
    print w9
    Q1=[]
    M=[]
    for l9 in range(0,(2*Nx+1)**2):
        w1=array([DFV[l9,:][0],DFV[l9,:][1]], float)
```

```

if E1(w1+0.5*K)>w9 and E1(-w1+0.5*K)>w9:
    Q1.append(w1)
    M.append(Chi*DFV[19 ,:][2])
print len(Q1)

def Suma(delta):
    s=0
    s1=0
    for w2 in Q1:
        s += M[s1]*G(w2,w9,delta)
        s1 +=1
    return s

def Sumap(delta):
    l1=0
    l2=0
    for w3 in Q1:
        l1 +=M[l2]*(G(w3,w9,delta))**2
        l2 +=1
    return l1

d1=0.01
I7=arange(0.0,1.0,d1)
for j1 in I7:
    if (1-Suma(j1))<0 and (1-Suma(j1+d1))>0:
        delta2=1
        x2=rn.uniform(j1,j1+d1)
        while abs(delta2)>error:
            l5=Suma(x2)
            delta2=(1-l5)*(Sumap(x2))**(-1)
            x2 +=delta2
            print x2
            if x2>j1+d1 or x2<j1:
                x2=rn.uniform(j1,j1+d1)
            print "vuelta"
        break

print i
if j1 >0.98:
    M8[i:]=[w9,0]
    i += 1
else:
    M8[i:]=[w9,x2]
    i += 1

outfile=open("gap_Lambda75_501.dat","w")

```

```
for row in M8:  
    for column in row:  
        outfile.write("%14.6f" % column)  
        outfile.write("\n")  
outfile.close()
```

Apéndice F

Código Δ/t vs $K_x a$ red cuadrada balanceada

```
from math import cos, sin, pi
from numpy import arange, array, empty, loadtxt
from cmath import exp
import random as rn

Nx=250
Ny=250
error=1e-8
Efermi=-0.5
Chi=0.5
Lambda=0.75
DFV=loadtxt("Transformada_Lambda75_501.dat", float)

def E(q, k):
    return -4*(cos(0.5*k[0])*cos(q[0])+cos(0.5*k[1])*cos(q[1]))

def E1(q):
    return -2*(cos(q[0])+cos(q[1]))

def G(q, k, delta):
    return (Efermi-delta-E(q, k))*(-1)

M8=empty([Nx+1, 2], float)
Ks=[]
M=[]

for b5 in range(0, Nx+1):
    Ks.append([pi*Nx**(-1)*b5, 0])

i=0
for w9 in Ks:
```



```

print w9
Q1=[]
for l9 in range(0,(2*Nx+1)**2):
    w1=array ([DFV[l9 ,:][0] ,DFV[l9 ,:][1]] , float)
    if E1(w1+0.5*array (w9, float))>Efermi and &
    &E1(-w1+0.5*array (w9, float))>Efermi :
        Q1.append(w1)
        M.append(Chi*DFV[l9 ,:][2])
print len(Q1)

def Suma(delta):
    s=0
    s1=0
    for w2 in Q1:
        s += M[s1]*G(w2,w9,delta)
        s1 +=1
    return s

def Sumap(delta):
    l1=0
    l2=0
    for w3 in Q1:
        l1 +=M[l2]*(G(w3,w9,delta))**2
        l2 +=1
    return l1

d1=0.01
I7=arange(0.0,0.9,d1)
for j1 in I7:
    if (1-Suma(j1))<0 and (1-Suma(j1+d1))>0:
        delta2=1
        x2=rn.uniform(j1,j1+d1)
        while abs(delta2)>error:
            l5=Suma(x2)
            delta2=(1-l5)*(Sumap(x2))**(-1)
            x2 +=delta2
            print x2
            if x2>j1+d1 or x2<j1:
                x2=rn.uniform(j1,j1+d1)
            print "vuelta"
        break

print i
if j1 >0.9:
    M8[i :]=[w9[0],0]
    i += 1

```

```
else :
    M8[i :]=[w9[0],x2]
    i += 1

outfile=open("gap_Lambda75_501.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.6f" % column)
    outfile.write("\n")
outfile.close()
```

Apéndice G

Código Δ/t vs $K_x a$ red cuadrada desbalanceada

```
from math import cos, sin, pi
from numpy import arange, array, empty, loadtxt
from cmath import exp
import random as rn

Nx=250
Ny=250
error=1e-8
Efermi1=-0.5
Efermi2=-0.3
Efermi=Efermi1+Efermi2
Chi=0.5
Lambda=0.75
DFV=loadtxt("Transformada_Lambda75_501.dat", float)

def E(q, k):
    return -4*(cos(0.5*k[0])*cos(q[0])+cos(0.5*k[1])*cos(q[1]))

def E1(q):
    return -2*(cos(q[0])+cos(q[1]))

def G(q, k, delta):
    return (Efermi-delta-E(q, k))*(-1)

M8=empty([Nx+1, 2], float)
Ks=[]
M=[]

for b5 in range(0, Nx+1):
    Ks.append([pi*Nx**(-1)*b5, 0])
```

```

i=0
for w9 in Ks:
    print w9
    Q1=[]
    for l9 in range(0,(2*Nx+1)**2):
        w1=array([DFV[l9,:][0],DFV[l9,:][1]],float)
        if E1(w1+0.5*array(w9,float))>Efermi1 and &
&E1(-w1+0.5*array(w9,float))>Efermi2:
            Q1.append(w1)
        M.append(Chi*DFV[l9,:][2])
    print len(Q1)

def Suma(delta):
    s=0
    s1=0
    for w2 in Q1:
        s += M[s1]*G(w2,w9,delta)
        s1 +=1
    return s

def Sumap(delta):
    l1=0
    l2=0
    for w3 in Q1:
        l1 +=M[l2]*(G(w3,w9,delta))**2
        l2 +=1
    return l1

d1=0.01
I7=arange(0.0,0.9,d1)
for j1 in I7:
    if (1-Suma(j1))<0 and (1-Suma(j1+d1))>0:
        delta2=1
        x2=rn.uniform(j1,j1+d1)
        while abs(delta2)>error:
            l5=Suma(x2)
            delta2=(1-l5)*(Sumap(x2))**(-1)
            x2 +=delta2
        print x2
        if x2>j1+d1 or x2<j1:
            x2=rn.uniform(j1,j1+d1)
            print "vuelta"
        break

print i
if j1>0.9:

```

```
M8[i:]=[w9[0],0]
i += 1
else:
M8[i:]=[w9[0],x2]
i += 1

outfile=open("gap_Lambda75_501.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.6f" % column)
        outfile.write("\n")
outfile.close()
```

Apéndice H

Código Δ/t vs ε_F/t red triangular balanceada

```
from math import cos, sin, pi, sqrt
from numpy import arange, array, empty, loadtxt
import random as rn

K=array([0,0],float)
error=1e-6
Lambda=0.75
DFV=loadtxt("df160hex.dat",float)
chi=0.8
L=101849

def E(q,k):
    return -4*(cos(0.5*k[0])*cos(q[0])+cos(0.25*k[0]-0.25*sqrt(3)*k[1])*&
    &cos(0.5*q[0]-0.5*sqrt(3)*q[1])+cos(0.25*k[0]+0.25*sqrt(3)*k[1])*&
    &cos(0.5*q[0]+0.5*sqrt(3)*q[1]))

def E1(k):
    return -(2*cos(k[0])+4*cos(0.5*k[0])*cos(0.5*sqrt(3)*k[1]))

def G(q,Ef,delta):
    return (Ef-delta-E(q,K))**(-1)

def Suma(delta):
    s=0
    s1=0
    for w2 in Q1:
        s += M[s1]*G(w2,2*Efermi,delta)
        s1 +=1
    return s

def Sumap(delta):
```

```

l1=0
l2=0
for w3 in Q1:
    l1 +=M[l2]*(G(w3,2*Efermi , delta))**2
    l2 +=1
return l1

Fermi=arange ( -6.0 ,3.0 ,0.2)
M8=empty ([ len ( Fermi ) ,2] , float )
i=0

for Efermi in Fermi:
    Q1=[]
    M=[]
    for l9 in range(0,L):
        w1=array ([DFV[l9 ,:][0] ,DFV[l9 ,:][1]] , float )
        if E1(w1+0.5*K)>Efermi and E1(-w1+0.5*K)>Efermi:
            Q1.append(w1)
            M.append( chi*DFV[l9 ,:][2] )
    print len(Q1)

x2=0
d1=0.1
I7=arange (0.0 ,4.0 ,d1)
for j1 in I7:
    if (1-Suma(j1))<0 and (1-Suma(j1+d1))>0:
        delta2=1
        x2=rn.uniform(j1 ,j1+d1)
        while abs(delta2)>error:
            l5=Suma(x2)
            delta2=(1-l5)*(Sumap(x2))**(-1)
            x2 += delta2
            print x2
            if x2>j1+d1 or x2<j1:
                x2=rn.uniform(j1 ,j1+d1)
                print "vuelta"
        break

print i
if j1 >3.9:
    M8[i :]=[ Efermi ,0]
    i+=1
else :
    M8[i :]=[ Efermi ,x2]
    i+=1

```

```
outfile=open("hexgapvsef.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.9f" % column)
    outfile.write("\n")
outfile.close()
```


Apéndice I

Código Δ/t vs $K_i a$ red triangular balanceada

```
from math import cos, sin, pi, sqrt
from numpy import arange, array, empty, loadtxt
import random as rn

Nx=160
Ny=160
Efermi=1.5 #Energia de fermi
#K=array([0,0],float)
error=1e-6
t=1
a=1
Lambda=0.75
DFV=loadtxt("df160hex.dat",float)
L=101849
chi=1.1

def E(q,k):
    return -4*(cos(0.5*k[0])*cos(q[0])+cos(0.25*k[0]-0.25*sqrt(3)*k[1])*&
    &cos(0.5*q[0]-0.5*sqrt(3)*q[1])+cos(0.25*k[0]-0.25*sqrt(3)*k[1])*&
    &cos(0.5*q[0]+0.5*sqrt(3)*q[1]))

def E1(k):
    return -(2*cos(k[0])+4*cos(0.5*k[0])*cos(0.5*sqrt(3)*k[1]))

def G(q,Ef,delta):
    return (Ef-delta-E(q,K))**(-1)

def Suma(delta):
    s=0
    s1=0
```

```

for w2 in Q1:
    s += M[s1]*G(w2,2*Efermi , delta )
    s1 +=1
return s

def Sumap(delta ):
    l1=0
    l2=0
    for w3 in Q1:
        l1 +=M[l2]*(G(w3,2*Efermi , delta ))**2
        l2 +=1
    return l1

b1=(4/3.)* pi* array ([1 ,0] , float )

def ks(p):
    ks1=[]
    for i in range(0 ,p+1):
        ks1.append([(4/3.)* pi *(Nx)**(-1)*i ,0])
    return ks1

ks2=ks(Ny)
print len(ks2)
M8=empty ([Ny+1 ,2] , float )
i=0

for v in ks2:
    K=array ([v[0] ,v[1]] , float )
    Q1=[]
    M=[]
    for l9 in range(0 ,L):
        w1=array ([DFV[l9 ,:] [0] ,DFV[l9 ,:] [1]] , float )
        if E1(w1+0.5*K)>Efermi and E1(-w1+0.5*K)>Efermi :
            Q1.append(w1)
            M.append( chi*DFV[l9 ,:] [2] )
    print len(Q1)

x2=0
d1=0.1
I7=arange (0.0 ,1.9 ,d1)
for j1 in I7:
    if (1-Suma(j1))<0 and (1-Suma(j1+d1))>0:
        delta2=1
        x2=rn . uniform (j1 ,j1+d1)
        while abs(delta2)>error:
            l5=Suma(x2)

```

```

    delta2=(1-15)*(Sumap(x2))*(-1)
    x2 += delta2
    print x2
    if x2>j1+d1 or x2<j1:
        x2=rn.uniform(j1 ,j1+d1)
        print "vuelta"
    break

print i
if j1==1.8:
    M8[i:]=[sqrt(v[0]**2+v[1]**2),0]
    i+=1
else:
    M8[i:]=[sqrt(v[0]**2+v[1]**2),x2]
    i+=1

outfile=open("hex160gapvskxchi11.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.9f" % column)
        outfile.write("\n")
outfile.close()

```

Apéndice J

Código Δ/t vs $K_i a$ red triangular desbalanceada

```
from math import cos, sin, pi, sqrt
from numpy import arange, array, empty, loadtxt
import random as rn

Nx=160
Ny=160
Efermi1=1.5
Efermi2=-0.3
Efermi=Efermi1+Efermi2
error=1e-6
t=1
a=1
Lambda=0.75
DFV=loadtxt("df160hex.dat", float)
L=101849
chi=0.6

def E(q, k):
    return -4*(cos(0.5*k[0])*cos(q[0])+cos(0.25*k[0]-0.25*sqrt(3)*k[1])*&
    &cos(0.5*q[0]-0.5*sqrt(3)*q[1])+cos(0.25*k[0]-0.25*sqrt(3)*k[1])*&
    &cos(0.5*q[0]+0.5*sqrt(3)*q[1]))

def E1(k):
    return -(2*cos(k[0])+4*cos(0.5*k[0])*cos(0.5*sqrt(3)*k[1]))

def G(q, Ef, delta):
    return (Ef-delta-E(q, K))**(-1)

def Suma(delta):
    s=0
    s1=0
```

```

for w2 in Q1:
    s += M[s1]*G(w2, Efermi , delta)
    s1 +=1
return s

def Sumap(delta):
    l1=0
    l2=0
    for w3 in Q1:
        l1 +=M[l2]*(G(w3, Efermi , delta))*2
        l2 +=1
    return l1

def ks(p):
    ks1=[]
    for i in range(0,p+1):
        ks1.append([(4/3.)* pi*i*(Nx)**(-1),0])
    return ks1

ks2=ks(Ny)
print len(ks2)
M8=empty([Ny+1,2], float)
i=0

for v in ks2:
    K=array([v[0],v[1]], float)
    Q1=[]
    M=[]
    for l9 in range(0,L):
        w1=array([DFV[19, :][0],DFV[19, :][1]], float)
        if E1(w1+0.5*K)>Efermi1 and E1(-w1+0.5*K)>Efermi2:
            Q1.append(w1)
            M.append(chi*DFV[19, :][2])
    print len(Q1)

x2=0
d1=0.1
I7=arange(0.0,2.0,d1)
for j1 in I7:
    if (1-Suma(j1))<0 and (1-Suma(j1+d1))>0:
        delta2=1
        x2=rn.uniform(j1,j1+d1)
        while abs(delta2)>error:
            l5=Suma(x2)
            delta2=(1-l5)*(Sumap(x2))*(-1)
            x2 += delta2

```

```

    print x2
    if x2>j1+d1 or x2<j1:
        x2=rn.uniform(j1 ,j1+d1)
        print "vuelta"
    break

print i
if j1==1.9:
    M8[i:]=[ sqrt(v[0]**2+v[1]**2),0]
    i+=1
else:
    M8[i:]=[ sqrt(v[0]**2+v[1]**2),x2]
    i+=1

outfile=open("hexgapvskxdes18.dat","w")
for row in M8:
    for column in row:
        outfile.write("%14.9f" % column)
    outfile.write("\n")
outfile.close()

```