



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE FÍSICA

**GASES DE FERMI CONFINADOS EN REDES ÓPTICAS CON INTERACCIONES
DE LARGO ALCANCE**

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

**PRESENTA:
ARTURO CAMACHO GUARDIAN**

**TUTOR PRINCIPAL
ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ
INSITUTO DE FÍSICA, UNAM**

**MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR
FERNANDO RAMÍREZ MARTÍNEZ
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES, UNAM**

**MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR
DARÍO NÚÑEZ ZÚÑIGA
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES, UNAM**

MÉXICO, CIUDAD DE MÉXICO, MAYO 2017



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Gases de Fermi confinados en redes ópticas con interacciones de largo alcance

por

Arturo Camacho Guardian

Estudiante del Posgrado en Ciencias Físicas
para optar por el grado de
Doctor en Ciencias Físicas

Abstract

We study ultracold Fermi gases confined in optical lattices with interparticle long-range interactions. We investigate the quantum phases that exhibit a system of Fermi molecules confined in a bilayer array of 2D square optical lattices. First, in a few body scheme we predict the formation of Cooper pairs and true bound states. For the many-body problem, we demonstrate using a functional integral formalism within the Ginzburg-Landau theory that the system supports superfluid states of Bardeen Cooper and Schrieffer (BCS) type for weak interactions, and a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) phase transition for strong interactions, being the superfluid phase formed by dimers of molecules. Supersolid phases as a result of a coexistence of superfluid and density wave phases are predicted to appear. The latter is a consequence of the interlayer repulsive dipolar interaction. We demonstrate the existence of these phases within the inhomogeneous mean field Bogoliubov-de Gennes theory. The superfluid BCS and BKT phases as well as the supersolid and density wave phases can be controlled tuning the parameters that define the system.

In addition, we study a one dimensional Fermi-Hubbard model inside a high-finesse optical cavity. In the adiabatic limit we investigate the quantum many-body phase of the atoms as a function of the polarization of the probe light beam. We show the existence of off-diagonal long-range order, charge and spin instabilities, and coexistence. A route to quantum simulate the phenomenon of superconductivity in cuprates is proposed.

Resumen

Se estudia las fases cuánticas de gases de Fermi confinados en redes ópticas con interacciones interpartículas de largo alcance. Se investigan las fases que exhibe un gas de moléculas fermiónicas confinadas en una bicapa de redes ópticas bidimensionales. Primero, en un enfoque de dos cuerpos se predice la formación de pares de Cooper y estados diméricos. Para el problema de muchos cuerpos, se demuestra usando el formalismo de integrales funcionales dentro de la teoría de Ginzburg-Landau que el sistema forma un superfluido tipo Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) en el límite de interacciones débiles mientras que en el régimen de interacciones fuertes, al tomar en consideración la teoría de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT), se predice la formación de un superfluido dimérico. La fase supersólida es resultado de la coexistencia de la fase superfluida con una fase de onda de densidad la cual se forma debido a las interacciones repulsivas intraplanares. Se demuestra la existencia de la fase supersólida dentro de la teoría de Bogoliubov-de Gennes. Las fases de superfluido BCS, BKT, las ondas de densidad y la fase supersólida pueden ser controladas modificando los parámetros que definen al sistema.

Adicionalmente, se estudió un gas uni-dimensional de Fermi confinado en una red óptica en el interior de una cavidad cuántica. En el límite adiabático se estudiaron las fases cuánticas de muchos cuerpos como función de la polarización del haz de luz que ilumina la cavidad. Se muestra la existencia de orden no-diagonal de largo alcance, ondas de espín y carga así como coexistencia. Finalmente, se motiva la simulación cuántica de fases a $T = 0$ de superconductores cupratos a través de este modelo.

AGRADECIMIENTOS

A mi madre Betty y mi padre Abel con quienes tengo una deuda eterna, y un infinito agradecimiento. A Abel mi hermano y mejor amigo. Nada hubiese sido posible sin ustedes.

Este trabajo ha sido posible gracias a haber encontrado la guía correcta en el momento oportuno.

Agradezco a Rosario Paredes por haber guiado este trabajo, por todas las enseñanzas, las discusiones de física, por haber cuestionado cada uno de mis resultados, por la instrucción y por tener abierta siempre la puerta a los estudiantes. Fue un placer ser tu estudiante.

A mis padres Abel y Beatriz, a los que le debo todo, siempre han estado ahí con un apoyo incondicional. Ninguno de mis pasos se entenderían sin su invaluable soporte, son mi ejemplo a seguir y mi motivación. A mi hermano, quién también es mi mejor amigo, por todos estos años y sus consejos.

A Jazmin, por estos años maravillosos de aventura a tu lado.

Agradezco a Santiago Caballero por las ideas intercambiadas en las cuales aprendí emocionante física nueva.

A los sinodales Dr. Luis A. Pérez y Dr. José Récamier quiénes desde el proceso de Candidatura enriquecieron al trabajo. Agradezco a la Dra. Sara Cruz y al Dr. Chumin Wang por los aportes y comentarios valiosos. De igual manera agradezco a la Dra. Rocío Jáuregui y al Dr. Jorge Seman por su amable disposición a discutir de física, y nutrir el trabajo.

Agradezco a mi Comité Tutor, al Dr. Fernando Ramírez por su activa participación en las reuniones académicas, así como al Dr. Darío Núñez por su apoyo brindado este tiempo.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México lugar donde crecí como estudiante, así como al Posgrado en Ciencias Físicas, y al Instituto de Física.

Agradezco el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo brindado a través del fomento de Becas Nacionales. Agradezco a los proyectos IN107014 DGAPA (UNAM), LN-232652 (CONACYT) y al Programa de Apoyo a los Estudios de Posgrado (PAEP) por el apoyo brindado durante el posgrado, al Dr. Carlos Villareal por el apoyo ofrecido en más de una ocasión.

A todos mis amigos que están o estuvieron en el cubículo 215, por todas las grandiosas discusiones que tuvimos de física y la vida, a Omar A., Talía L, Rebeca D.,

Alexis D., Rodolfo F., Chava, Adriano.

A mis grandes amigos del atletismo Isra, Fer, Paco, Mario, Lulú y Francis, a Yollotl, por cada kilómetro de amistad.

Al Grupo de Átomos Ultrafríos; Dr. V. Romero, Dr. F. Jackson, L. A. García, M. Mendoza, E. Padilla, N. Reyes, E. Carro, a mi amigo y compañero de congresos R. Zamora.

Índice general

1. Introducción	19
2. Gases de Fermi interactuantes: Fundamentos	23
2.1. Teoría de Ginzburg-Landau	23
2.2. Teoría BCS	26
2.2.1. Estado Bardeen-Cooper-Schrieffer	26
2.2.2. Estado Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov	33
2.3. Ondas de espín y ondas de carga	34
2.4. Modelo de Fermi-Hubbard	37
2.4.1. Fermi-Hubbard Atractivo	38
2.4.2. Fermi-Hubbard Repulsivo	39
2.5. Gases ultrafríos de Fermi.	41
2.5.1. Superfluidos	41
2.5.2. Cruce BEC-BCS	43
2.5.3. Gases ultrafríos en el modelo Fermi-Hubbard	47
2.5.4. Fermi-Hubbard Extendido	49
2.5.5. Supersólido	50
2.6. Bogoliubov-de Gennes	52
3. Gas dipolar de Fermi: Problema de dos cuerpos	57
3.1. Modelo	58
3.2. Pares de Cooper	60
3.3. Estados Ligados de Moléculas	67

3.4.	Dispersión de moléculas ligadas.	68
3.5.	Conclusiones	72
4.	Gas dipolar de Fermi: Superfluido	75
4.1.	Modelo	76
4.2.	Temperatura Crítica	79
4.3.	Ginzburg-Landau	80
4.4.	Densidad del Superfluido	83
4.5.	Berezinskii-Kosterlitz-Thouless	87
4.6.	Conclusiones	89
5.	Gas dipolar de Fermi: Supersólido	93
5.1.	Modelo	94
5.2.	Superfluido	98
5.3.	Supersólido	98
5.4.	Onda de densidad	101
5.5.	Conclusiones	106
6.	Gases de Fermi en Cavidades Cuánticas.	107
6.1.	Modelo	108
6.1.1.	Hamiltoniano efectivo	108
6.1.2.	Parámetros y parámetros de orden	114
6.2.	Polarización Lineal	117
6.2.1.	Polarización lineal $-y$: Competencia AFM vs ODLRO	118
6.2.2.	Polarización lineal $-x$: Competencia DW vs ODLRO	120
6.2.3.	Polarización lineal $-\theta$	122
6.2.4.	Fermi-Hubbard Dopado	125
6.2.5.	En ruta a superconductividad-HighTc	127
6.3.	Conclusiones	130
7.	Conclusiones y Perspectivas	133

A. Teoría de densidad funcional	139
B. Acción Efectiva	145
C. Gases Cuánticos en Cavidades Cuánticas	149
C.1. Modelo de Jaynes-Cummings	149
C.2. Hamiltoniano de Muchos Cuerpos	150

Índice de figuras

2-1. Comportamiento cualitativo del parámetro de orden cerca de la transición. El parámetro de orden es cero para temperaturas mayores que una temperatura crítica y es distinto de cero por debajo de dicha temperatura, el parámetro de orden es continuo, pero sus derivadas no.	24
2-2. La energía libre de Landau cerca de la transición de fase. Se forma el "sombrero mexicano" para temperaturas por debajo de la crítica.	25
2-3. Esquematización de los pares de Cooper. Sobre la superficie de Fermi se crea una banda de ancho $\propto \omega_D$ con interacción atractiva entre los electrones con momentos opuestos \vec{k} y $-\vec{k}$ (Región sombreada).	28
2-4. Estados FFLO. Del lado izquierdo se esquematiza la formación de los pares de Cooper cuando la energía de Fermi es simétrica en los estados de espín. Del lado derecho, se muestra que el desbalance en las energías de Fermi produce apareamientos con momento de centro de masa no nulo.	33
2-5. Diagrama de fases del modelo de Fermi-Hubbard tridimensional. El diagrama de fases exhibe para $U < 0$ fases normal y superfluidas, así como una región de pseudogap. Mientras que para $U > 0$ las fases del modelo son de fluido normal, aislante de Mott y un estado antiferromagnético.	40
2-6. Criterio de Landau para un superfluido de Fermi. La interacción modifica la relación de dispersión, de forma que pueden crearse excitaciones elementales sin fricción.	42
2-7. Temperatura crítica de los superfluidos para los modelos de Legget, Gorkov y NSR. Imagen tomada de [94].	45

2-8.	Diagrama de fases del cruce BEC-BCS. Imagen tomada de [98]. La línea sólida indica la temperatura crítica del superfluido, mientras la línea punteada indica del lado BCS la temperatura de disociación de pares de Cooper, y del lado BEC la temperatura a la cual se rompen los dímeros.	46
2-9.	Cristal artificial creado contrapropagando tres haces de luz, esto crea un patrón de onda estacionario, que se acopla al momento dipolar de los átomos y crea un potencial óptico.	47
3-1.	Potencial dipolar para distintas separaciones λ/a . El potencial es atractivo a distancias $r < \lambda/\sqrt{2}$ y repulsivo si $r > \lambda/\sqrt{2}$	59
3-2.	Representación esquemática del gas dipolar de Fermi. Las redes ópticas tienen una constante de red a , separadas una distancia λ , y el momento dipolar eléctrico de las moléculas es perpendicular al plano de las redes ópticas.	59
3-3.	Energía de ligadura del par de Cooper Δ/t como función de la energía de Fermi en una red óptica simétrica $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B$	63
3-4.	Δ como función del momento del centro de masa $K_x a$ para energías de Fermi simétricas $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0,5t$. Se considera $K_y = 0$ para valores de $\chi = 0,4; 0,5$ y $0,6$	64
3-5.	Δ como función de $K_x a$ para energías no simétricas de Fermi en las capas A y B . Se elige como energía de Fermi para la capa A $\epsilon_F^A = -0,5t$, manteniendo $K_y = 0$ y fijando la intensidad de la interacción $\chi = 0,5$. Se grafica $\Delta\epsilon = 0,1; 0,2; 0,3$ y $0,5$	65
3-6.	El esquema de la formación de pares de Cooper.	66
3-7.	Función de onda $\sqrt{r}\psi(r)$ hasta una constante de normalización C , para $\chi = 0,2$ y $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0,5t$	66
3-8.	El esquema de la formación de dímeros moleculares.	68
3-9.	Energía del estado ligado E_B como función de χ . Se muestra la solución obtenida a través del método variacional propuesto (cuadrados). Mientras la solución a la ecuación de Fredholm (3.8) en ausencia del mar de Fermi (círculos). En el recuadro inferior se muestra la energía E_B como función del centro de masa en la dirección K_x para valores de $\chi = 0,6; 0,8; 1,0$. La línea sólida en $-8t$ indica la mínima energía de un par de fermiones libres en presencia de la red óptica.	69

3-10. Se grafica la función $f(k)$ como función de k , tanto en términos de la suma como en el límite integral. Se observa que el potencial efectivo es apantallado	72
4-1. Formación de pares de Cooper.	77
4-2. Brecha de energía como función de la temperatura para $\Lambda = 0,75$ y $\mu = 0,825t$	79
4-3. Temperatura crítica como función de la intensidad de la interacción χ para distintos valores de la separación interplanar $\Lambda = 0,5; 0,6; 0,75$	80
4-4. Coeficiente $b(T, \mu)$ de la red óptica. Consistentemente con la teoría de Ginzburg-Landau es siempre positivo.	82
4-5. Densidad del superfluido para distintos valores de la interacción χ como función de la temperatura, manteniendo fijo $\Lambda = 0,75$	87
4-6. Temperatura crítica del modelo BCS T_c y la temperatura crítica de la transición de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless T_{BKT} como función de la interacción χ para $\Lambda = 0,75$. En el recuadro interior se muestra la energía de ligadura del problema de dos cuerpos en presencia de la red óptica.	88
4-7. Cruce BCS-BKT en una bicapa dipolar de redes ópticas de gases dipolares de Fermi. Para interacciones débiles se forma un estado superfluido BCS, al incrementar la interacción se da el cruce BCS-BKT, finalmente cuando la interacción es lo suficientemente fuerte se forma un gas de dímeros.	90
4-8. Diagrama de fases.	91
5-1. Gas dipolar de Fermi en presencia de una trampa armónica.	94
5-2. Inestabilidades de densidad, vistas de canto para una monocapa de red óptica. Del lado izquierdo se muestra la inestabilidad debido en $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$, que da lugar a la formación de tablaeros de ajedrez en la densidad. Del lado derecho $\vec{Q} = (\pi/a, 0)$ se aprecian inestabilidades tipo líneas.	97
5-3. Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0,0; 0,10; 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,80$ y $\chi = 0,3$	99

5-4.	Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0,0; 0,10, 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,85$ y $\chi = 0,3$	99
5-5.	Parámetros de orden locales a través de una sección transversal. Se grafica el parámetro de orden tipo tablero de ajedrez y el parámetro superfluido local. Ambos se grafican en un corte transversal que cruza el centro de la trampa, $\phi(x, 0)$ y $\Delta(x, 0)$ para $k_B T/t = 0,0; 0,10$ y $0,25$. $\Lambda = 0,85$ y $\chi = 0,3$	100
5-6.	Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0,0; 0,10; 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,90$ y $\chi = 0,3$	101
5-7.	Parámetros de orden locales a través de una sección transversal. Se grafica el parámetro de orden tipo tablero de ajedrez y el parámetro superfluido local. Ambos se grafican en un corte transversal que cruza el centro de la trampa, $\phi(x, 0)$ y $\Delta(x, 0)$ para $k_B T/t = 0,0; 0,10$ y $0,25$. $\Lambda = 0,90$ y $\chi = 0,3$	102
5-8.	Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0,0; 0,10; 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,90$ y $\chi = 0,3$	103
5-9.	Parámetros de orden como función de la temperatura. Se observa una transición de fase de segundo orden.	103
5-10.	Diagrama de fase para redes ópticas $2 \times 37 \times 37$, como función del espaciamento entre las redes ópticas a interacción fija $\chi = 0,3$	105
6-1.	Representación esquemática del modelo. Una red óptica de dos especies hiperfinas es puesta en el interior de una cavidad cuántica. Un haz de bombeo clásico denotado por el campo clásico $a_{p,\sigma}$ de frecuencia ω_p ilumina a los átomos, lo cual se representa con el campo en amarillo. El campo cuántico de la cavidad se denota por \hat{a}_c . . .	109

- 6-2. Interacción interatómica $\theta_c = p$, $\theta_p = \pi/2$. En azul se muestra el potencial $W(i, j)$, mientras que en negro, la línea punteada indica la posición de la red óptica. Los círculos en rojo, indican el valor de la interacción en los mínimos del potencial óptico, que es donde se sitúan los átomos. Del lado izquierdo se muestra un potencial de signos intercambiantes $\theta_c = 0$, $\theta_p = \pi/2$, del lado derecho un potencial desordenado eligiendo la periodicidad de la red incommensurable con el potencial $W(i, j)$. Siendo $x = |i - j|$ 113
- 6-3. Eigenvalor máximo en el límite termodinámico como función de la fracción de llenado, para redes balanceadas $N_\uparrow = N_\downarrow$ 115
- 6-4. Representación esquemática del modelo. Una red óptica de dos especies hiperfinas es puesta en el interior de una cavidad cuántica. Una onda plana circularmente polarizada es polarizada linealmente en un ángulo θ arbitrario. Esta onda plana linealmente polarizada incide en la dirección $-z$ sobre la red óptica. 118
- 6-5. Se muestran los diagramas de fases para $N_s = 10$, y $N_\uparrow = N_\downarrow = N_s/2$. Del lado derecho se considera luz linealmente polarizada en la dirección $-y$, esto produce fases antiferromagnéticas y de onda de densidad, caracterizadas por un máximo en $S(q = \pi)$ el cual corresponde a un estado AFM. Por otra parte, para $g/|U| < 0$, se forma un estado superfluido. Del lado izquierdo se muestra el caso en de polarización en la dirección $-x$. En este caso se forma una onda de densidad para $g < 0$ y CDW cuando el tunelaje es relevante. A interacciones fuertes y $g > 0$ se forma un estado con ODLRO. Finalmente en el límite no interactuante persiste sólo la fase DF. . . 119
- 6-6. Para polarización en $-y$, se muestra en el renglón superior cortes a t constantes como función del cociente $g/|U|$, se presenta $t/|U| = 0; 0,25; 0,5; 0,75$ (De izquierda a derecha). En el renglón inferior se presentan los parámetros como función de $t/|U|$ a $g/|U| = -1; 0,5; 0; 0,5$ (De izquierda a derecha). \mathcal{T} (negro), \mathcal{O}_η (verde), \mathcal{O}_{AFM} (azul) y \mathcal{O}_{DW} (naranja). En el renglón superior se observa que la fase de $\mathcal{O}_{AFM}(\pi)$ a $t/|U|$ pequeño domina cuando $g/|U| < -0,5$. Cuando $g/|U| > -0,5$ se desvanece dicha fase y da lugar a estados con ODLRO. Por su parte, en el renglón inferior, se observa que independientemente del signo de g , las interacciones débiles $t/|U| \approx 1$ destruyen todas las fases. 121

6-7.	Para polarización en $-x$, se muestra en la fila superior cortes a t constantes como función del cociente $g/ U $, se presenta $t/ U = 0; 0,25; 0,5$ y $0,75$ (De izquierda a derecha). En la fila inferior se presentan los parámetros como función de $t/ U $ a $g/ U = -1; 0,5; 0$ y $0,5$ (De izquierda a derecha). \mathcal{T} (negro), \mathcal{O}_η (verde), \mathcal{O}_{AFM} (azul) y \mathcal{O}_{DW} (naranja). En la fila superior se observa que la fase de \mathcal{O}_{DW} a $t/ U $ pequeño domina cuando $g < 0$. Cuando $g > 0$ se da lugar a estados con ODLRO. De igual forma que para polarización $-y$ en la fila inferior, se observa que independientemente del signo de g , las interacciones débiles $t/ U \approx 1$ destruyen todas las fases.	122
6-8.	Diagrama de fases a $t/ U = 0,1, 0,25$ y $0,5$ (izquierda a derecha) para $N_s = 10$ y $N_\uparrow = N_\downarrow = 5$. Para $g/ U > 0$ se observa sólo ODLRO para $t/ U = 0,25, 0,5$ independientemente del ángulo de polarización de la luz. Para $g/ U < 0$, existen fases DW, AFM(π), PDW para $t/ U = 0,1$. Mientras para $t/ U = 0,25$ tienen lugar fases tipo DW, AFM y coexistencia tipo CDW, SDW y PDW.	123
6-9.	Parámetros para distintas polarizaciones lineales considerando $g/ U = -1, -0,8, -0,53,$ y $-0,3$. En el renglón superior para $t/ U = 0,1$ los parámetros de orden como función de θ , para $g/ U $ en el orden mencionado de izquierda a derecha. Mientras en el renglón superior se grafica para $t/ U = 0,25$	124
6-10.	diagramas de fases a $t/ U = 0,1$ para $N_s = 10$ y $N_\uparrow = N_\downarrow$	127
6-11.	Parámetros de orden a $t/ U = 0,1$, para $N_s = 10$ y $N_\uparrow = N_\downarrow$. Se presentan los parámetros de orden como función del ángulo de polarización θ y la fracción de llenado.	128
6-12.	Parámetros de orden a $t/ U = 0,25$, para $N_s = 10$ y $N_\uparrow = N_\downarrow$. Se presentan los parámetros de orden como función del ángulo de polarización θ y la fracción de llenado.	129
A-1.	Esquematización de los posibles desacoplamiento en la transformación de Hubbard Stratonovich. Los índices $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, son los índices del término de la interacción. . .	142

Artículos

Durante el periodo comprendido entre el semestre 2014-2 y 2017-2 se publicaron los siguientes artículos.

- A Camacho Guardian, and R Paredes (2016), Supersolid phases of dipolar fermions in a two-dimensional-lattice bilayer array, *Phys. Rev. A* **94** (04), 043638.
- A Camacho Guardian, and R Paredes (2016), Superfluidity of a dipolar Fermi gas in 2D optical lattices bilayer, *Ann Phys. (Berlin)* **528** (11-12), 778-784 .
- A Camacho Guardian, G. A Domínguez-Castro and R Paredes (2016), Bound states and Cooper pairs of molecules in 2D optical lattices bilayer, *Ann. Phys.(Berlin)* **528** (7-8), 580-587.
- A Camacho-Guardian et al (2014), Energetic cooling below the BEC transition: a quantum kinetic description within the Bogoliubov approximation, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 215304.
- A Camacho-Guardian and R Paredes (2014), Intrinsic decoherence and purity in a Bose quantum fluid in a triple well potential, *Laser Phys.* **24** 085501.

Preprints

- A Camacho-Guardian, R Paredes and S F Caballero-Benítez (2017), Quantum Simulation of Competing Orders with Fermions in a Quantum Optical Lattice. Estatus: Sometido a arbitraje
- A Camacho-Guardian, S F Caballero Benítez and R Paredes (2017), From Weakly interacting to Many-Body Localization. Estatus: En Preparación

Capítulo 1

Introducción

El estudio de las fases cuánticas degeneradas surgió en 1911 con el estado superconductor reportado por Karmeligh Onnes en el laboratorio de criogenia de Leiden [1]. Dicho fenómeno mostró que la resistencia eléctrica del mercurio tendía abruptamente a cero por debajo de los 4K. Posteriormente en el año de 1937, Pyotr Kapitsa en la Unión Soviética [2] y John Allen en Inglaterra [3] observaron el estado superfluido en Helio-4. La característica de la fase superfluida radica en la nula viscosidad del fluido que le permite fluir sin fricción, esto es, sin disipar energía cinética. Los esfuerzos teóricos encabezados por Abrikosov [4], Bogoliubov [5], Ginzburg [6], Gorkov [7], Landau, Leggett [8], London [9], Cooper [10], Bardeen, Schrieffer [11], dieron una explicación satisfactoria a dichos fenómenos; la teoría de Baarden-Cooper-Schrieffer (BCS) para el estado superconductor, y la teoría del Helio-4 para el estado superfluido. Aunado a la ausencia de resistencia eléctrica y viscosidad, estos sistemas mostraron poseer otras propiedades exóticas; el efecto Meissner [12], vórtices de circulación cuantizada [13], fuentes de presión [14], entre otras. Incluso hoy en día muchas de las fases presentes en dichos sistemas se encuentran bajo intenso debate, por ejemplo, además de la fase superfluida del Helio-4, en 2004 se reportó la primera evidencia de un estado supersólido [15, 16], caracterizado a *grosso* modo por un superflujó de masa, sin embargo, aún no existe acuerdo dentro de la comunidad científica de que la fase observada corresponda a un estado supersólido [17]. Por otra parte, la teoría BCS exitosa para predecir la fase superconductora en metales ha sido incapaz de explicar

la superconductividad en materiales cupratos, observados por primera vez en 1986 a temperaturas muy lejanas del rango de validez de la teoría BCS [18].

En otro contexto, el estudio de la estadística de fotones [19] y la predicción teórica de la condensación ideal de Bose-Einstein (BEC) [20], mostró que los gases débilmente interactuantes podían ser llevados a regímenes cuánticos degenerados que compartían características con la superfluidez en He-4 y la superconductividad en metales. Además de que por su naturaleza, se presumía se podría tener un control absoluto sobre los grados de libertad del sistema. En 1995, se reportó el primer condensado de Bose-Einstein débilmente interactuante [21], y cuatro años después se alcanzó el primer gas degenerado de Fermi [22]. Posterior a estos primeros experimentos con gases cuánticos degenerados, y durante los 15 años subsecuentes se estudiaron las fases cuánticas de gases atómicos alcalinos, en los cuales la interacción podía ser controlada “a demanda” mediante resonancias de Feshbach [23, 24], además de que dichos sistemas podían ser confinados en geometrías y dimensiones arbitrarias. Esto abrió un amplio panorama en la física atómica, nuevos fenómenos como turbulencia cuántica [25], vórtices cuánticos [26], el cruce BEC-BCS [27, 28], transiciones en bajas dimensiones (tipo Kosterlitz-Thouless) [29], fases supersólidas [30], solitones [31], localización de Anderson [32, 33], localización de muchos cuerpos [34], entre otros, han presentado un enorme reto tanto teórico como experimental.

Más allá del interés propio de la comunidad de átomos ultrafríos en estudiar estas fases, los gases cuánticos degenerados se erigieron como el candidato ideal para simular sistemas físicos más complejos, debido a su alta maleabilidad, y el completo control sobre los grados de libertad de los gases cuánticos, estos fueron propuestos para modelar sistemas de la materia condensada, por citar unos ejemplos mencionamos a la fase de Mott [35], la superradiancia en modelos tipo Dicke [36], fases topológicas tipo Haldane [37], modelos artificiales de grafeno [38], monopolos magnéticos [39], supersólidos [40], entre otros. Las primeras realizaciones experimentales de gases cuánticos ultrafríos fueron con gases alcalinos altamente diluidos, con un momento magnético pequeño, y a temperaturas del orden de nano Kelvins. Esto implica que las interacciones entre los átomos que componían al gas son de corto alcance, y

más aún, toda la información de la interacción podía ser contenida en un sólo parámetro denominado *longitud de dispersión* [41]. Sin embargo, recientemente se ha conseguido llevar al régimen degenerado gases cuánticos compuestos de átomos con momentos magnéticos permanentes, tales como gases bosónicos de ^{52}Cr [42], ^{164}Dy [43] y ^{168}Er [44, 45], y átomos polares de Fermi ^{167}Er [43] y ^{161}Dy [46]. Nuevos esfuerzos teóricos y experimentales están siendo realizados para llevar hasta regímenes de alta degeneración a moléculas polares, dichos experimentos han sido realizados con moléculas de $^6\text{Li}^{133}\text{Cs}$ [47] y $^{40}\text{K}^{87}\text{Rb}$ [48], $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ [49]. De manera similar que los gases alcalinos, es posible tener un control absoluto sobre los gases con momentos dipolares eléctricos o magnéticos [50–63]. Desde el punto de vista teórico estos sistemas abren la puerta para el estudio y predicción de nuevas fases cuánticas inexploradas con átomos alcalinos. Algunas de estas nuevas fases son las fases cristalinas de Wigner [64], los supersólidos [65, 66] y la propuesta de simuladores cuánticos tales como la computación cuántica [67, 68], el magnetismo cuántico [69, 70] y la superconductividad a altas temperaturas [71, 72].

La tesis se conforma de 7 capítulos, los cuales se estructuran de la siguiente manera; en el capítulo (2) se describen de forma breve los elementos mínimos necesarios para entender el contenido de la tesis. De forma resumida, se expone el Modelo de Fermi-Hubbard y las fases que éste exhibe. Con este propósito, se resume primero en el contexto de la teoría cuántica de campos las fases que para el estudio de la tesis son relevantes. La teoría de Ginzburg-Landau(2.1), la teoría de superconductividad (BCS (2.2.1) y FFLO (2.2.2)), ondas de espín y carga (2.3), supersólido(2.5.5), así como la conexión de estas fases en el contexto de materia condensada con el marco de gases ultrafríos sientan las bases para entender la física de los Hamiltonianos tipo Hubbard (2.4).

Los capítulos (3), (4) y (5) están enfocados al estudio del gas dipolar de Fermi confinado en una bicapa bidimensional de moléculas polares. El capítulo (3) hace una revisión al problema de dos cuerpos de moléculas polares de Fermi colisionando en un mar de Fermi estático, esto da pie al estudio del problema de Cooper (3.2) y los estados ligados que dan lugar a dímeros moleculares (3.3) y el problema de la

dispersión de cuatro cuerpos de la interacción dímero-dímero (3.4). Posteriormente, en el capítulo (4) se estudia para el mismo sistema el problema de muchos cuerpos con énfasis en el estado superfluido desde el enfoque de la teoría cuántica de campos, determinando la temperatura crítica del superfluido desde la teoría BCS (4.2) y la teoría BKT (4.5). Se presenta la hidrodinámica del sistema dentro de la teoría de Ginzburg-Landau (4.3), y (4.4). Finalmente en el capítulo (5) se estudia el problema del estado supersólido como función de los parámetros del sistema.

En el capítulo (6) se considera una cadena uni-dimensional de fermiones en dos estados hiperfinos, confinados en una cavidad cuántica con el objetivo de investigar las fases cuánticas que dicho sistema exhibe. El estudio se realiza como función de la polarización de la luz que ilumina la cavidad.

Finalmente en el capítulo (7) se presentan las conclusiones y perspectivas del trabajo realizado.

Capítulo 2

Gases de Fermi interactuantes: Fundamentos

En el presente capítulo se presentan los elementos necesarios para describir los sistemas desarrollados en el proyecto de doctorado. Dado que el interés principal es estudiar las fases termodinámicas y cuánticas de modelos extendidos de Fermi-Hubbard en el contexto de átomos ultrafríos, a continuación se describe de forma resumida la Teoría de Ginzburg-Landau para transiciones de fases continuas (2.1). Además en la sección (2.2.1) se presenta la descripción de la fase superconductora BCS en conexión con la teoría de Ginzburg-Landau, así como la existencia y descripción del estado FFLO y la formación de ondas de espín y carga en las secciones (2.2.2) y (2.3) respectivamente. Finalmente se repasa el modelo de Fermi-Hubbard en el contexto de átomos ultrafríos, y las fases que este modelo exhibe.

2.1. Teoría de Ginzburg-Landau

Con este fin, en la presente sección describiremos el concepto de transición de fase desde el enfoque de la teoría de Ginzburg-Landau [6].

Una transición de fase termodinámica se entiende como un fenómeno colectivo de muchos cuerpos, en el cual el sistema cambia drásticamente sus propiedades al modificar un parámetro del sistema [6]. De forma estándar, las transiciones de fase

se clasifican en dos; las de primer orden y las de segundo orden. En las transiciones de fase de primer orden o también denominadas discontinuas, las variables extensivas (E, V, N) presentan una discontinuidad en el punto termodinámico que define la transición, donde E es la energía del sistema, V el volumen y N el número de partículas que conforman al sistema. Las transiciones de segundo orden o continuas se caracterizan por el hecho de que las variables extensivas (E, V, N) son continuas en la transición y la transición se refleja a través de discontinuidades en sus primeras derivadas, por ejemplo, en el calor específico, la compresibilidad. La teoría de Ginzburg-Landau para describir las transiciones de fase parte de la premisa de que existe un parámetro Δ , el cual describe cuantitativamente la transición y que separa la transición en dos fases, la primera una fase simétrica donde $\Delta = 0$ para temperaturas superiores a una temperatura crítica, y una fase asimétrica o de rompimiento espontáneo de la simetría en la cual $\Delta \neq 0$, véase la figura (2-1).

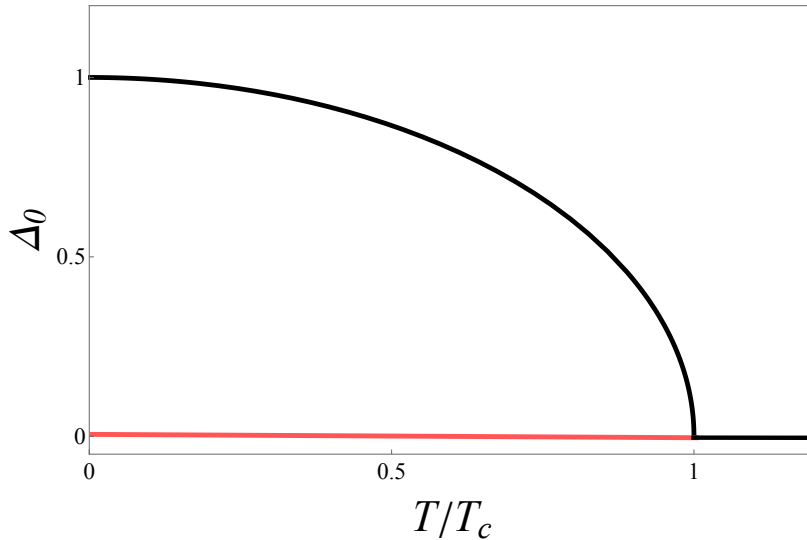


Figura 2-1: Comportamiento cualitativo del parámetro de orden cerca de la transición. El parámetro de orden es cero para temperaturas mayores que una temperatura crítica y es distinto de cero por debajo de dicha temperatura, el parámetro de orden es continuo, pero sus derivadas no.

Por ejemplo, en la condensación ideal de Bose-Einstein, el parámetro de orden Δ es la ocupación del estado base N_0 . Para temperaturas superiores a la temperatura crítica, el número de ocupación del estado base es cero $N_0 = 0$, mientras por debajo de

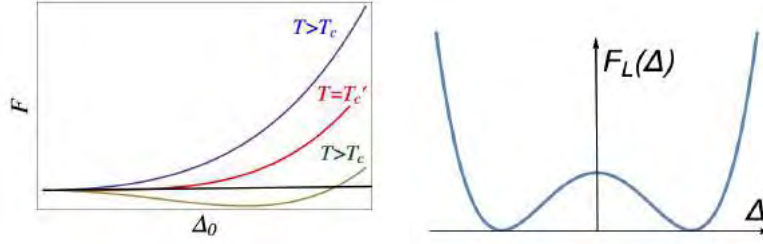


Figura 2-2: La energía libre de Landau cerca de la transición de fase. Se forma el "sombrero mexicano" para temperaturas por debajo de la crítica.

la temperatura de condensación $N_0 \neq 0$ siendo $N_0(T)$ una función continua de la temperatura. Cantidades como el calor específico y la compresibilidad son discontinuas en el punto de la transición. En el problema de la superconductividad, el parámetro de orden es el valor de expectación de los pares de Cooper. A temperaturas por debajo de una temperatura crítica, se forma un estado coherente en el cual los electrones tienden a formar pares cuasi-ligados. El parámetro de orden, es proporcional al valor de expectación $\Delta \propto \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle$, el cual es cero para $T > T_c$, y distinto de cero para $T < T_c$.

En la teoría de Ginzburg-Landau, la energía libre F_L , esta determinada por el parámetro de orden que guía la transición de fase, dicha energía cerca de la transición de fase admite un desarrollo en serie alrededor del parámetro de orden Δ ,

$$F_L(\Delta) = \frac{\Omega}{2} \left(a(T)\Delta^2 + \frac{b(T)}{2}\Delta^4 \right), \quad (2.1)$$

siendo Ω el tamaño del sistema. En la figura (2-2), se muestra la energía libre como función del parámetro de orden, donde se muestra que para temperaturas superiores a la temperatura crítica, no se forma el *sombrero mexicano*, por lo cual $\Delta = 0$ representa la única solución con equilibrio termodinámico estable, mientras si $T < T_c$ se tiene un nuevo punto de equilibrio estable termodinámico $\Delta \neq 0$, en tanto que $\Delta = 0$ se vuelve una solución inestable termodinámicamente. Para que la energía libre tenga siempre sentido, es necesario que $b(T) > 0$. El signo de $a(T)$ determina si existe un rompimiento de la simetría.

En términos del parámetro de orden la función de partición del sistema es

$$Z = \int d[\Delta] e^{-\beta F_L(\Delta)}, \quad (2.2)$$

la máxima contribución a la suma, viene dada por el valor que extremiza a la energía libre, dígase Δ_0 , por lo cual la función de partición es aproximada por

$$Z = e^{-\beta F_L(\Delta_0)}. \quad (2.3)$$

2.2. Teoría BCS

2.2.1. Estado Bardeen-Cooper-Schrieffer

El modelo de Fermi-Hubbard exhibe un estado superconductor el cual se describe a continuación en el marco de la teoría cuántica de campos. Con la finalidad de sustentar las bases del estado superconductor predicho por la teoría BCS, en la presente sección se aborda el estudio de la teoría BCS para sistemas continuos y homogéneos, para posteriormente hacer la extensión del estado superconductor en el modelo de Fermi-Hubbard.

El fenómeno de la superconductividad, pertenece a las transiciones de fase continuas de segundo orden [11]. La teoría BCS provee el parámetro de orden Δ el cual determina la física de la transición. Esta subsección tiene como objetivo identificar la conexión entre la función de partición $Z(\Delta)$ de la teoría de Landau (2.1), con el Hamiltoniano microscópico de muchos cuerpos. Se exhibirá que la función de partición $Z(\Delta)$ puede ser calculada en términos de los operadores de campo, a través de la acción microscópica S , mediante la identificación

$$Z(\Delta) = \int d\Delta \exp^{-\beta F_L(\Delta)} \rightarrow \int d\Delta \exp^{-S(\Delta)}.$$

La superconductividad es un fenómeno que fue observado por primera vez en 1911 en mercurio en el laboratorio de criogénia de Kammerlingh Onnes, en el cual la resis-

tencia del mercurio caía bruscamente a cero cuando la temperatura descendía de un valor crítico [1]. La teoría de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) fue originalmente propuesta para explicar dicho fenómeno, en donde se establece que a bajas temperaturas los electrones pueden formar un par denominado par de Cooper con espines opuestos y momentos en sentidos contrarios \vec{k} y $-\vec{k}$ [10, 11]. El par se forma debido a que la interacción con los fonones de la red da lugar a una interacción efectiva atractiva entre los electrones libres. La idea es que el electrón moviéndose en la red distorsiona localmente la estructura cristalina de los iones, y dado que el tiempo característico t_e que necesita un electrón para moverse de un sitio de la red a otro es mucho menor que el tiempo que necesitan los iones (ω_D^{-1}) de la red para volver a su posición de equilibrio, cada vez que un electrón modifica su posición en la red cristalina altera la estructura de la red, y el efecto neto se traduce en una interacción efectiva atractiva entre los dos electrones, debido a que los iones no alcanzan a relajarse a su posición de equilibrio antes de que otro electrón ocupe ese sitio de la red. Esta atracción efectiva entre los electrones da lugar al estado denominado como par de Cooper [10]. Los electrones cerca de la superficie de Fermi tienden a formar un estado de Cooper, el cual visto desde el problema de dispersión de dos electrones en presencia del denominado mar de Fermi estático es aquel que minimiza la energía, véase la figura: (2-3).

Para incorporar la idea de los pares de Cooper [10] en un sistema de muchos cuerpos, es necesario introducir el Hamiltoniano de muchos cuerpos, considerando interacciones sólo entre pares de partículas, dicho Hamiltoniano es

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}, \sigma} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{c}_{\vec{q}-\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger V(\vec{k} - \vec{k}') \hat{c}_{\vec{q}-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}, \quad (2.4)$$

donde se ha elegido representar al Hamiltoniano en segunda cuantización en la base en que la parte ideal es diagonal [73], siendo $\hat{c}_{\vec{k}, \sigma}$ y $\hat{c}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger$ los operadores de aniquilación y creación en dicha base y Ω es el tamaño del sistema. Además se ha supuesto que el potencial es central, siendo $V(\vec{k} - \vec{k}')$ la transformada de Fourier del potencial de interacción en el espacio físico. A temperaturas suficientemente bajas los electrones llenan la energía de Fermi, de forma tal que todos los estados con $k_F > k$ se encuentran

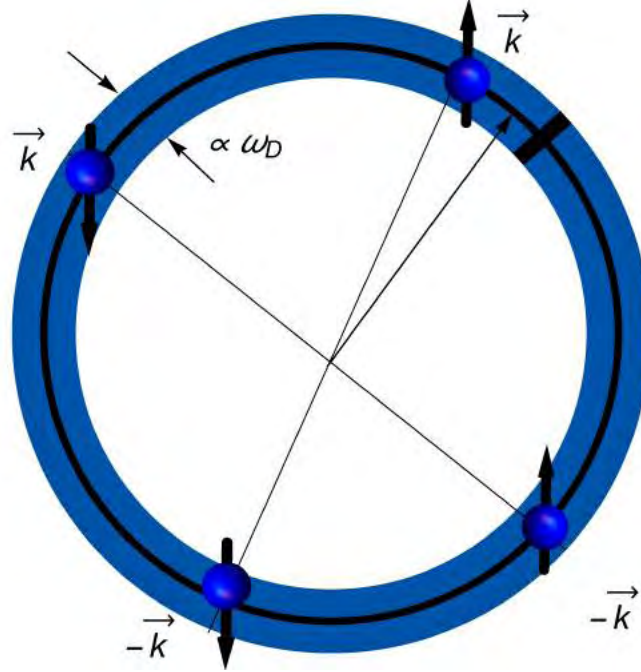


Figura 2-3: Esquematzación de los pares de Cooper. Sobre la superficie de Fermi se crea una banda de ancho $\propto \omega_D$ con interacción atractiva entre los electrones con momentos opuestos \vec{k} y $-\vec{k}$ (Región sombreada).

poblados, mientras que los estados con $k > k_F$ tienen población cero. La interacción $V(\vec{k} - \vec{k}')$ denota la interacción efectiva electrón-electrón considerando la presencia de los fonones en la red cristalina. La interacción electrón-fonón genera una atracción efectiva entre los electrones que se encuentran a una distancia ω_D de la energía de Fermi, donde la frecuencia ω_D es la frecuencia de Debye que representa la escala máxima de las excitaciones iónicas. Entonces la forma explícita del potencial efectivo de interacción es

$$V(\vec{k} - \vec{k}') = \left\{ \begin{array}{l} -g \text{ si } \hbar\omega_D > |\epsilon_{\vec{k}+\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}}| \\ 0 \text{ en otro caso.} \end{array} \right\}, \quad (2.5)$$

donde g es una constante positiva. La expresión (2.5) implica que los electrones se encuentran en un mar estático de Fermi no interactuante, y sólo los electrones con espines opuestos a una distancia ω_D de la energía de Fermi interactúan de forma atractiva.

Es conveniente reescribir el Hamiltoniano en términos de los operadores de campo fermiónicos $\hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \psi_{\sigma,\vec{k}}(\vec{r}) \hat{c}_{\vec{k},\sigma}$ siendo $\psi_{\sigma,\vec{k}}$ las funciones de onda de partícula individual del término ideal del Hamiltoniano, o bien en términos de $\hat{\Psi}_{\sigma,\vec{k}}$, que no es más que la transformada de Fourier de la expresión anterior

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} \hat{\Psi}_{\sigma,\vec{k}}^\dagger \hat{\Psi}_{\sigma,\vec{k}} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \hat{\Psi}_{\uparrow,\vec{q}-\vec{k}}^\dagger \hat{\Psi}_{\downarrow,\vec{k}}^\dagger V(\vec{k} - \vec{k}') \hat{\Psi}_{\downarrow,\vec{q}-\vec{k}'} \hat{\Psi}_{\uparrow,\vec{k}'}. \quad (2.6)$$

En el apéndice (B) se deriva la construcción de la función de partición desde el contexto de la teoría cuántica de campos. Con el fin de hacer continua la lectura del texto en esta sección se supone conocida la expresión para la acción en términos de los números fermiónicos de Grassmann $\phi(\vec{k}, \omega_n)$, antiperiódicos en ω_n , con $\omega_n = (2n + 1)/(\hbar\beta)$ las frecuencias de Matsubara para fermiones y n en los números naturales. La física del sistema esta contenida en la función de partición Z , la cual se escribe como

$$Z = \int d\phi^* \int d\phi e^{-S(\phi^*, \phi)}, \quad (2.7)$$

donde la acción es

$$S = \sum_{\vec{k},\omega} \sum_{\sigma} (\phi_{\vec{k}\sigma}^* i\hbar\omega \phi_{\vec{k}\sigma} + H(\phi_{\vec{k}\sigma}^*, \phi_{\vec{k}\sigma}) - \mu_\sigma N(\phi_{\vec{k}\sigma}^*, \phi_{\vec{k}\sigma})), \quad (2.8)$$

donde k denota $k = (\vec{k}, \omega_n)$. La acción se puede entender como una transformada de Legendre del Hamiltoniano en tiempo complejo. La función de partición esta escrita en el *ensemble* gran canónico, μ denota el potencial químico, y $N(\phi_{\vec{k}\sigma}^*, \phi_{\vec{k}\sigma})$ es el funcional del número de partículas en términos de los campos de Grassmann. Esto permite escribir la acción para el problema de BCS,

$$S[\phi] = \sum_k \phi_{k,\sigma}^* (-i\hbar\omega_n + \epsilon_{\vec{k}} - \mu) \phi_{k\sigma} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{k,k',q} \phi_{q-k,\uparrow}^* \phi_{k,\downarrow}^* V(\vec{k} - \vec{k}') \phi_{q-k',\downarrow} \phi_{k',\uparrow}. \quad (2.9)$$

En general no existen soluciones analíticas para la función de partición. Es por ello, que es necesario introducir un campo auxiliar a través de la transformación de

Hubbard-Stratonovich, que convierte el término cuártico de la acción en un término cuadrático en los campos fermiónicos.

La forma explícita de la transformación de Hubbard-Stratonovich depende del potencial de interacción y puede desacoplar de distintas formas el término de interacción de la acción [73,74], estas formas son los denominados *canal directo*, *canal de intercambio* y *canal de Cooper*, veáse figura en el apéndice (B). La elección del canal trae implícito el parámetro de orden de la transición de fase que se desea estudiar. Para el caso de la superconductividad tipo BCS se usa el canal de Cooper. La transformación de Hubbard-Stratonovich es la de multiplicar por una unidad a la función de partición original

$$1 = \int d\Delta \int d\Delta^* \exp\left(\sum_{k,q} (\Delta(k, q) - g\phi_{q-k,\uparrow}^* \phi_{k,\downarrow}^*) g^{-1} (\Delta(k, q)^* - g\phi_{q-k,\downarrow} \phi_{k,\uparrow})\right), \quad (2.10)$$

esta expresión al desarrollarla cancela el término de orden cuarto en los campos fermiónicos de la acción original, a cambio de introducir un nuevo campo bosónico $\Delta(k, q)$. Ordenando los términos, la acción resulta

$$\begin{aligned} S[\Delta, \phi] &= \sum_{k,\sigma} \phi_{k\sigma}^* (i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)) \phi_{k,\sigma} + \Delta(k, q)^* \phi_{k,\uparrow}^* \phi_{q-k,\downarrow}^* + \\ &+ \Delta(k, q) \phi_{q-k,\downarrow} \phi_{k,\uparrow} - \frac{|\Delta(q, k)|^2}{g}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

de forma compacta es escribe como

$$\begin{aligned} S[\Delta, \phi] &= \sum_k (\phi_{k\uparrow}^*, \phi_{q-k\downarrow}) \cdot \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) & \Delta(q, k) \\ \Delta(q, k) & i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi_{k\uparrow} \\ \phi_{q-k\downarrow}^* \end{pmatrix} \\ &- \frac{|\Delta(q, k)|^2}{g}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Al introducir la notación $\Phi = (\phi_{k\uparrow}^*, \phi_{q-k\downarrow})^T$ se hace explícita la forma cuadrática de

la acción en los campos fermiónicos

$$Z = \int d(\phi^*, \phi) \int d(\Delta, \Delta^*) \exp \left(- \sum_{k,q} \frac{1}{g} |\Delta(q, k)|^2 - \Phi^* \mathbb{G}^{-1} \Phi \right), \quad (2.13)$$

con la función de Green definida como

$$- \hbar \mathbb{G}^{-1} = \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) & \Delta(k, q) \\ \Delta(k, q) & i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

por lo cual es posible integrar la función de partición Gaussiana en los campos Φ .

Esto define una acción efectiva

$$S_{ef} = -\hbar \text{Tr} \text{Ln}(-\mathbb{G}^{-1}) - \frac{|\Delta|^2}{g}, \quad (2.15)$$

donde se ocupa la identidad $\int d\Psi d\Psi^* \exp(\Psi^* \mathbb{A} \Psi) = \text{Tr}(-\mathbb{A})$ [73].

Al integrar sobre los campos fermiónicos, la función de partición queda escrita sólo en términos del campo bosónico Δ a través de la acción efectiva (2.15). La función de partición es

$$Z = \int d\Delta^* d\Delta e^{-S_{ef}(\Delta)}, \quad (2.16)$$

al comparar las ecuaciones de la teoría de Landau (2.7) con la expresión anterior (2.16), es posible identificar a la acción en términos de la energía libre de Landau.

$$S_{ef}(\Delta) = \frac{\Omega}{2} F_L(\Delta). \quad (2.17)$$

Ésta igualdad es la conexión entre la teoría microscópica de BCS y la teoría macroscópica de Ginzburg-Landau (2.1). El parámetro de orden es Δ (ver Fig:(2-1)). La expresión (2.16) es exacta y no presupone ninguna aproximación, sin embargo es imposible realizar de forma cerrada dicha integral. Por ello, es necesario realizar un desarrollo perturbativo cerca del punto crítico donde sucede la transición de fase. Esto es, un desarrollo en series de $\text{Ln}(-\mathbb{G}^{-1})$ alrededor del parámetro de orden Δ . Identificando las potencias de Δ en el desarrollo, se obtienen los coeficientes de la

teoría de Ginzburg-Landau $a(T)$ y $b(T)$.

Para el desarrollo perturbativo, es necesario determinar el valor de Δ , que extremiza a la acción efectiva S_{ef} , dicho extremo satisface $\delta S_{ef} = 0$. Proponiendo $\Delta(k, q) = \Delta_0 + \eta(k, q)$ y $q = 0$, se obtiene la ecuación conocida para el parámetro de orden.

$$\frac{\Delta_0}{g} = \frac{\Delta_0}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{\tanh(\frac{\xi_{\vec{k}}}{2k_B T})}{\xi_{\vec{k}}}, \quad (2.18)$$

donde $\xi_{\vec{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2 + \Delta_0^2}$.

Este sistema tiene siempre soluciones triviales $\Delta_0 = 0$, sin embargo, existe una temperatura crítica T_c , para la cual existen soluciones no triviales $\Delta_0 \neq 0$. La temperatura crítica se obtiene de la ecuación (2.18) fijando $\Delta_0 = 0$, la expresión explícita para la temperatura crítica es

$$k_B T_c = \frac{8\gamma}{\pi e^2} \hbar \omega_D e^{-1/N(\epsilon_F)|g|}, \quad (2.19)$$

siendo ϵ_F la energía de Fermi y $N(\epsilon_F)$ el número de electrones a la energía de Fermi [4]. Donde la suma sobre \vec{k} se restringe a la banda de momentos alrededor de la energía de Fermi de ancho ω_D/v_F , siendo v_F la velocidad de Fermi. Mientras el parámetro de orden a temperatura cero es

$$\Delta_0(T = 0) = \frac{8}{e^2} \hbar \omega_D e^{-1/N(\epsilon_F)|g|}. \quad (2.20)$$

De esta forma, el parámetro de orden a temperatura cero y la temperatura crítica obedecen la expresión

$$\Delta_0(T = 0) = \frac{\pi}{\gamma} k_B T_c, \quad (2.21)$$

esta expresión es universal del estado BCS [4]. La teoría BCS fue originalmente propuesta para electrones en una red cristalina tridimensional.

2.2.2. Estado Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov

Una de las suposiciones esenciales de la teoría original de BCS, y de la propuesta original de Cooper, es que los pares de Cooper responsables del estado superconductor tienen un momento de centro de masa cero. Sin embargo, electrones en presencia de campos externos dependientes del espín, tienden a aparearse en estados de Cooper con momento de centro de masa finito. La presencia de campos dependientes del espín produce un desbalance en las energías de Fermi $\epsilon_{F\uparrow} \neq \epsilon_{F\downarrow}$, este desbalance fue estudiado por Fulde y Ferrel [75] y Larkin y Ovchinnikov [76] en la teoría que hoy en día se conoce como superconductividad tipo FFLO, donde el parámetro de orden tiene dependencia en el momento de centro de masa no trivial.

Los *ansatzs* de Fulde y Ferrel (FF) y el de Larkin y Ovchinnikov son respectivamente,

$$U \langle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger \rangle = \Delta \exp^{2i\vec{Q} \cdot \vec{i}} \quad (2.22)$$

$$U \langle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger \rangle = 2\Delta \cos(2\vec{Q} \cdot \vec{i}), \quad (2.23)$$

donde \vec{Q} denota el momento de centro de masa del par de Cooper.

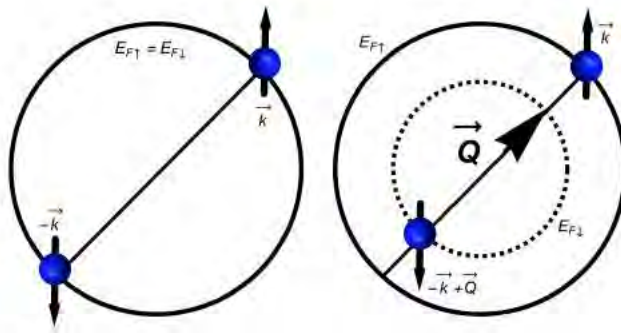


Figura 2-4: Estados FFLO. Del lado izquierdo se esquematiza la formación de los pares de Cooper cuando la energía de Fermi es simétrica en los estados de espín. Del lado derecho, se muestra que el desbalance en las energías de Fermi produce apareamientos con momento de centro de masa no nulo.

Bajo el esquema introducido previamente en (2.2.1) es posible encontrar el expec-

tro de excitaciones elementales, el cual resulta en

$$\xi_{\vec{k}}^{(FFLO)} = \xi_{\vec{k}}^{(BCS)} \pm \frac{(\epsilon_{\vec{k}+\vec{Q},\uparrow} - \mu_{\uparrow}) - (\epsilon_{-\vec{k}+\vec{Q},\downarrow} - \mu_{\downarrow})}{2}, \quad (2.24)$$

dicha relación de dispersión implica que a mayor desbalance en el potencial químico, mayor es el vector \vec{Q} del momento del centro de masa del par de Cooper. Esto significa que el estado macroscópico de muchos cuerpos de mínima energía corresponde a pares de Cooper con momento de centro de masa no nulo.

Como se esquematiza en la figura (2-4), el apareamiento de los pares de Cooper se da con un momento de centro de masa distinto de cero cuando existe desbalance en la energía de Fermi de los estados de espín. Dado que la energía del espectro de excitaciones elementales puede ser negativa, existen excitaciones elementales aún a temperatura cero, en contraste con el estado BCS tradicional, el cual a temperatura cero carece de excitaciones elementales. El desbalance en las energías de Fermi produce que existan partículas no apareadas a temperatura cero.

2.3. Ondas de espín y ondas de carga

Además de la inestabilidad tipo BCS, los sistemas electrónicos pueden mostrar otro tipo de inestabilidades como las denominadas ondas de espín o las ondas de carga las cuales son un ordenamiento espacial ya sea del espín o de la carga [73].

Las fases de ondas de espín y de carga se pueden explicar desde el punto de vista de la teoría cuántica de campos a través de la introducción de nuevos campos en la transformación de Hubbard-Stratonovich adicionales al campo del estado superconductor. Estos campos son proporcionales a operadores tipo densidad, para las ondas de carga y espín σ respectivamente, los campos estan dados por,

$$\hat{\rho}_{\vec{Q},\sigma} = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}+\vec{Q},\sigma}^{\dagger} c_{\vec{q},\sigma}, \quad (2.25)$$

$$\hat{\rho}_{\vec{Q}} = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}+\vec{Q},\uparrow}^{\dagger} c_{\vec{q},\downarrow}, \quad (2.26)$$

por ejemplo para un sistema bidimensional con simetría cuadrada y constante de red a , si $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ el primer operador toma en consideración una modulación espacial en la densidad, esto significa que si el valor de expectación de dicho operador es distinto de cero, entonces las cargas se distribuyen en un tipo tablero de ajedrez, si $\vec{Q} = (\pi/a, 0)$ y el valor de expectación de $\hat{\rho}_{\vec{Q},\sigma}$ es distinto de cero entonces las cargas se acomodan en líneas paralelas. Mientras el operador $\hat{\rho}_{\vec{Q}}$ toma en cuenta modulaciones espaciales del espín y es el relevante para los estados magnéticos. En el modelo de Fermi-Hubbard repulsivo este campo determina la formación de estados antiferromagnéticos.

La inclusión de ondas de espín y de carga requiere introducir campos auxiliares en las transformaciones de Hubbard-Stratonovich que permitan desacoplar la acción en los campos fermiónicos, esto implica emplear otros canales de la interacción (ver Apéndice: (B)).

$$\rho_{\vec{Q},\sigma} = \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}+\vec{Q},\sigma}^\dagger \phi_{\vec{q},\sigma} \quad (2.27)$$

$$\hat{\rho}_{\vec{Q}} = \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}+\vec{Q},\uparrow}^\dagger \phi_{\vec{q},\downarrow}. \quad (2.28)$$

A continuación se presenta el estudio de la formación de ondas de espín, y del estado superconductor, partiendo una acción que incluye interacciones entre partículas de mismo espín,

$$\begin{aligned} S(\phi^*, \phi) &= \sum_{\sigma} \sum_k \phi_{\sigma}^*(k) (i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu_{\sigma})) \phi_{\sigma}(k) \\ &+ \frac{1}{\beta N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \left(\sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} V^{\sigma, \sigma}(\vec{q}) \phi_{\sigma}^*(k+q) \phi_{\sigma}(k) \phi_{\sigma}^*(k'+q) \phi_{\sigma}(k') \right. \\ &\left. + V^{\sigma, \sigma'}(\vec{k} - \vec{k}') \phi_{\uparrow}^*\left(\frac{q}{2} + k\right) \phi_{\downarrow}^*\left(\frac{q}{2} - k\right) \phi_{\downarrow}\left(\frac{q}{2} - k'\right) \phi_{\uparrow}\left(\frac{q}{2} + k'\right) \right), \end{aligned}$$

donde $V^{\sigma, \sigma}$ denota la interacción entre espines iguales, y $V^{\sigma, \sigma'}$ interacción entre espines opuestos. Los campos de Hubbard-Stratonovich para incluir ondas de carga

y el estado superfluido están dados por las expresiones

$$\rho_\sigma(q) = \frac{2iV^{\sigma,\sigma}(\vec{q})}{\beta N} \sum_k \phi_\sigma^*(k+q)\phi_\sigma(k), \quad (2.29)$$

$$\Delta(q, k) = \sum_{k'} V^{\sigma,\sigma'}(\vec{k} - \vec{k}') \phi_A^*\left(\frac{q}{2} + k'\right) \phi_B^*\left(\frac{q}{2} - k'\right), \quad (2.30)$$

$\rho_\sigma(q)$ es proporcional al operador de densidad de carga Eq.(2.28), mientras el campo bosónico del superconductor se introdujo previamente. De esta forma es posible tomar en cuenta ondas de carga y superconductividad. En términos de estos nuevos campos la acción se reescribe como

$$\begin{aligned} S(\phi^*, \phi, \Delta, \Delta^*, \rho) &= \sum_\sigma \sum_k \phi_\sigma^*(k) (i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu_\sigma)) \phi_\sigma(k) \\ &+ \sum_{k,q} \sum_\sigma i\rho_\sigma(q) \phi_\sigma^*(k+q) \phi_\sigma(k) - \beta N \sum_q \rho_\sigma(q) (V^{\sigma,\sigma}(q))^{-1} \rho_\sigma(-q) \\ &+ \sum_{k,q} \Delta(k, q) \phi_A^*\left(\frac{q}{2} + k\right) \phi_B^*\left(\frac{q}{2} - k\right) + \Delta^*(k, q) \phi_A\left(\frac{q}{2} + k\right) \phi_B\left(\frac{q}{2} - k\right) \\ &+ \beta N \sum_{k,k',q} \Delta_\sigma(q, k) (V^{\sigma,\sigma'}(\vec{k} - \vec{k}'))^{-1} \Delta(q, k) \end{aligned} \quad (2.31)$$

De la misma manera que en la teoría (2.2.1) la acción se vuelve cuadrática en los campos fermiónicos, e introduce dos nuevos campos ρ y Δ que toman en consideración la interacción,

$$\begin{aligned} S(\phi^*, \phi, \Delta, \Delta^*, \rho) &= \sum_k \Phi^*(k) \mathbb{G}^{-1} \Phi(k) \\ &- \beta N \left(\sum_q \rho_\sigma(q) (V^{\sigma,\sigma}(\vec{q}))^{-1} \rho_\sigma(-q) - \sum_{k,k'} \Delta(k) (V^{\sigma,\sigma'}(\vec{k} - \vec{k}'))^{-1} \Delta(k) \right), \end{aligned}$$

donde por simplicidad se asume un momento nulo del centro de masa de los pares de Cooper y $\Phi^*(k) = (\phi_\uparrow^*(k), \phi_\downarrow(-k), \phi_\uparrow^*(k+Q), \phi_\downarrow(-(k+Q)))$, siendo la función de Green

$$\mathbb{G}^{-1} = \begin{pmatrix} (i\hbar\omega_n - \xi_{\vec{k},A}) & \Delta(k) & -i\rho_Q^\uparrow & 0 \\ \Delta^*(k) & (i\hbar\omega_n + \xi_{\vec{k},\downarrow}) & 0 & -i\rho_Q^\downarrow \\ i\rho_Q^\uparrow & 0 & (i\hbar\omega_n - \xi_{\vec{k}+\vec{Q},\uparrow}) & \Delta(k+Q) \\ 0 & i\rho_Q^\downarrow & \Delta^*(k+Q) & (i\hbar\omega_n + \xi_{\vec{k}+\vec{Q},\downarrow}) \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

donde $\xi_{\vec{k},\sigma} = \epsilon_{\vec{k}} - \tilde{\mu}_\sigma$, con $\tilde{\mu}_\sigma = \mu_\sigma - \frac{N_\sigma}{N_s} V^{\sigma,\sigma}(\vec{0})$, siendo N_σ las poblaciones en los estados hiperfinos σ .

Dentro del esquema de Ginzburg-Landau es posible integrar sobre los campos fermiónicos, esto implica hacer un desarrollo en series de la acción efectiva alrededor del valor de los parámetros de orden evaluados en el valor de campo medio. Esto significa escribir a los campos como $\Delta_k = \Delta_k^0 + \delta\Delta(k)$ y $\rho_\sigma(Q) = \rho_\sigma^0(Q) + \delta\rho_\sigma$, separando a la función de Green en $\mathbb{G}^{-1} = \mathbb{G}_{\Delta,\rho}^{-1} + \Sigma_\Delta + \Sigma_{\rho,\uparrow} + \Sigma_{\rho,\downarrow}$, donde $\mathbb{G}_{\Delta,\rho}^{-1} = (\mathbb{G}^{-1})|_{\Delta=\Delta^0, \rho=\rho^0}$, es la \mathbb{G} evaluada en el valor de campo medio.

El rompimiento de la simetría que da origen a la densidad de carga se da cuando el valor de expectación de $\rho_Q^\sigma \neq 0$. De igual manera es posible introducir campos de densidad de espín.

2.4. Modelo de Fermi-Hubbard

El modelo de Fermi-Hubbard se ha convertido en la base para estudiar sistemas fermiónicos fuertemente correlacionados en redes cristalinas. Gran parte del conocimiento que hoy se tiene acerca de la superconductividad convencional, el antiferromagnetismo, ondas de densidad, fases de pseudogap, localización, superconductividad onda $-d$ ha sido predicha y estudiada a través de modelos de Hubbard. Dicho modelo fue introducido por Martin Gutzwiller [77], John Hubbard [78, 79], y Junjiro Kanamori [80] a inicios de los años 60 y produjo una revolución en el entendimiento de las propiedades eléctricas y magnéticas de los materiales. El modelo de Fermi-Hubbard fue propuesto por Philip W. Anderson [81] como el modelo fundamental para comprender el hasta ahora inexplicado fenómeno de la superconductividad a altas temperaturas en los compuestos de cobre óxido. Recientemente este modelo ha sido estudiado en el contexto de la criticalidad cuántica, así como con fines de computación cuántica.

El modelo original de Fermi-Hubbard describe el movimiento de electrones en un sólido, contempla una sola banda electrónica e interacción local entre los electrones, y es relativamente el modelo discreto más simple de muchos cuerpos para describir a

un sólido.

El modelo de Fermi-Hubbard esta descrito por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \vec{i}, \vec{j} \rangle, \sigma} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + U \sum_{\vec{i}} \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}, \quad (2.33)$$

donde los electrones ocupan los sitios \vec{i} de la red cristalina, y tunelean con un coeficiente t a primeros vecinos. La interacción, caracterizada por el coeficiente U es local entre los electrones, y contempla de forma efectiva el efecto neto de la presencia de los iones en la red cristalina. El número de átomos o electrones que componen al sistema, es también una variable crucial en la fase que despliega el sistema, por ejemplo, si la densidad es cercana a un número entero, el sistema entra en una fase incompresible la cual se conoce como fase de aislante de Mott, en donde el metal se comporta como aislante en lugar de conductor. La dimensionalidad del sistema también es relevante, por ejemplo, en dos dimensiones el modelo de Fermi-Hubbard soporta superconductividad de onda- d [82]. Sin embargo, el entendimiento general del modelo de Fermi-Hubbard en dos dimensiones sigue siendo una incógnita, recientes esfuerzos con gases atómicos ultrafríos pretenden despejar el panorama para establecer con claridad cuales son las fases del sistema [83, 84].

El modelo de Fermi-Hubbard se clasifica según el signo de la interacción local; el modelo Hubbard atractivo si $U < 0$, y el modelo de Hubbard repulsivo si $U > 0$. A continuación describimos las fases presentes en dicho sistema en la región de *llenado medio* en la cual se supone un balance en las especies de espín, y el número promedio de electrones por sitio es 1.

2.4.1. Fermi-Hubbard Atractivo

El modelo de Fermi-Hubbard atractivo ha sido extensamente estudiado en el contexto de la superconductividad. El estado superconductor tipo BCS se presenta a interacciones débiles $|U| \ll t$, en este límite es posible definir un parámetro de orden

superconductor dado por

$$\Delta = U \langle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger \rangle.$$

Bajo esta igualdad y despreciando fluctuaciones, el Hamiltoniano (2.33) se vuelve cuadrático en los operadores de creación y aniquilación y es posible realizar una transformación unitaria que diagonaliza dicho Hamiltoniano. Dicha transformación se conoce como la transformación de Bogoliubov [5], la cual permite escribir al Hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = \sum_{n,\sigma} \xi_n \hat{\gamma}_{n,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{n,\sigma}, \quad (2.34)$$

donde $\hat{\gamma}_{i,\sigma}$, y $\hat{\gamma}_{i,\sigma}^\dagger$, son los operadores de creación y aniquilación de las cuasi-partículas de Bogoliubov, y ξ_n es la nueva relación de dispersión

$$\xi_n = \sqrt{(2t \sum_{\alpha} (1 - \cos(k_{\alpha}(n)a)) - \mu_{\sigma})^2 + \Delta^2},$$

donde k es un vector en la primera zona de Brillouin etiquetado por el índice n , y la constante de red a . La temperatura crítica del estado superconductor crece exponencialmente como función de U/t . Para gases alcalinos en 3D en la región de interacciones fuertes, aparece un estado ligado cerca de $U/t \approx 7,9$, esto da lugar a formación de dímeros que condensan (BEC), cuya temperatura crítica decrece como t^2/U . En la figura (2-5) se muestra el diagrama de fases, para $U < 0$ existen tres fases: superfluida, normal, y pseudogap. La fase superfluida es la que se explicó anteriormente, el estado normal, corresponde para metales al estado conductor, mientras que en gases ultrafríos corresponde a un gas normal de Fermi.

2.4.2. Fermi-Hubbard Repulsivo

El modelo de Fermi-Hubbard repulsivo en 3D a llenado medio exhibe las fases de aislante de Mott, ferromagnéticas y de conductor/gas normal de Fermi. En el régimen de llenado medio, existe una transformación unitaria \hat{U} que mapea el modelo

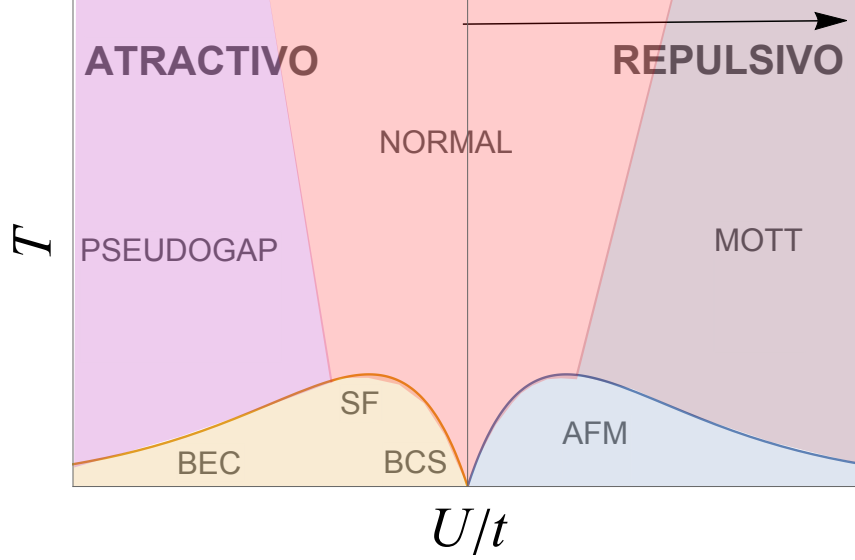


Figura 2-5: Diagrama de fases del modelo de Fermi-Hubbard tridimensional. El diagrama de fases exhibe para $U < 0$ fases normal y superfluidas, así como una región de pseudogap. Mientras que para $U > 0$ las fases del modelos son de fluido normal, aislante de Mott y un estado antiferromagnético.

de Hubbard atractivo con el modelo de Hubbard repulsivo [85].

$$\hat{U}^\dagger \hat{H}(U) \hat{U} = \hat{H}(-U), \quad (2.35)$$

dicha transformación explota la simetría partícula-hueco del sistema y esta dada por

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{U} &= f(i) \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \\ \hat{U}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{U} &= \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.36)$$

siendo $f(i) = \pm 1$ para cada *sublattice* de la red bipartita [85]. Esta transformación conecta el espectro de energías y el estado base del sistema para U negativa y positiva, establece una biyección entre el estado superconductor y el estado de Néel antiferromagnético. Dos regiones de estado de Néel se obtienen, una fase de densidad de espín a interacciones débiles, y un estado de Mott-Néel a interacciones fuertes, en el primero hay transporte de electrones, mientras en el estado de Mott-Néel corresponde a un orden antiferromagnético sin transporte de electrones.

En dos dimensiones el teorema de Mermin-Wagner [86] establece que no hay or-

den de largo alcance, por ello no es posible la formación de estados de Néel y superconductores a temperatura finita $T \neq 0$. Sin embargo, la teoría desarrollada por Berenziskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [87,88] establece que existen estados ordenados con largo alcance con decaimiento algebraico.

Teóricamente existen distintas metodologías para abordar este problema. Para sistemas uni-dimensionales es posible diagonalizar de forma exacta el Hamiltoniano, existen también algunas soluciones exactas para el caso uni-dimensional a través de la solución de Bethe. Métodos como Density Matrix Renormalization Group [89] y algunas extensiones de este método se usan en 1D y ocasionalmente en 2D. Otros métodos que se destacan son para sistemas en 2D y 3D, Dynamical Mean Field Theory [90], Bogoliubov-de Gennes, Quantum Monte Carlo [91], métodos estándares de campo medio, *ansatz* de Gutzwiller, entre otros.

2.5. Gases ultrafríos de Fermi.

2.5.1. Superfluidos

A diferencia de la teoría para los superconductores, los experimentos a ultrabajas temperaturas nK se realizan con átomos neutros. Es decir, no son superconductores sino superfluidos. Bajo el criterio de Landau [6] al cambiar la relación de dispersión $\xi_{\vec{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2 + \Delta_0^2}$ se hace una brecha de manera que se pueden crear excitaciones elementales sin fricción. En la figura: (2-6) se muestra la relación de dispersión para un conductor convencional y para un superconductor. Cualquier excitación con energía $\hbar k^2$ intersecta la relación de dispersión del conductor generando fricción. En el superconductor convencional, existen excitaciones que no generan fricción.

En contraste con la teoría de superconductividad donde la interacción atractiva electrón-electrón se da gracias a los iones de la red, en los átomos ultrafríos alcalinos suficientemente diluidos, la interacción se aproxima a un potencial de contacto $V(\vec{r} - \vec{r}') = g\delta(\vec{r} - \vec{r}')$, esta interacción puede ser atractiva o repulsiva dependiendo del estado interno de los átomos empleados. El formalismo para describir al superfluido de Fermi

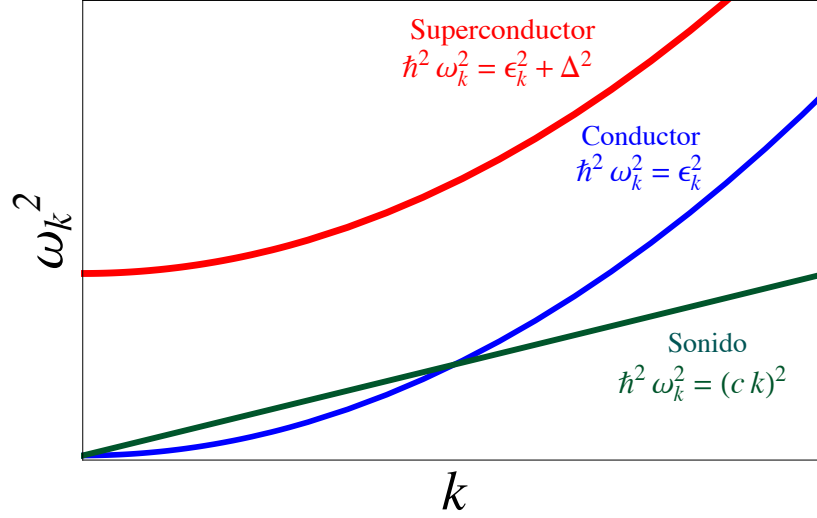


Figura 2-6: Criterio de Landau para un superfluido de Fermi. La interacción modifica la relación de dispersión, de forma que pueden crearse excitaciones elementales sin fricción.

es idéntico al descrito en esta sección, sin embargo se debe de tener precaución con la divergencia ultravioleta que introduce el potencial de contacto [71]. La ecuación (2.18) en el modelo de superconductor tiene una frecuencia de corte que es la frecuencia de Debye, esta regularización esta ausente en el superfluido de Fermi. Por lo cual la expresión (2.18) diverge. Dicha divergencia no es física y se debe a la aproximación de contacto en la teoría. Para regularizar la ecuación (2.18) es necesario tomar en consideración segundos órdenes en la ecuación de Lipmann-Schwinger para la matriz- \hat{T} , la cual es $\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{T}$ [41], con \hat{G}_0 la función de Green para partícula libre, esto da una expresión para la longitud de dispersión a

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = -\frac{1}{g} + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}}, \quad (2.37)$$

bajo esta interpretación la ecuación (2.18) se convierte en

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\tanh\left(\frac{\xi_{\vec{k}}}{2k_B T}\right)}{\xi_{\vec{k}}} - \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}} \right), \quad (2.38)$$

con esta normalización, la descripción del estado BCS es idéntica a la descrita pre-

viamente.

Finalmente, mencionamos que la descripción del superfluido esta basada en el modelo de dos componentes de Landau. En dicho modelo se postula que el superfluido esta compuesto por dos fluidos, un fluido viscoso, con fricción y un fluido sin fricción: superfluido. Donde no hay transferencia de momento entre las partes normal y superfluida. De tal forma, la densidad del superfluido se escribe como $\rho = \rho_n + \rho_s$, cada fase con velocidad \vec{v}_n y \vec{v}_s respectivamente. Después de un poco de álgebra [4, 6], es posible mostrar que para un gas libre la densidad superfluida es

$$\rho_s = 1 + \frac{2\hbar^2}{mnV} \sum_{\vec{k}} k^2 \frac{\partial f(\xi_{\vec{k}})}{\partial \xi_{\vec{k}}}, \quad (2.39)$$

siendo $f(\xi_{\vec{k}})$ la distribución ideal de Fermi, m la masa de las partículas, n , la densidad, y V el volumen. Si $T > T_c$ dicha densidad es igual a cero, y la densidad del fluido tiene solo componente normal $\rho = \rho_n$. Mientras que la densidad superfluida tiende a uno cuando $T = 0$ ($\rho = \rho_s$), aún cuando se hace distinción entre las dos componentes del fluido, estos existen simultáneamente y no hay manera de separar las fases. Estas cantidades son relevantes pues contienen toda la hidrodinámica del sistema.

Enfatizamos que todos los resultados presentados anteriormente, teoría de dispersión para átomos polares, modelo BCS y energía libre de Landau son para partícula libre. La extensión a la red óptica puede no ser trivial y es la que se presentará a continuación, pero el desarrollo previo presenta el marco teórico en el que se trabajó.

2.5.2. Cruce BEC-BCS

El cruce BEC-BCS consiste en que un sistema de partículas de Fermi en dos estados hiperfinos con igual población e interacción atractiva puede transitar de manera continua de un estado donde los fermiones se aparean a través del mecanismo de Cooper a un estado en el que se forman dímeros de dos partículas fermiónicas, es decir se forma una molécula bosónica, que condensa en el estado BEC.

Dicha idea fue introducida por primera vez por Eagles [27] en el contexto de materia condensada, estudiando la transición de semiconductor a superconductor de

SrTiO₃ en la cual el tamaño de los pares responsables de la superconductividad era mucho menor que el espaciamiento medio entre los electrones, es decir, se formaban moléculas di-electrónicas, con espín entero, por tanto, bosónicas .

Posteriormente, en el contexto de gases ultrafríos [28], Leggett estudió un gas diluido de Fermi, en el cual a través de una resonancia de Feshbach la interacción evoluciona de ser atractiva a repulsiva, y permite que el sistema transite de un estado superfluido tipo BCS, a un estado molecular BEC. Aún cuando la longitud de dispersión diverge en la resonancia de Feshbach, la transición BEC-BCS es continua. Leggett mostró que la transición BEC-BCS puede ser explicada desde campo medio, partiendo de las ecuaciones para el parámetro BCS y la conservación del número de partículas de la teoría BCS las cuales es posible escribir de la siguiente manera, denotando a $U_0 = \frac{4\pi a \hbar^2}{m}$

$$1 = \frac{U_0}{2} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\vec{k}}} - \frac{1 - 2f(E_{\vec{k}})}{E_{\vec{k}}} \right) \quad (2.40)$$

$$N = \sum_{\vec{k}} \left(1 - \frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu}{E_{\vec{k}}} \right). \quad (2.41)$$

Es posible resolver dichas ecuaciones en el *cruce*, esto significa variar continuamente el parámetro $1/ak_F$ desde el lado BCS el cual corresponde al límite $1/ak_F \rightarrow -\infty$, pasando por el régimen de unitariedad $1/ak_F \rightarrow 0$, hasta el límite BEC $1/ak_F \rightarrow \infty$. En el límite BCS el potencial químico es la energía de Fermi $\mu = \epsilon_F$, y el parámetro de orden Δ y la temperatura crítica corresponden a los derivados en la teoría BCS convencional (2.21) y (2.19) respectivamente. Por otra parte, en el límite BEC, el potencial químico se aproxima a la mitad de la energía de ligadura molecular $\epsilon_M = -\hbar^2/2ma^2$, mientras la brecha $\Delta = 4\epsilon_F/\sqrt{3\pi ak_F}$. Bajo esta descripción la temperatura crítica en el límite BEC

$$k_B T_c = \frac{|\epsilon_M|}{(\ln(|\epsilon_M|/\epsilon_F))^{3/2}},$$

sin embargo dicha temperatura no corresponde a la temperatura crítica del superfluido, sino a la temperatura a la cual se disocian las moléculas. El modelo de campo

medio de Leggett describe cualitativamente el cruce BEC-BCS, pero no incluye las excitaciones elementales de pares con momento centro de masa no nulo, por lo cual sobreestima la temperatura crítica. La temperatura crítica de condensación es

$$k_B T_c^{BEC} \approx 0,218 \epsilon_F, \quad (2.42)$$

la cual es posible deducir del modelo de Nozières y Schmit-Rink (NSR) [92]. Dicho modelo incluye momento del par molecular no nulo.

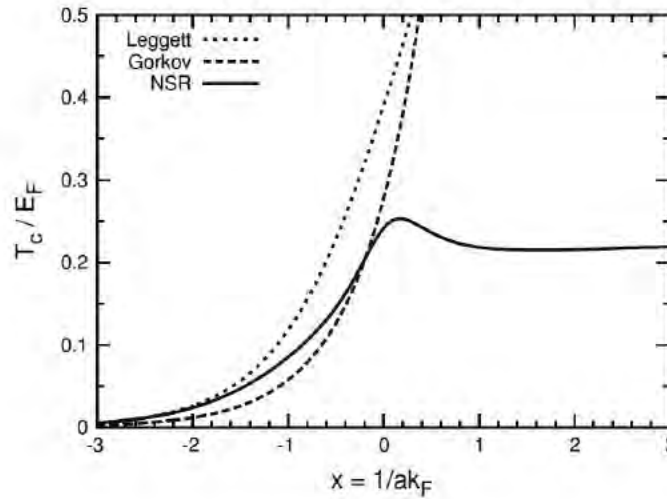


Figura 2-7: Temperatura crítica de los superfluidos para los modelos de Leggett, Gorkov y NSR. Imagen tomada de [94].

En Fig:(2-7) se muestra la temperatura de transición a superfluido del modelo de Leggett, Gorkov, y NSR en el cruce BEC-BCS. Mientras la teoría de Leggett y ligeras modificaciones como la de Gorkov muestran que la temperatura crítica crece indefinidamente [94,95] , el modelo NSR tiene un máximo cerca de unitariedad $1/ak_F \rightarrow 0$. Existe hoy en día un amplio debate acerca de lo que sucede en este régimen [93,94] , estudios más recientes no obtienen ningún máximo en la temperatura crítica como función de $1/ak_F$ [96], además de que del lado molecular la longitud de dispersión es $0,6a$ [97], y no $2a$. Tomando en cuenta este hecho, estudios de Quantum Monte Carlo, estiman una temperatura crítica de $k_B T_c^{BEC} \approx 0,16 \epsilon_F$, en el régimen repulsivo

débilmente interactuante.

En Fig: (2-8) se muestra el diagrama de fases como función de $1/ak_F$, donde se distinguen la fase superfluida tipo BCS, para $1/ak_F \rightarrow 0$ para temperaturas superiores a la crítica hay una región de pseudogap, en la cual no hay superfluido pero existe un apareamiento entre los fermiones. Del lado BEC, esto significa que persiste el estado del sistema es un gas normal de Bose, no superfluido, y la temperatura T^* indica la temperatura de disociación de la molécula, y no de condensación.

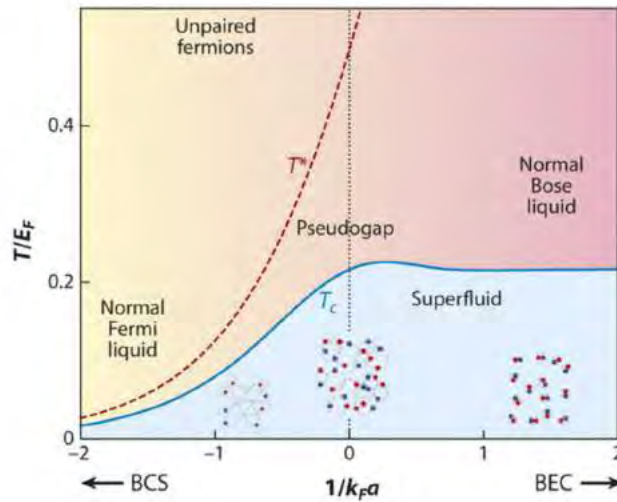


Figura 2-8: Diagrama de fases del cruce BEC-BCS. Imagen tomada de [98]. La línea sólida indica la temperatura crítica del superfluido, mientras la línea punteada indica del lado BCS la temperatura de disociación de pares de Cooper, y del lado BEC la temperatura a la cual se rompen los dímeros.

Finalmente mencionamos el concepto de universalidad del cruce BEC-BCS. Esta idea fue introducida por Bertsch, para un sistema de fermiones con una longitud de dispersión a infinita y un alcance de interacción de contacto (pseudopotencial delta). En este límite el sistema tiene una sola escala de longitud, la distancia entre partículas, o bien k_F^{-1} , por lo cual todas las cantidades termodinámicas se vuelven universales. Es decir, el sistema se vuelve invariante de escala, al realizar una transformación de escala, el sistema se mantiene unitario y fuertemente interactuante, caso contrario con un gas con a finito, en el cual por ejemplo, se puede pasar de un régimen fuertemente interactuante, a un régimen débilmente interactuante escalando el volumen del contenedor del gas.

El cruce BEC-BCS ha sido estudiado desde el contexto de la superconductividad a altas temperaturas, debido a que la distancia de los pares en dichos superconductores es ligeramente mayor que la distancia media entre electrones.

2.5.3. Gases ultrafríos en el modelo Fermi-Hubbard

Es posible emular el modelo de Fermi-Hubbard en gases cuánticos ultrafríos a través de redes cristalinas sintéticas creadas con potenciales ópticos de luz. Estos sistemas denominados redes ópticas se basan en el acoplamiento del momento dipolar eléctrico de los átomos con la luz. Al contrapropagar dos haces de luz de longitud

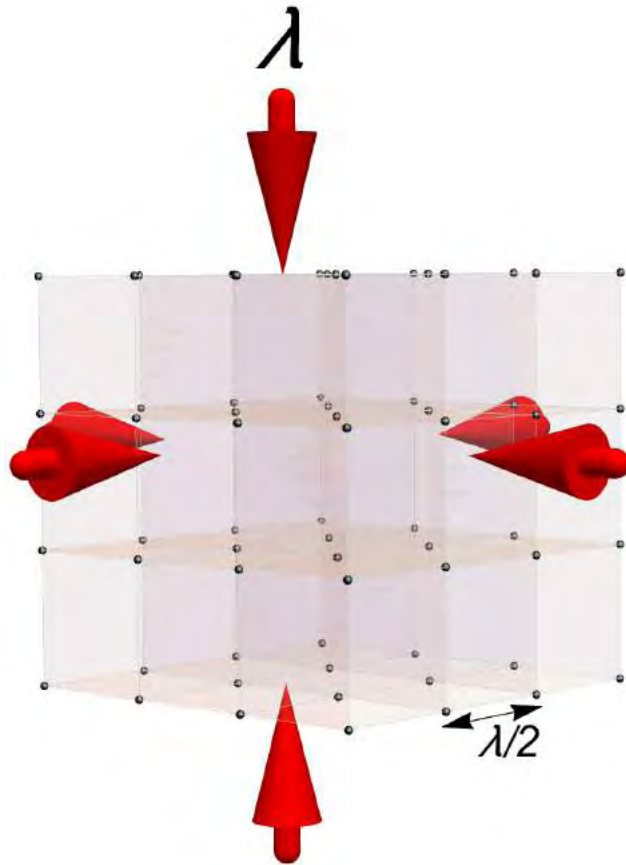


Figura 2-9: Cristal artificial creado contrapropagando tres haces de luz, esto crea un patrón de onda estacionario, que se acopla al momento dipolar de los átomos y crea un potencial óptico.

de onda λ se crea una onda estacionaria de longitud de onda $\lambda/2$, el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r})$ se acopla al momento dipolar eléctrico \vec{d} de los átomos, a través del potencial

$V(\vec{r}) = \alpha \vec{d} \cdot \vec{E}$, y si la respuesta es lineal $\vec{d} \propto \vec{E}$, entonces el potencial de la interacción átomo-luz es proporcional a la intensidad de los haces de luz incidentes.

Para un átomo de dos niveles $|g\rangle$ y $|e\rangle$, de energías E_g y E_e denotan la energía del estado base y el estado excitado, al incidir un campo de radiación dado por

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{\epsilon} E_0 \cos(kz - \omega t) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2w^2(z)}\right) \quad (2.43)$$

donde $\vec{\epsilon}$ es un vector unitario en la dirección del plano $x - y$, y $w(z)$ es el ancho del haz gaussiano que define la extensión radial del haz de luz, la interacción dipolo-luz esta dada por

$$V(\vec{r}) = \frac{\Omega^2}{\delta} \cos^2(2\pi z/\lambda) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2w^2(z)}\right), \quad (2.44)$$

donde Ω denota la frecuencia de Rabi $\hbar\Omega = |\langle g|\hat{d} \cdot \vec{\epsilon}|e\rangle|E_0$ y δ la desintonía $\delta = \omega - (E_e - E_g)/\hbar$. Se crea un potencial periódico en el centro del haz gaussiano, el cual puede ser atractivo o repulsivo dependiendo del signo de la desintonía. Al contrapropagar láseres en las tres direcciones como se indica en la Fig: (2-9) en el centro de los haces gaussianos es posible crear un potencial periódico con la siguiente estructura

$$V(\vec{r}) = V_{0x} \cos^2(k_x x) + V_{0y} \cos^2(k_y y) + V_{0z} \cos^2(k_z z), \quad (2.45)$$

donde $k_i = \lambda_i/2\pi$. Si la profundidad de los pozos es lo suficientemente grande en comparación con la energía térmica de los átomos, es posible expandir los operadores de campo en términos de las funciones de Wannier de la misma manera que para electrones en un cristal. Por otro lado, la interacción se debe ahora a colisiones tipo onda -s, y a diferencia del modelo original, dicha interacción puede modificarse a través de resonancias de Feshbach, el coeficiente U del modelo es

$$U = g \int d\vec{r} |w(\vec{r})|^4,$$

el coeficiente g se relaciona con la relación de dispersión a , a través de la expresión $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}$. Recalcamos que la resonancia de Feshbach es la responsable de la formación de dímeros del cruce BEC-BCS.

La primera realización de un modelo tipo Hubbard se reportó para bosones, dicho experimento se considera el primer simulador cuántico de un sólido [35]. Posteriormente, distintos modelos teóricos y experimentales han sido propuestos para fermiones, desde la primera realización del modelo de Hubbard con fermiones [203], modelos para el estudio de superfluidos en redes ópticas [100–104].

2.5.4. Fermi-Hubbard Extendido

Recientemente se han realizado esfuerzos en extender el modelo de Fermi-Hubbard para incluir distintos efectos tales como interacción de largo alcance [105–117], modificaciones a la geometría [36], dimensiones sintéticas [118–120], fases topológicas y superfluidos topológicos [121–126], supersólidos, ondas de densidad. Esto orillado de la motivación de predecir nuevas fases y proponer nuevos simuladores cuánticos. La extensión en la cual el presente trabajo se enfoca es el modelo de Fermi-Hubbard extendido con interacciones de largo alcance, dicha interacción se puede deber a la interacción propia de los átomos que componen al sistema, por ejemplo, si el sistema esta compuesto por átomos con momento dipolar magnético o moléculas con momento dipolar eléctrico o átomos de Rydberg, o bien, de origen sintético, con una interacción efectiva debido a factores externos, tales como un mezcla de gases de Bose-Fermi en los cuales las excitaciones elementales del condensado de Bose sirven de mediadores de una interacción efectiva de largo alcance entre los fermiones, o bien átomos en una cavidad cuántica en la cual los fotones de la cavidad producen una interacción de largo alcance entre los fermiones. También es posible simular una interacción artificial a través de dimensiones sintéticas.

En estas extensiones los métodos anteriormente mencionados exhiben sus limitaciones, por un lado, la dimensionalidad del espacio de Hilbert hace impracticable la diagonalización exacta, y las correlaciones de largo alcance hacen que métodos como Density Matrix Renormalization Group (DMRG) se vuelvan imprecisos.

En la presente tesis, se abordará el problema teórico desde un enfoque de teoría cuántica de campo, sin embargo las soluciones numéricas del problema del gas bidimensional dipolar de Fermi se hace en el contexto de campo medio, y el método

de Bogoliubov-de Gennes, despreciando las fluctuaciones. Mientras para el problema uni-dimensional se diagonaliza de forma exacta el Hamiltoniano con la prescripción de trabajar con número reducido de sitios como consecuencia de una limitación computacional.

La motivación de la tesis es entender las fases de los modelos extendidos de Fermi-Hubbard para gases de Fermi con interacciones de largo alcance.

2.5.5. Supersólido

El concepto de supersólido inicialmente surge desde el contexto de la materia condensada en el cual los átomos de un sistema presentan comportamiento de sólido y superfluido a la vez [127–131], es decir, la firma del supersólido es un orden espacial en la densidad del sistema, junto con un estado superfluido. La observación de dicha fase en sistemas como el He-4, sigue en debate, los experimentos de 2004 en los cuales se reportó la fase supersólida junto con un momento de inercia no clásico fueron puestos en duda en 2007 [15, 17, 39].

En el contexto de gases cuánticos ultrafríos, se han propuestos distintos simuladores cuánticos para observar la fase supersólida con condensados de Bose-Einstein confinados en redes ópticas donde la definición del estado supersólido consiste en la coexistencia de dos fases, una fase ordenada espacialmente en la densidad de los átomos de la red óptica y la fase superfluida, ambas fases corresponden a rompimientos continuos en la simetría. Dos experimentos han reportado la existencia de dicha fase, el primer grupo mostró la formación de tableros de ajedrez y otros tipos de orden en la densidad coexistiendo con una fase superfluida en un gas de rubidio confinado en una cavidad cuántica [40]. El segundo grupo mostró la formación de un patrón de líneas en la densidad coexistiendo con un estado superfluido en un gas de sodio con acoplamiento espín-órbita [132].

Teóricamente, entonces la definición de supersólido consiste en la coexistencia espacial de las fases que definen al estado superfluido y las equivalentes a las ondas de espín y de carga. Hasta el momento, no se ha reportado la observación del estado supersólido en fermiones por lo cual es de gran interés teórico proponer modelos

realistas para observar dicha fase.

2.6. Bogoliubov-de Gennes

Los métodos numéricos para resolver problemas de muchos cuerpos de fermiones, como se mencionó previamente, son diversos, en particular, en este trabajo abordamos la resolución de sistemas bi-dimensionales a través de ecuaciones en campo medio homogéneas, y el método de Bogoliubov-de Gennes para sistemas inhomogéneos. Por otro lado, en el caso de sistemas uni-dimensionales se recurre al uso de diagonalización exacta.

Las ecuaciones de campo medio para describir el estado superfluido tipo BCS se describieron en la sección de la Teoría BCS. Para incluir inhomogeneidades en el sistema es posible recurrir al método de Bogoliubov-de Gennes para diagonalizar localmente al Hamiltoniano en campo medio. La suposición básica de la teoría BdG es despreciar las fluctuaciones. A continuación se presenta la derivación de las ecuaciones de BdG para el siguiente Hamiltoniano

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \vec{i}, \vec{j} \rangle, \sigma} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + U \sum_{\vec{i}} \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow} + \sum_{\vec{i}} \mu(\vec{i}) n_{i, \sigma}, \quad (2.46)$$

dicho Hamiltoniano es idéntico al modelo de Fermi-Hubbard revisado previamente con la salvedad que incluye un término correspondiente a un potencial químico local, que puede deberse a desorden en la red óptica, o bien a la presencia de un potencial confinante externo. Dicha inhomogeneidad produce que la densidad $\hat{n}_{\vec{i}}$ no sea más independiente del sitio \vec{i} por lo cual es necesario diagonalizar de forma local el Hamiltoniano. Para ello se introduce el siguiente campo superfluido con dependencia espacial

$$\Delta_{\vec{i}} = U \langle c_{i, \uparrow}^\dagger c_{i, \downarrow}^\dagger \rangle,$$

y se desprecian las fluctuaciones en dicho campo. Esto permite escribir al Hamiltoniano de BCS local

$$\hat{H}_{BCS} = -t \sum_{\langle \vec{i}, \vec{j} \rangle, \sigma} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + \sum_{\vec{i}} \Delta_{\vec{i}} \hat{c}_{i, \downarrow} \hat{c}_{i, \uparrow} + \Delta_{\vec{i}}^\dagger \hat{c}_{i, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{i, \uparrow}^\dagger + \sum_{\vec{i}} \mu(\vec{i}) n_{i, \sigma}, \quad (2.47)$$

dicho Hamiltoniano al ser cuadrático en los campos fermiónicos es posible diagonalizarlo a través de una transformación unitaria U_{BdG} , la cual transforma $\hat{H}_{BdG} = U_{BdG}^\dagger \hat{H}_{BCS} U_{BdG}$, donde la dimensionalidad del Hamiltoniano H_{BCS} es de $2N \times 2N$. Por otra parte los operadores de cuasipartículas de Bogoliubov se obtienen también a través de \hat{U}_{BdG} , si $\hat{C} = (c_{1,\uparrow}, c_{2,\uparrow}, \dots, c_{N,\uparrow}, c_{1,\downarrow}^\dagger, \dots, c_{N,\downarrow}^\dagger)$, entonces los operadores de cuasipartículas son $\hat{\gamma} = \hat{U}_{BdG} \hat{C}$, mientras los eigenvalores de \hat{H}_{BdG} determinan el espectro de excitaciones elementales. Para el Hamiltoniano (2.47), es posible escribir

$$\hat{H}_{BCS} = \hat{C}^\dagger \hat{H} \hat{C}, \quad (2.48)$$

donde los elementos de matriz de \hat{H}_{BCS} son,

$$\mathbb{H}_{\vec{i},\vec{j}} = \begin{pmatrix} -t\delta_{\langle\vec{i},\vec{j}\rangle} + (V_{ext}(\vec{i}) - \mu)\delta_{\vec{i},\vec{j}} & \Delta_{\vec{i},\vec{j}} \\ \Delta_{\vec{i},\vec{j}}^* & t\delta_{\langle\vec{i},\vec{j}\rangle} - (V_{ext}(\vec{i}) - \mu)\delta_{\vec{i},\vec{j}} \end{pmatrix}.$$

denotando a $\delta_{\langle\vec{i},\vec{j}\rangle}$ como la delta de Kronocker a primeros vecinos. Las ecuaciones de BdG consisten en determinar la transformación unitaria, así como el espectro de energías

$$\hat{H}_{BCS} = \hat{C}^\dagger U_{BdG}^\dagger U_{BdG} \hat{H} U_{BdG}^\dagger U_{BdG} \hat{C} = \gamma^\dagger \hat{H}_{BdG} \gamma, \quad (2.49)$$

este procedimiento es autoconsistente en el sentido en que $\Delta_{\vec{i}}$ y $n_{\vec{i}}$ son incógnitas del problema pero es necesario proveer un ansatz en la diagonalización de \hat{B}_{BCS} para determinar la matriz unitaria \hat{U}_{BdG} , una vez calculada dicha matriz, se obtienen los valores de expectación de $\Delta_{\vec{i}}$ y $n_{\vec{i}}$ hasta que la solución converge. Los valores de

expectación se pueden obtener de la matriz unitaria \hat{U}_{BdG} ,

$$\begin{aligned}
1 &= \sum_{E>0} (|u_{\vec{i}}|^2 + |v_{\vec{j}}|^2), \\
\Delta_{\vec{i},\vec{j}} &= \sum_{E>0} V_{dip}(\vec{i}, \vec{j}) u_{\vec{i}} v_{\vec{j}}, \\
\mu(\vec{i}) &= \mu - V_{ext}(\vec{i}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{j}} n(\vec{j}) V_{dip}(\vec{i}, \vec{j}) \\
n_{\vec{i}} &= \sum_{E>0} (|u_{\vec{i}}|^2 f(\xi_{\vec{i}}) + |v_{\vec{i}}|^2 (1 - f(\xi_{\vec{i}})))
\end{aligned} \tag{2.50}$$

donde por simplicidad se identifica a los elementos de la matriz de la transformación unitaria

$$\begin{aligned}
c_{\vec{i},\uparrow} &= \sum_n (\gamma_{n,\uparrow} u_{n,\uparrow}(\vec{i}) - \gamma_{n,\downarrow}^\dagger v_{n,\downarrow}^*(\vec{i})) \\
c_{\vec{i},\downarrow} &= \sum_n (\gamma_{n,\downarrow} u_{n,\downarrow}(\vec{i}) + \gamma_{n,\uparrow}^\dagger v_{n,\uparrow}^*(\vec{i})),
\end{aligned} \tag{2.51}$$

con ello la forma explícita de las ecuaciones de BdG es

$$\sum_{\vec{j}} \mathbb{H}_{\vec{i},\vec{j}} \begin{pmatrix} u_{\vec{n},\uparrow}(\vec{j}) \\ v_{\vec{n},\downarrow}(\vec{j}) \end{pmatrix} = E^N \begin{pmatrix} u_{\vec{n},\uparrow}(\vec{i}) \\ v_{\vec{n},\downarrow}(\vec{i}) \end{pmatrix}. \tag{2.52}$$

El modelo de BdeG requiere ser resuelto de forma iterativa, dando como *ansatz* los valores iniciales del gap $\Delta_{\vec{i},\vec{j}}^{(0)}$, el potencial químico $\mu(\vec{i})^{(0)}$ y los números de ocupación $n(\vec{i})^{(0)}$. Al iterar una vez, la autoconsistencia en BDG (2.50) arroja nuevos valores $\Delta_{\vec{i},\vec{j}}^{(1)}$, $\mu(\vec{i})^{(1)}$ y $n(\vec{i})^{(1)}$, así al iterar $i + 1$ veces, el criterio de convergencia estará dado por la diferencia entre la distancia entre la i -ésima iteración y la $i + 1$ -ésima iteración.

$$\begin{aligned}
|\Delta_{\vec{i},\vec{j}}^{(i+1)} - \Delta_{\vec{i},\vec{j}}^{(i)}| &< \delta \\
|\mu(\vec{i})^{(i+1)} - \mu(\vec{i})^{(i)}| &< \delta \\
|n(\vec{i})^{(i+1)} - n(\vec{i})^{(i)}| &< \delta.
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Donde δ es un parámetro elegido a discreción para asegurar la convergencia del modelo, y la distancia entre las matrices se refiere a la norma de Frobenius, que no es sino la desviación estándar de los elementos de matriz/vector que componen a cada uno de los parámetro. Para ajustar el potencial químico se usará la aproximación de densidad local. La aproximación de densidad local nos permite obtener un potencial armónico que depende de la geometría inhomogénea que introduce la trampa armónica. Recurriendo al Hamiltoniano en segunda cuantización

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha=A,B} \int d^2r \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{opt}(\vec{r}) + V_{arm}(\vec{r}) - \mu N \right) \Psi_{\alpha}(\vec{r}) \\ & + \int d^2r \int d^2r' \Psi_A^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_B^{\dagger}(\vec{r}') V_{dip}(r, r') \Psi_B(\vec{r}') \Psi_A(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.54)$$

Para las soluciones estacionarias tales que

$$\frac{i\hbar \partial \Psi_{A,B}(\vec{r})}{\partial t} = [H, \Psi_{A,B}(\vec{r})] = 0, \quad (2.55)$$

para sistemas ultrafríos se justifica despreciar el término de energía cinética. Obteniendo una ecuación algebraica para el potencial químico local, que debe ser resuelto autoconsistentemente en el modelo de BdeG.

$$\mu(\vec{r})_{A,B} = \mu_{A,B} - V_{ext}(\vec{r}) - \frac{1}{2} \int d^2r' n_{B,A}(\vec{r}') V_{dip}(r, r'), \quad (2.56)$$

para la red óptica esta expresión coincide con la última ecuación en Eq: (2.53)

Capítulo 3

Gas dipolar de Fermi: Problema de dos cuerpos

En el presente capítulo se estudia la bicapa de redes ópticas de un gas dipolar de Fermi desde el contexto del problema de dos cuerpos, esto es, el problema de la dispersión de dos moléculas polares de Fermi colisionando en presencia de un mar estático de Fermi. La presencia de este mar de Fermi, aunque es no interactuante se ve reflejada en el principio de exclusión de Pauli.

En la primera sección del capítulo (3) presentamos el modelo estudiado, para posteriormente estudiar la formación de pares de Cooper desde el contexto del problema de dispersión de dos fermiones inmersos en un mar de Fermi no interactuante (3.2). Las secciones (3.3) y (3.4) están destinadas al estudio de la formación de estados ligados moleculares y a la dispersión de dichos estados de cuatro cuerpos respectivamente, esto da pie al estudio del problema del cruce BEC-BCS desde un contexto de un problema de pocos cuerpos.

El problema de Cooper en la red óptica ha sido estudiado previamente para interacciones de contacto [133–135]. Mientras el problema de dos cuerpos para átomos polares ha sido estudiado para bosones, y recientemente para fermiones en ausencia de confinamiento óptico [136–138]. Los resultados originales del presente capítulo se encuentran reportados en [139].

3.1. Modelo

El sistema consiste de moléculas polares fermiónicas polarizadas confinadas en una bicapa de potenciales ópticos bidimensionales, con constante de red a . Las moléculas se encuentran bajo presencia de un campo eléctrico externo, de manera tal que el momento dipolar eléctrico de las mismas es perpendicular a los planos que definen la red óptica (ver Fig.(3-2)). Como se explica adelante, en el presente capítulo se considerará sólo interacciones entre moléculas de distintas capas (interplanar), despreciando la interacción entre moléculas de la misma capa (intraplanar). El potencial dipolar en unidades gaussianas para dos dipolos eléctricos de momentos \vec{d}_1 , y \vec{d}_2 es,

$$V_{dip} = \frac{\vec{d}_1 \cdot \vec{d}_2 r^2 - 3(\vec{d}_1 \cdot \vec{r})(\vec{d}_2 \cdot \vec{r})}{r^5}, \quad (3.1)$$

siendo \vec{r} el vector posición que une ambos dipolos. Si ambos dipolos se encuentran orientados en la misma dirección, en coordenadas cilíndricas $r^2 = x^2 + y^2$ y $d_1 = d_2 = d$, la interacción se simplifica a

$$V_{dip} = d_1 d_2 \frac{r^2 - 2z^2}{(r^2 + z^2)^{5/2}} = d^2 \frac{r^2 - 2z^2}{(r^2 + z^2)^{5/2}}, \quad (3.2)$$

En la figura (3-1) se muestra el potencial dipolar para distintas separaciones de las capas paralelas. Dicho potencial es atractivo si $r < \lambda/\sqrt{2}$ y repulsivo en otro caso.

Es conveniente introducir dos parámetros adimensionales, el primero; el cociente entre la separación de las capas y la constante de red $\Lambda = \lambda/a$, el segundo; la interacción efectiva adimensional $\chi = a_d/\lambda = m_{eff}d^2/(\hbar^2\lambda)$ escrita en términos de la masa efectiva $m_{eff} = \hbar^2/2ta^2$, con t el coeficiente de tunelaje de la red a primeros vecinos. Se supone en adelante que las moléculas se encuentran en su estado base rovibracional. Además de que como se mencionó previamente, primero se desprecia la interacción en la misma capa. En general, y cómo se muestra en el capítulo (5), dicha interacción no es despreciable, dependiendo del cociente entre la intensidad de la interacción $g = a_d/a$, distintas inestabilidades de densidad pueden tener lugar [107–110, 140]. Para la presente sección del estudio del problema de dos cuerpos,

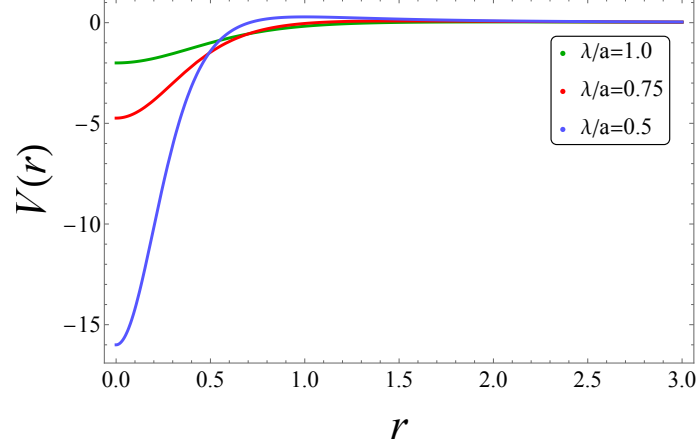


Figura 3-1: Potencial dipolar para distintas separaciones λ/a . El potencial es atractivo a distancias $r < \lambda/\sqrt{2}$ y repulsivo si $r > \lambda/\sqrt{2}$.

donde por simplicidad debido a que se estudian sólo sistemas bidimensionales r denota la distancia radial bidimensional, salvo que se indique lo contrario. Las características de este potencial son el largo alcance, es decir, decaen $1/r^3$, y tiene carácter inhomogéneo; el potencial es atractivo a distancias cortas, mientras es repulsivo a grandes distancias. Mantieniendo fija λ la separación entre las capas, y r la distancia intraplana dada por $r = |\vec{x}_A - \vec{x}_B| = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2}$, con A, B las etiquetas para las moléculas fermiónicas en cada capa, la expresión final para el potencial de interacción es

$$V(\vec{x}_A, \vec{x}_B) = d^2 \frac{r^2 - 2\lambda^2}{(r^2 + \lambda^2)^{5/2}}. \quad (3.3)$$

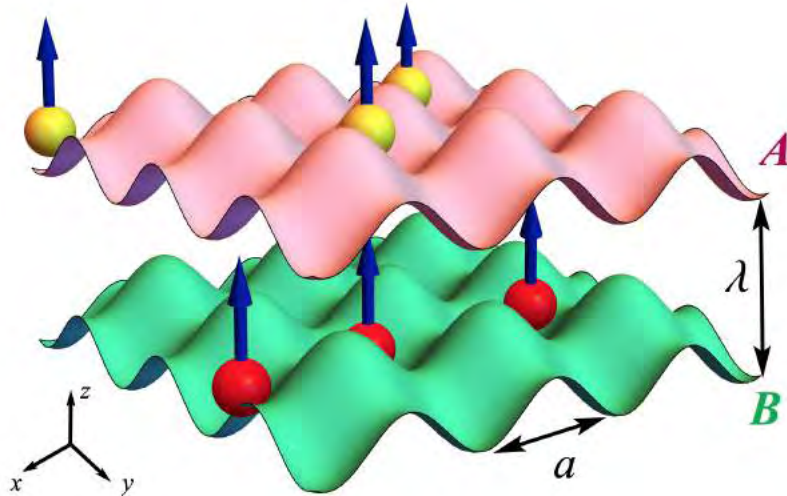


Figura 3-2: Representación esquemática del gas dipolar de Fermi. Las redes ópticas tienen una constante de red a , separadas una distancia λ , y el momento dipolar eléctrico de las moléculas es perpendicular al plano de las redes ópticas.

consideraremos fracciones de llenado bajas e interacciones débiles de manera tal que dichas inestabilidades son inicialmente despreciadas. Esta aproximación además supone que la interacción entre moléculas de distintas capas es mucho mayor que la interacción intraplano. Suponiendo que $\lambda = 0,75a$, entonces $V(\vec{x}_A = \vec{x}_B)/(gt) = 5$, mientras que si $\lambda = 0,5a$, dicho cociente aumenta a $V(\vec{x}_A = \vec{x}_B)/(gt) = 16$. Justificando así, el despreciar las interacciones entre moléculas confinadas en la misma capa.

3.2. Pares de Cooper

La formación de pares de electrones desde el contexto de el problema de dispersión en presencia de un mar estático de Fermi fue inicialmente estudiada por Cooper en 1958 [10] para un sistema homogéneo con interacción efectiva inter-electrónica débilmente atractiva. Con la finalidad de estudiar para el sistema propuesto la formación de pares de Cooper, procedemos en el mismo esquema planteado originalmente por Cooper.

La ecuación de Schrödinger para la función de onda de dos cuerpos $\Phi(\vec{x}_A, \vec{x}_B)$ es,

$$\left(\hat{T}_A + \hat{T}_B + \hat{V}(\vec{x}_A, \vec{x}_B)\right) \Phi(\vec{x}_A, \vec{x}_B) = E\Phi(\vec{x}_A, \vec{x}_B), \quad (3.4)$$

siendo \hat{T}_α el operador que incluye la energía cinética y el potencial óptico de confinamiento.

$$\hat{T}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha} \nabla_\alpha^2 + V_{opt}(\vec{x}_\alpha).$$

Es conveniente reescribir la ecuación de Schrödinger en términos de las coordenadas relativas y centro de masa \vec{R} y \vec{r} respectivamente. En estas coordenadas, se propone la función de onda de las dos moléculas como el producto

$$\Phi(\vec{x}_A, \vec{x}_B) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} u_{\vec{K}}(\vec{R}) \psi(\vec{r}),$$

siendo \vec{K} un vector en la primera zona de Brillouin del espacio recíproco correspondiente al momento del centro de masa. La función $u_{\vec{K}}(\vec{R})$ es de periodo $a/2$ y $\psi(\vec{r})$ es la función de la coordenada relativa a determinar. En este *ansatz* se asume que la red óptica es lo suficientemente profunda para considerar sólo la banda de energía más baja, además supone la aproximación de amarre fuerte. Debido a la distinguibilidad de las moléculas en las capas A y B no es necesario antisimetrizar la función de onda del par. La ecuación que obedece $\psi(\vec{r})$ es

$$(\vec{\xi}_{\vec{K}} \cdot \vec{T}_D + V(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (3.5)$$

donde

$$\vec{\xi}_{\vec{K}} = -2t(\cos(K_x a/2), \cos(K_y a/2)),$$

y

$$\vec{I} \cdot \vec{T}_D \psi(\vec{r}) = \sum_{i=x,y} \left(\psi(\vec{r} + \vec{\delta}_i) + \psi(\vec{r} - \vec{\delta}_i) \right),$$

con $\vec{\delta}_i = a\hat{e}_i$, \vec{I} es la matriz identidad 2×2 y \hat{e}_i el vector unitario en la i -ésima dirección. La energía del gas ideal de Fermi dentro de la aproximación de amarre fuerte con momento \vec{K} esta dada por $\epsilon_{\vec{K}} = -2t(\cos(K_x a) + \cos(K_y a))$. Expandiendo la función de onda para la coordenada relativa $\psi(\vec{r})$ en términos del momento relativo \vec{q}

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\vec{q}} \psi(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}, \quad (3.6)$$

definiendo

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

se obtiene la ecuación en el espacio de momentos

$$(E - E_{\vec{K}, \vec{q}})\psi(\vec{q}) = \sum_{\vec{q}'} V(\vec{q} - \vec{q}')\psi(\vec{q}'). \quad (3.7)$$

Debido a la presencia de la red, hay una dependencia del centro de masa y la coordenada relativa que no es posible desacoplar, lo cual representa una diferencia cualitativa con el problema original presentado por Cooper [10]. La ecuación de eigenvalores es E ,

$$1 = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\vec{q}'} \frac{V(\vec{q} - \vec{q}')}{E_{\vec{K}, \vec{q}'} - E}, \quad (3.8)$$

donde el índice primado indica que la sumatoria esta restringida a aquellos estados permitidos por el principio de exclusión de Pauli. Estos valores de \vec{q} , como en el problema de Cooper corresponden al par de moléculas interactuando en presencia de un mar de Fermi no interactuante. Entonces, las amplitudes para estados ocupados es cero, debido a que están prohibidos como consecuencia del principio de exclusión de Pauli. Esto implica que la suma esta restringida a vectores con momento relativo \vec{q} que satisfagan simultáneamente

$$\epsilon_{\frac{\vec{K}}{2} + \vec{q}} > \epsilon_F^A \quad \text{y} \quad \epsilon_{\frac{\vec{K}}{2} - \vec{q}} > \epsilon_F^B. \quad (3.9)$$

De acuerdo con el planteamiento original de Cooper se buscan soluciones para $\psi(\vec{r})$ con energías menores que la energía correspondiente a la suma de las energías de Fermi de cada capa, esto es $E = \epsilon_F^A + \epsilon_F^B - \Delta$, con $\Delta > 0$. El cálculo de esta energía determina la brecha de la energía que caracteriza al par de Cooper como función del parámetro que caracteriza la interacción y del momento del centro de masa \vec{K} , así como de la energía de Fermi en cada capa A y B . En contraste con el esquema original de Cooper para electrones en un metal donde sólo los electrones a una distancia ω_D de la energía de Fermi forman pares de Cooper, en (3.8) sólo se considera la restricción impuesta por el principio de exclusión de Pauli, sin un corte superior a la suma. Por otra parte, no existe divergencia ultravioleta (2.37) pues el potencial dipolar es en todo momento finito.

Todos los cálculos numéricos fueron considerando $N_x = N_y = 5 \times 10^2$, verificando para redes más grandes que los resultados fueran independientes del número de sitios. Es importante recalcar que la densidad de estados tiene una divergencia en $\epsilon_F = 0$,

es por ello que los resultados se presentan fuera de dicha región correspondiente a llenado medio.

Primero presentamos la dependencia de la brecha de la energía como función de la energía de Fermi para redes simétricas, esto es $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B$. En la figura: (3-3) se muestra Δ como función de la energía de Fermi considerando diversos valores de χ para separaciones fijas de la separación de las capas. Por simplicidad se asume $K_x = K_y = 0$. Cuadrados, círculos y triángulos corresponden a $\chi = 0,4; 0,5$ y $0,6$ respectivamente. La energía de ligadura del par es una función creciente, luego alcanza un máximo para después decrecer como función de la energía de Fermi. Este cambio de comportamiento sucede cuando la superficie de energía de Fermi cambia de abierta a cerrada, cuando esto sucede, la energía de ligadura decae exponencialmente como función de la energía de Fermi, $\Delta \sim \exp^{-\epsilon_F/\alpha}$, con $\alpha \sim \chi$. Al aumentar la interacción se aprecia que el pico máximo de la brecha de energía se mueve para la izquierda de la gráfica.

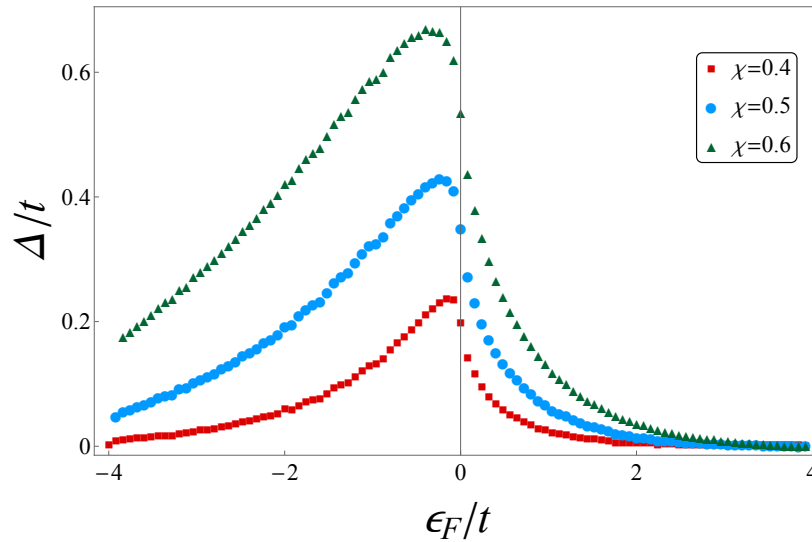


Figura 3-3: Energía de ligadura del par de Cooper Δ/t como función de la energía de Fermi en una red óptica simétrica $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B$.

Para ilustrar la dependencia de la energía del par en el momento del centro de masa \vec{K} , en Fig. (3-4) se grafica en unidades adimensionales dicha cantidad como función de $K_x a$ asumiendo $K_y = 0$ para $\chi = 0,4; 0,5; 0,6$. En este caso, asumimos las

mismas circunstancias que en la situación previa en Fig. (3-3) ($\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0,5t$). Se observa un máximo del valor de Δ en $\vec{K} = 0$, y al igual que en el caso previo, cuanto mayor grande es la interacción, mayor la energía de ligadura del par de Cooper. Esto significa que los pares de Cooper para energías de Fermi balanceadas se forman con momento de centro de masa igual a cero, pues es el estado que minimiza la energía.

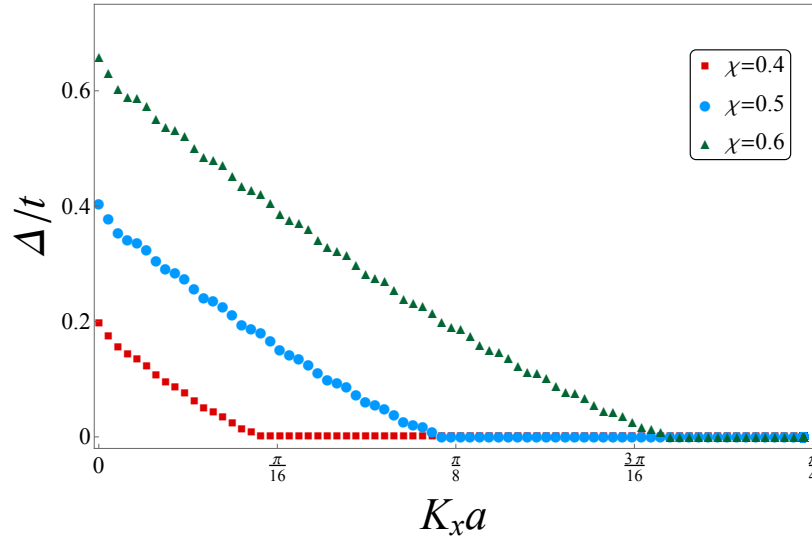


Figura 3-4: Δ como función del momento del centro de masa $K_x a$ para energías de Fermi simétricas $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0,5t$. Se considera $K_y = 0$ para valores de $\chi = 0,4; 0,5$ y $0,6$.

A continuación se presenta el estudio del problema de Cooper para energías de Fermi no simétricas en las capas A y B como función del momento de centro de masa. Para ejemplificar la formación de pares en el caso no balanceado, se fijó $\chi = 0,5$ y se grafica Δ como función de una de las coordenadas del centro de masa, para distintos imbalances en la energía de Fermi $\Delta\epsilon = \epsilon_A - \epsilon_B$. En la figura (3-5) se muestran las gráficas para la energía de ligadura para los desbalances de $\Delta\epsilon = 0,1; 0,2; 0,3; 0,5$, manteniendo constante $\epsilon_F^A = -0,5t$. De igual manera que como se había determinado en estudios previos, para el problema de dos cuerpos en 3D con interacción de contacto, en el caso bidimensional con interacción dipolar se obtiene que el desbalance en las energías de Fermi favorece la formación de pares de Cooper con momento de centro de masa no nulo. Cuando la diferencia de energías ϵ_F^A y ϵ_F^B es demasiado grande los pares de Cooper no pueden ser formados. El desbalance en

los factores de llenado imposibilita a las moléculas en la capa A con moléculas en la capa B debido a que el traslape de los estados accesibles es menor, sin embargo, es posible ajustar las poblaciones en cada capa para maximizar la energía de ligadura del par y con ello estudiar la posible emergencia de fases tipo FFLO.

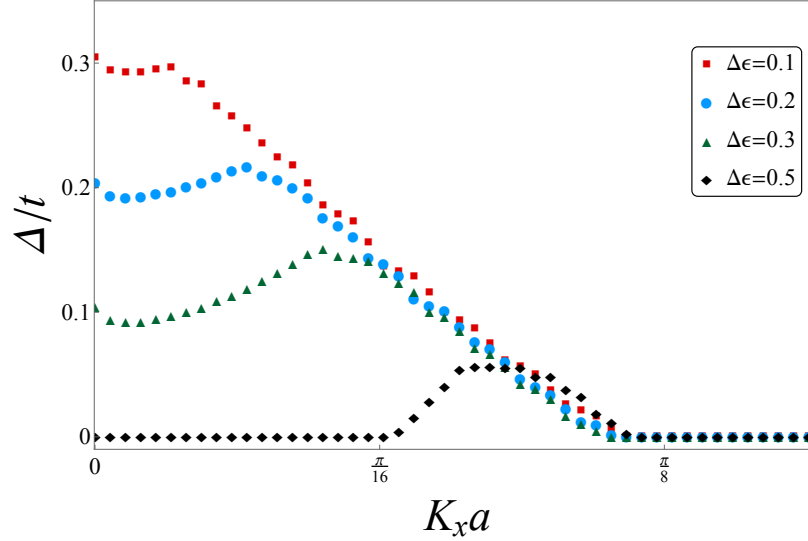


Figura 3-5: Δ como función de $K_x a$ para energías no simétricas de Fermi en las capas A y B . Se elige como energía de Fermi para la capa A $\epsilon_F^A = -0,5t$, manteniendo $K_y = 0$ y fijando la intensidad de la interacción $\chi = 0,5$. Se grafica $\Delta\epsilon = 0,1; 0,2; 0,3$ y $0,5$.

En la Fig.(3-6) ilustramos en la figura del lado izquierdo cómo se forman los pares en nuestro modelo. En los experimentos típicos con moléculas ultrafrías confinadas en redes ópticas bidimensionales, esta caricatura representa el tamaño de los pares de Cooper. Los pares de Cooper en el espacio físico tienen un decaimiento algebraico, en contraste con un estado ligado que decae exponencialmente como función de la distancia. La existencia de dicho estado ligado con decaimiento no exponencial (algebraico) es consecuencia del bloqueo de Pauli, es decir, debido al mar de Fermi no interactuante. En el siguiente capítulo se contrastarán los valores obtenidos desde el enfoque de dos cuerpos con la teoría de muchos cuerpos obtenida usando funcionales integrales de la teoría BCS a $T = 0$.

En la figura (3-7) se muestra la estructura de la función de onda pesada con el factor \sqrt{r} , para considerar el elemento de volumen en $2D$ en coordenadas polares,

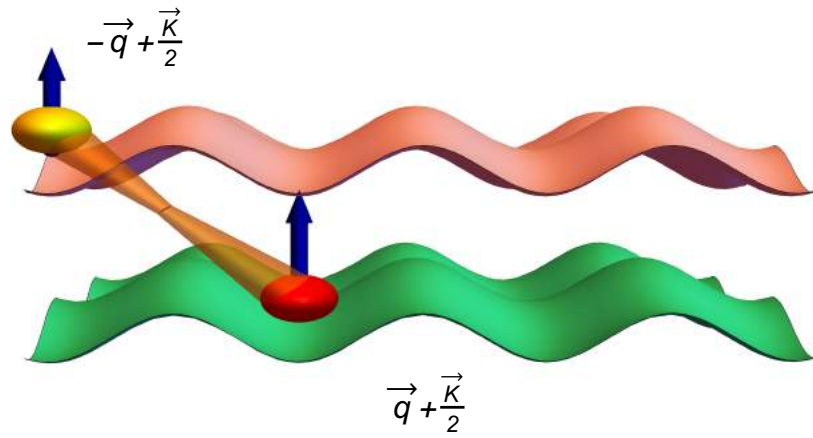


Figura 3-6: El esquema de la formación de pares de Cooper.

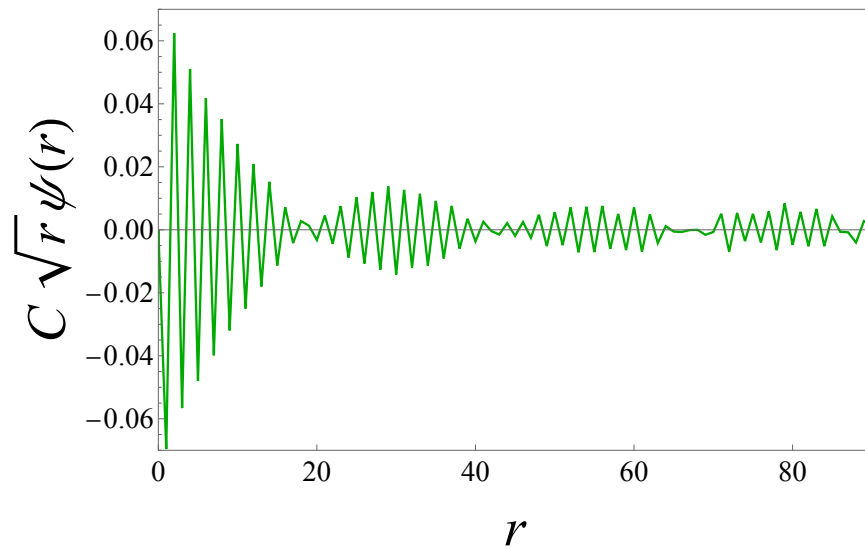


Figura 3-7: Función de onda $\sqrt{r}\psi(r)$ hasta una constante de normalización C , para $\chi = 0,2$ y $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0,5t$.

el cual es proporcional a r , $\sqrt{r}\psi(r)$ para el problema de Cooper estudiado, fijando $\chi = 0,2$ y $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0,5t$, se muestra un un corte en una dirección de la función de onda del par. Es posible apreciar que la función de onda tiene un decaimiento que no es exponencial, tal como lo predice la teoría original postulada por Cooper. La función de onda tiene un alcance mucho mayor al de la constante de red a , y conforme la magnitud de χ se incrementa, la función de onda se localiza cerca del centro.

3.3. Estados Ligados de Moléculas

Por otra parte, se puede estudiar la existencia de estados ligados con decaimiento exponencial en la red cuadrada, estos estados ligados dan lugar a la formación de dímeros compuestos por dos moléculas y es posible comparar con el estado *ligado* de Cooper. Para determinar la energía a la cual se forman dímeros, se usa un método variacional estándar [6]. Para ello se propone que la función de onda de dos moléculas que describa al par ligado, con ello se calcula la energía en presencia de la red óptica como función de la interacción entre las moléculas en términos del parámetro χ para una separación de las capas $\lambda = 0,75a$. La propuesta variacional es el siguiente *ansatz* para la función de onda de dos cuerpos,

$$\Phi_B(\vec{x}_A, \vec{x}_B) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}\psi(\vec{r}), \quad (3.10)$$

con $\psi(\vec{r}) = Ae^{-\gamma r}$, siendo γ un parámetro variacional y A una constante de normalización. \vec{K} es nuevamente el vector de centro de masa recíproco en la primera zona de Brillouin. Como es estándar, se resuelve la ecuación $H\Phi(\vec{x}_A, \vec{x}_B) = E_B\Phi(\vec{x}_A, \vec{x}_B)$ para redes del tamaño $N_x = N_y = 250$ sitios. En Fig. (3-9) se grafica la energía como función de χ . Como se puede apreciar en la figura, la función de onda de prueba no permite la formación de pares ligados para valores arbitrarios de χ . Las soluciones se forman a partir de un valor dado de χ dado por $\chi \approx 0,51$, para valores de χ menores que dicha cantidad, la energía de ligadura es menor que la energía del par de Cooper, esto significa que es energéticamente favorable la formación de pares de Cooper en

lugar de estados ligados con decaimiento exponencial. Cuando $\chi > 0,51$ la energía del par ligado es apreciablemente distinta de cero, lo cual indica que el estado de mínima energía es el estado ligado.

En la figura interior se muestra la energía de ligadura E_B como función de K_x for $\chi = 0,6; 0,8; 1,0$. Por simetría los resultados para E_B como función de K_y son idénticos. Como se muestra en la figura (3-9), la formación de pares ligados se da con un momento de centro de masa de $\vec{K} = 0$.

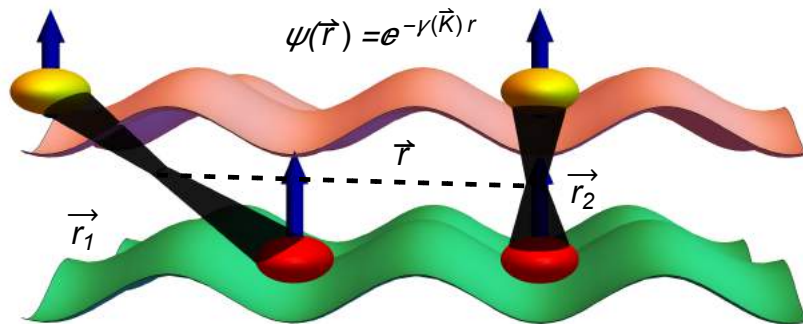


Figura 3-8: El esquema de la formación de dímeros moleculares.

Se presenta también la solución de la ecuación Eq. (3.8) sin las constricciones del mar de Fermi. Este procedimiento provee la energía del estado ligado pero no da información alguna de la función de onda del par. En contraste con el método variacional, la energía del estado ligado es siempre distinta de cero, para valores de $\chi < 0,51$ dicha energía es difícil de encontrar pues es cercana a cero, y aumenta para valores $\chi > 0,51$ en concordancia con el método variacional. La energía del estado ligado usando Eq. (3.8) se grafica en Fig. (3-9) en círculos. Como se muestra en la figura, para interacciones débiles, en *ansatz* (3.10) es una buena aproximación para encontrar la energía para el problema de dos cuerpos.

3.4. Dispersión de moléculas ligadas.

Finalmente, se presenta el estudio del problema de la dispersión elástica de los estados ligados, esto es, la dispersión de dímeros compuestos por dos moléculas. En la

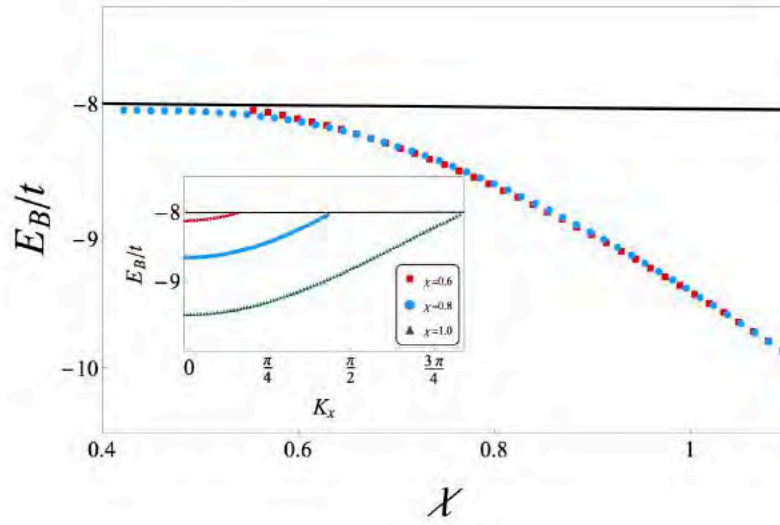


Figura 3-9: Energía del estado ligado E_B como función de χ . Se muestra la solución obtenida a través del método variacional propuesto (cuadrados). Mientras la solución a la ecuación de Fredholm (3.8) en ausencia del mar de Fermi (círculos). En el recuadro inferior se muestra la energía E_B como función del centro de masa en la dirección K_x para valores de $\chi = 0,6; 0,8; 1,0$. La línea sólida en $-8t$ indica la mínima energía de un par de fermiones libres en presencia de la red óptica.

Fig. (3-8) se muestra el esquema de los pares ligados donde a diferencia del estado de Cooper, el estado de dímero tiene un decaimiento exponencial. Las etiquetas 1, 2, 3 y 4 etiquetan a las moléculas. Se asume en este problema que los dímeros forman una mancuerna rígida, es decir, no tienen modos vibracionales. Estos tienen una energía de ligadura E_B y función de onda $\phi_B(\vec{x}_A, \vec{x}_B)$. La mancuerna rígida tunelea de forma rígida es decir manteniendo las distancias \vec{r}_1 y \vec{r}_2 fijas. El Hamiltoniano de cuatro cuerpos de dicho sistema es,

$$H = \sum_{s=1}^4 \hat{T}_s + \hat{V}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) + \hat{V}(\vec{x}_3, \vec{x}_4) + \hat{V}(\vec{x}_1, \vec{x}_4) + \hat{V}(\vec{x}_3, \vec{x}_2), \quad (3.11)$$

donde el operador \hat{T}_i contiene la información de la energía cinética y el confinamiento por el potencial óptico. Buscamos soluciones de la forma $\hat{H}\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \vec{x}_4) = E\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \vec{x}_4)$. Nuevamente es útil cambiar de sistema de coordenadas al sistema

centro de masa y coordenadas relativas \vec{x}_i , $i = 1, \dots, 4$, de la siguiente manera,

$$\vec{r}_1 = \vec{x}_1 - \vec{x}_2, \quad \vec{r}_2 = \vec{x}_3 - \vec{x}_4, \quad \vec{r} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2, \quad \vec{R} = \frac{\vec{R}_1 + \vec{R}_2}{2}, \quad (3.12)$$

donde $\vec{R}_1 = (\vec{x}_1 + \vec{x}_2)/2$ and $\vec{R}_2 = (\vec{x}_3 + \vec{x}_4)/2$. La función de onda ϕ es simétrica con respecto a la permutación de los dímeros y antisimétrica con respecto a la permutación de moléculas en la misma red óptica. Del mismo modo que en el problema de Cooper es conveniente expresar la ecuación de Schrödinger en términos de las coordenadas \vec{R}_i and \vec{r}_i , considerando tunelaje sólo a primeros vecinos. El término ideal en este caso es,

$$\begin{aligned} & \sum_{s=1}^4 \hat{T}_s \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}, \vec{R}) = \\ & = -J \sum_{i=x,y} \phi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r} \pm \vec{\delta}_i, \vec{R} \pm \frac{\vec{\delta}_i}{2}\right) + \phi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r} \mp \vec{\delta}_i, \vec{R} \pm \frac{\vec{\delta}_i}{2}\right), \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde J es el coeficiente de tunelaje de las moléculas dimerizadas $J = \frac{t}{2}$. Dado que la interacción es central, independiente de \vec{R} , buscamos soluciones de la forma $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}, \vec{R}) = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}) U_{\vec{K}}(\vec{R}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}}$, donde \vec{K} es un vector recíproco en la primera zona de Brillouin correspondiente al centro de masa del sistema de cuatro cuerpos, y $U_{\vec{K}}(\vec{R})$ una función periódica de periodo de la mitad de la constante de red. Esto permite obtener la ecuación para la función de onda Φ después de multiplicar por $U_{\vec{K}}^*(\vec{R})$ y sumar sobre los vectores \vec{R} , esta ecuación resulta,

$$\begin{aligned} & E\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}) = \\ & = -2J \sum_{i=x,y} \cos\left(\frac{K_i a}{2}\right) \left(\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r} \pm \vec{\delta}_i) + \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r} \mp \vec{\delta}_i)\right) \\ & + (V(r_1) + V(r_2)) \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}) \\ & + \left(V\left(\left|\vec{r} + \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right|\right) + V\left(\left|\vec{r} - \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right|\right)\right) \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dentro del régimen BEC, donde la función de onda de cada par esta localizada es posible desacoplar la solución de la forma $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}) \approx \psi(r_1)\psi(r_2)\varphi(\vec{r})$, donde $\psi(r_1)$ y $\psi(r_2)$ son funciones de onda variacionales que se obtienen de la sección previa. Además es posible escribir $\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$. Después de sumar sobre las coordenadas \vec{r}_1 y \vec{r}_2 , se obtiene la ecuación para $\varphi_{\vec{q}}$,

$$E\varphi_{\vec{q}} = 2 \left[\xi_B - 4J \sum_{i=x,y} \cos\left(\frac{K_i a}{2}\right) \cos(q_i a) \right] \varphi_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}'} \varphi_{\vec{q}'} V_{eff}(\vec{q} - \vec{q}'), \quad (3.15)$$

donde $\xi_B = E_B + 8t$ y el potencial efectivo de la interacción esta dado por

$$V_{eff}(\vec{q} - \vec{q}') = \sum_{\vec{r}_1, \vec{r}_2} V(\vec{q} - \vec{q}') \cos\left((\vec{q} - \vec{q}') \cdot \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right) \psi^2(r_1)\psi^2(r_2). \quad (3.16)$$

Este potencial efectivo resulta de la interacción entre las moléculas de distintos dímeros. Si la suma sobre \vec{r}_1 y \vec{r}_2 se puede reemplazar por una integral, entonces es posible encontrar una expresión cerrada para el potencial efectivo. Esta es la expresión que determina la interacción efectiva entre dos dímeros. Cuando la suma sobre las coordenadas discretas \vec{r}_1 y \vec{r}_2 es reemplazada por una integral, es posible determinar de forma cerrada la forma del potencial efectivo

$$V_{eff}(\vec{q} - \vec{q}') = 2 \frac{V(\vec{q} - \vec{q}')}{\left(\left|\frac{\vec{q} - \vec{q}'}{4\gamma(x)}\right|^2 + 1\right)^3}.$$

Esta expresión indica que la interacción efectiva entre los dímeros es apantallada por un factor de $f(|\vec{q} - \vec{q}'|) = f(k)$ donde

$$f(k) = \frac{2}{\left(\frac{k^2}{4\gamma(x)} + 1\right)^3}.$$

En la Figura: (3-10) se grafica $f(k)$ como función de k , en azul y rojo se muestra el valor correspondiente si $f(k)$ se obtiene de la suma o si esta es reemplazada por la in-

tegral respectivamente. Este resultado esta en acuerdo con el resultado bien conocido para interacciones de contacto en 3D para sistemas homogéneos [97] donde la interacción efectiva entre los dímeros formados por los átomos cambia de $2a$ a $0,6a$, siendo a la longitud de dispersión correspondiente a onda- s . Este estudio permite obtener el

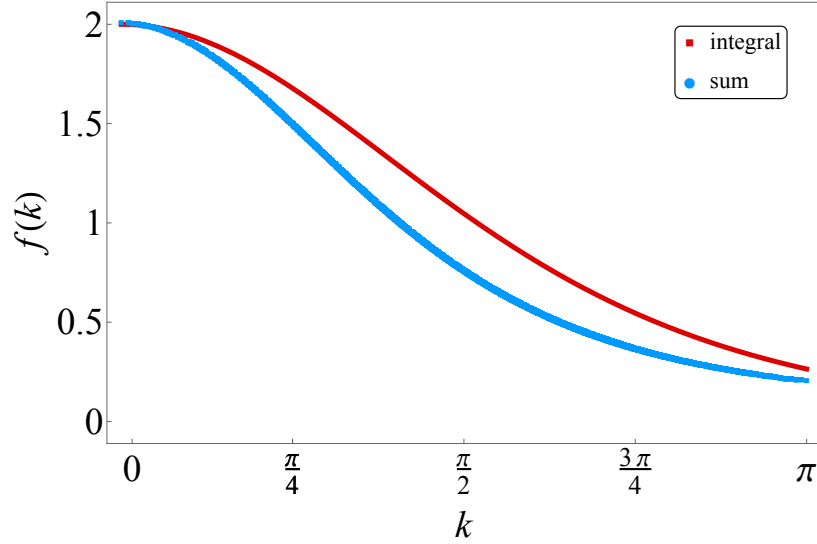


Figura 3-10: Se grafica la función $f(k)$ como función de k , tanto en términos de la suma como en el límite integral. Se observa que el potencial efectivo es apantallado

Hamiltoniano de muchos cuerpos para los dímeros en la red óptica bidimensional,

$$\hat{H}_d = \sum_{\vec{k}} (\epsilon_d(\vec{k}) - \mu) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} V_{eff}(\vec{k} - \vec{k}') c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{q}-\vec{k}}^\dagger c_{\vec{q}-\vec{k}'} c_{\vec{k}'}, \quad (3.17)$$

donde $\epsilon_d(\vec{k}) = \xi_B - 2J \sum_{i=x,y} \cos(k_i a)$, y el subíndice d hace explícito el hecho de que ahora el término de partícula individual se refiere a que las partículas de Bose, son dímeros formados por pares de moléculas [65, 66].

3.5. Conclusiones

En este capítulo se muestra el problema de Cooper, los estados moleculares ligados y la formación de dímeros en un gas dipolar de moléculas de Fermi confinado en una

bicapa de redes ópticas cuadradas bidimensionales. Se encontró la influencia de la interacción dipolar de alcance finito así como los efectos de la red óptica tanto en la formación de pares de Cooper, como en los estados ligados así como en la formación de dímeros y en la dispersión elástica dímero-dímero. Los cálculos se hicieron para redes ópticas cuadradas del tamaño de $N_x = N_y = 5 \times 10^2$. Para el problema de Cooper se mostró que si hay balance en las energías de Fermi, entonces el par de Cooper se forma con momento del centro de masa cero. En cambio el desbalance en las energías de Fermi favorece formación de pares de Cooper con momento de centro de masa no nulo, siendo el predecesor esta solución de los estados FFLO. Se estudió la formación de dímeros de moléculas mediante un método variacional así como el la solución a la ecuación de Fredholm y usando este resultado es posible estudiar el problema de cuatro cuerpos que da lugar a la dimerización y provee de un Hamiltoniano para la región de BEC donde se forman partículas bosónicas. Respecto a la plausibilidad de este sistema experimental, recientemente se ha demostrado tanto teóricamente como experimentalmente que es posible conseguir configuraciones similares a la propuesta tanto para bosones como para fermiones, tanto en el control de las moléculas, como en la geometría propuesta [45, 49, 50, 52–60].

Estos resultados junto a la gran maleabilidad experimental reciente provén un modelo específico para estudiar desde el enfoque de dos cuerpos el cruce BEC-BCS. Además representa la base para el estudio del problema de muchos cuerpos que se presenta a continuación, primero haciendo énfasis en el problema de la superfluidez, Capítulo (4), para concluir con el problema más general que incluye inestabilidades de ondas de densidad que pueden dar lugar al estado supersólido que se estudiarán en el Capítulo (5).

Capítulo 4

Gas dipolar de Fermi: Superfluido

El estudio del problema de la formación de pares de Cooper y estados ligados presentados en la sección previa, motivan para la investigación acerca de la formación de estados superfluidos en el modelo, considerando el enfoque de muchos cuerpos. Estados superfluidos en bicapas han sido estudiados con ausencia de la red óptica [106, 141–144], en bicapas de redes ópticas con interacción de contacto [104, 111], y recientemente el gas dipolar de Fermi en bicapa [105, 117]. Para sistemas bosónicos ha sido también ampliamente estudiado el sistema de moléculas con interacciones dipolares [102, 145, 146]. Los resultados originales del presente capítulo se encuentran reportados en [105].

El presente capítulo se estructura de la siguiente manera, en la sección Modelo, se describe el modelo a estudiar, presentando el Hamiltoniano, así como las técnicas empleadas para describir a la fase superfluida. En la sección Temperatura Crítica (4.2), se determina numéricamente la temperatura de transición al estado superfluido, mientras que en la sección de Ginzburg-Landau (4.3) se presenta la teoría de Ginzburg-Landau abreviada al principio de esta tesis aplicada a nuestro sistema, dicho tratamiento permite en la sección Densidad del Superfluido (4.4) caracterizar al superfluido a través de su densidad. Debido a la dimensionalidad del sistema, contrastamos los resultados con la predicción de la teoría de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) (4.5).

4.1. Modelo

El Hamiltoniano de muchos cuerpos es

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha=A,B} \int d^2r \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) H_0(\vec{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) + \\ & + \frac{1}{2} \int \int d^2r d^2r' \hat{\Psi}_A^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_B^\dagger(\vec{r}') V_{dip}^{AB}(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}_B(\vec{r}') \hat{\Psi}_A(\vec{r}), \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde $H_0(\vec{r})$ es el término ideal que contiene la energía cinética y la energía potencial de la red óptica bidimensional $V_{latt}(\vec{r}) = V_0 (\sin^2(x\pi/a) + \sin^2(y\pi/a))$. Los operadores de campo están definidos como $\hat{\Psi}_A(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \hat{a}_{\vec{k}}$ y $\hat{\Psi}_B(\vec{r}') = \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}') \hat{b}_{\vec{k}}$ donde los campos obedecen las reglas de anticonmutación estándar para fermiones. La relación de dispersión para el gas ideal de Fermi dentro de la aproximación de amarre fuerte es nuevamente $\epsilon_{\vec{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$, donde t es como antes el coeficiente de tunelaje a primeros vecinos. Recordamos que en los experimentos típicos de gases ultrafríos, estos se realizan en presencia de un confinamiento armónico aunado al potencial óptico. En este capítulo se desprecia este efecto y se estudia el sistema sin la trampa armónica. En el siguiente capítulo (5), se incluirán tanto los efectos de la trampa armónica como la interacción intraplanar.

El Hamiltoniano escrito en segunda cuantización en el espacio de momentos es,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\vec{k}} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) (\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}}) \\ & + \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} V_{dip}^{AB}(\vec{k} - \vec{k}') \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{q}-\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{q}-\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}'}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde $V_{dip}^{AB}(\vec{k} - \vec{k}')$ es la transformada de Fourier de $V_{dip}^{AB}(\vec{r} - \vec{r}')$ y $\Omega = N_x \times N_y$, con N_x y N_y el número de sitios en las direcciones x e y respectivamente. El potencial químico toma en cuenta la conservación de número de moléculas. Recalcamos un par de diferencias con el sistema homogéneo, por ejemplo, en el caso homogéneo donde no hay red óptica, el potencial interplanar satisface $V_{dip}^{AB}(\vec{k} = 0) = 0$ para cualquier valor de Λ y χ , mientras que la red óptica permite que $V_{dip}^{AB}(\vec{k})$ sea distinta de cero cuando

$\vec{k} = 0$, por ejemplo para $\Lambda = 0,75$, $V_{dip}^{AB}(\vec{k} = 0) \approx -2,62\chi$, mientras que $\Lambda = 0,5$, $V_{dip}^{AB}(\vec{k} = 0) \approx -10,84\chi$. Y como se mostró en la sección previa, la presencia de la red óptica juega un papel importante en el problema de la dispersión, la formación de pares, y el cruce BEC-BCS [101].

Es interesante notar que el modelo propuesto puede ser mapeado a un sistema de fermiones en dos estados hiperfinos confinados en una red óptica con una interacción peculiar, es decir, los fermiones en las capas A y B pueden ser vistos como fermiones en una sola capa etiquetando por estados de espín \uparrow and \downarrow , con una interacción dada por $V_{dip}^{AB}(r)$ Eq.(3.3).

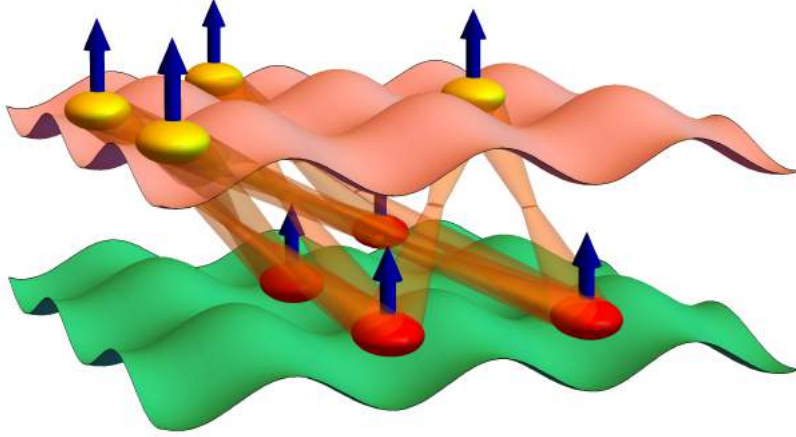


Figura 4-1: Formación de pares de Cooper.

Para describir los estados superfluidos usamos las técnicas de teoría cuántica de campo con funcionales integrales, explicadas en la introducción. La acción para el Hamiltoniano ideal esta dada por

$$S_0 = \sum_k \phi^\dagger(k) \cdot [i\hbar\omega_n \mathbb{1} - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)\sigma_z] \cdot \phi(k), \quad (4.3)$$

donde por simplicidad se abrevia, $k = (\vec{k}, \omega_n)$, y $\phi = (\phi_A^*(k), \phi_B(k))^\dagger$ con ϕ_α los números fermiónicos de Grassmann, I es la matriz identidad de 2×2 , mientras las frecuencias de Matsubara son $\hbar\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, con $\beta = 1/k_B T$. σ_α ($\alpha = x, y, z$) son las matrices de Pauli. Para escribir la acción asociada con la interacción y describir

apropiadamente el estado superfluido, se introduce la transformación de Hubbard-Stratonovich y un nuevo campo bosónico Δ , con el fin de desacoplar el término cuártico de la interacción en la acción fermiónica

$$\langle \Delta(\vec{k}) \rangle = - \sum_{\vec{k}'} V_{dip}^{AB}(\vec{k} - \vec{k}') \langle \phi_{A,-\vec{k}'} \phi_{B,\vec{k}'} \rangle, \quad (4.4)$$

este campo aniquila pares de partículas con momentos opuestos en capas distintas A y B . En términos de los campos ϕ and Δ , la nueva acción se escribe como

$$\begin{aligned} S[\phi, \Delta] &= \sum_{k,q} \Phi^\dagger(k, q) \cdot (i\hbar\omega_n \mathbb{1} - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)\sigma_z + \Delta(k, q)\sigma_x) \cdot \Phi(k, q) \\ &\quad - \frac{1}{\Omega} \sum_{k,k',q} \Delta(q, k) (V_{dip}^{AB}(\vec{k} - \vec{k}'))^{-1} \Delta(q, k'), \end{aligned} \quad (4.5)$$

donde $\Phi(k, q) = (\phi_{A,k}^*, \phi_{B,q-k})^\dagger$. El efecto de la transformación de Hubbard-Stratonovich es de convertir la acción cuadrática en los campos fermiónicos. Esto permite eliminar los grados de libertad fermiónicos y escribir una nueva acción efectiva en términos del campo auxiliar Δ .

$$S_{eff}[\Delta] = \sum_{\vec{k},q} \text{Tr} \ln (\mathbb{G}_\Delta^{-1}) - \frac{1}{\Omega} \sum_{k,k',q} \Delta(q, k) (V_{dip}^{AB}(\vec{k} - \vec{k}'))^{-1} \Delta(q, k'), \quad (4.6)$$

con $\mathbb{G}_\Delta^{-1} = (i\hbar\omega_n \mathbb{1} - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)\sigma_z + \Delta(k, q)\sigma_x)$.

De esta ecuación es posible, usando teoría de perturbaciones alrededor del valor de expectación del campo Δ , obtener la ecuación para la temperatura crítica, así como del parámetro de orden de la brecha,

$$\Delta_0(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}'} V_{dip}^{AB}(\vec{k} - \vec{k}') \frac{\Delta_0(\vec{k}') \tanh(\beta\xi_{\vec{k}'}/2)}{2\xi_{\vec{k}'}}, \quad (4.7)$$

donde $\xi_{\vec{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2 + \Delta_0(\vec{k})^2}$. Para el caso en el que $q = 0$, considerando sólo dispersión en onda s , es decir $\Delta_0(\vec{k} = 0)$, presentamos a continuación la termodinámica del sistema en el enfoque original de la teoría de BCS, en otras palabras, se estudian las propiedades termodinámicas que caracterizan al superfluido dentro del

esquema BCS. Este parámetro de orden Δ_0 es el responsable de la superfluidez del sistema, y como se esquematiza en la figura (4-1) se debe a la aparición de un estado macroscópico coherente de pares de Cooper.

4.2. Temperatura Crítica

Dentro del esquema estudiado, la superfluidez tipo BCS es formada para valores arbitrarios de los parámetros que definen el modelo. Sin embargo, para interacciones fuertes, estados ligados de moléculas pueden ser formados como en el caso homogéneo [142], esto es, el potencial intermolecular de interacción $V_{dip}^{AB}(\vec{r})$ puede dar lugar a estados ligados. Para determinar la temperatura crítica como función de los paráme-

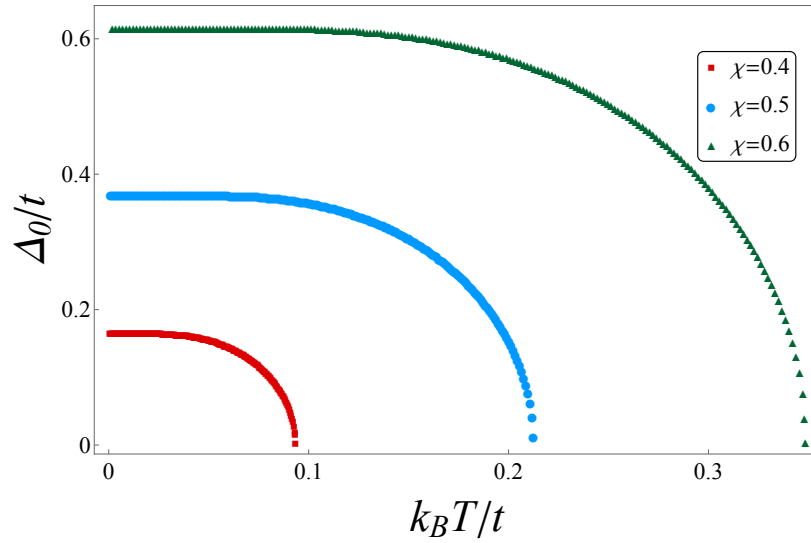


Figura 4-2: Brecha de energía como función de la temperatura para $\Lambda = 0,75$ y $\mu = 0,825t$.

tros del sistema se resuelve la ecuación Eq. (4.7) para $\mu = 0,825t$ en la aproximación de onda-s. En este caso, los cálculos se realizaron para $N_x = N_y = 140$, sumando sobre los vectores en la primera zona de Brillouin ($-\frac{\pi}{a} \leq k_x, k_y \leq \frac{\pi}{a}$), se verificó numéricamente que los resultados fuesen independientes del tamaño de las redes ópticas. En la figura Fig. (4-2) se grafica el parámetro de orden Δ como función de la temperatura para distintos valores de χ con $\Lambda = 0,75$. Se observa que dicha transi-

ción es de segundo orden, pues el parámetro de orden es una función continua de la temperatura sin embargo, la derivada de dicho parámetro es discontinua en el punto crítico. En Fig. (4-3) se grafica la dependencia de la temperatura crítica como función de la interacción χ para distintos valores de Λ . Se observa que la temperatura crítica crece indefinidamente como función de la interacción χ de la misma manera que en (2-8).

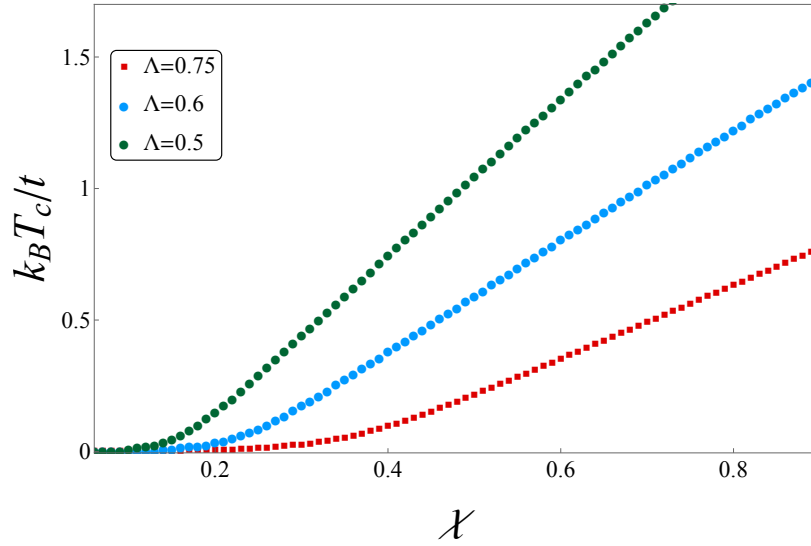


Figura 4-3: Temperatura crítica como función de la intensidad de la interacción χ para distintos valores de la separación interplanar $\Lambda = 0,5; 0,6; 0,75$.

4.3. Ginzburg-Landau

Para conectar la termodinámica de la transición de fase en el marco de la teoría de Ginzburg-Landau con la acción efectiva microscópica, se desarrolla la acción efectiva de la Eq. (4.6) en términos del campo bosónico Δ alrededor de la transición de fase [73].

$$S_{eff}[\Delta, \Delta^*] = \hbar\beta F_L(\Delta). \quad (4.8)$$

Es conveniente escribir,

$$\mathbb{G}_\Delta^{-1}(k, q) = \mathbb{G}_0^{-1}(k) + \Sigma_\Delta(k, q),$$

donde

$$\mathbb{G}_0^{-1}(k) = i\hbar\omega_n \mathbb{1} + \sigma_z(\epsilon_k - \mu),$$

y

$$\Sigma_\Delta(k, q) = \sigma_x \Delta(k, q),$$

entonces

$$\mathbb{G}_\Delta^{-1}(k, q) = \mathbb{G}_0^{-1}(k)(\mathbb{1} + \mathbb{G}_0(k)\Sigma_\Delta(k, q)).$$

De la expansión

$$\ln \mathbb{G}^{-1}(k, q) = \ln \mathbb{G}_0^{-1}(k) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} (\mathbb{G}_0(k)\Sigma_\Delta(k, q))^m,$$

se reconoce que las potencias impares no contribuyen a la traza de $\mathbb{G}_0\Sigma$, mientras las potencias pares dan

$$(\mathbb{G}_0\Sigma_\Delta)^{2m} = \mathbb{1}|\Delta(k)|^{2m} (G_{11}^0 G_{22}^0)^m,$$

siendo $G_{11}^0 = (-i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu))^{-1}$ y $G_{22}^0 = (-i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu))^{-1}$.

Como es usual en la teoría de Ginzburg-Landau, cerca de la transición de fase, el parámetro de orden es pequeño y es posible truncar la expansión a cuarto orden. Este procedimiento da los coeficientes de la energía libre de Ginzburg-Landau

$$F = a(T)\Delta^2 + b(T)\Delta^4.$$

El coeficiente $a(T)$ contiene la misma información que la Eq. (4.7) y establece la temperatura crítica. Mientras el coeficiente $b(T)$ proporciona la estabilidad del sistema, es fácil mostrar que $b(T)$ es proporcional a la densidad de estados $b(T) \propto \nu/T^3$, siendo ν la densidad de estados. La forma explícita de $b(T)$ es

$$b(T) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \left(-\beta \frac{\text{sech}^2 \frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)\beta}{2}}{8(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2} + \frac{1}{4} \frac{\tanh \frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)\beta}{2}}{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^3} \right). \quad (4.9)$$

Es importante enfatizar que la expresión para $b(T)$ parece ser independiente de la red óptica bidimensional, así como del potencial intermolecular. Sin embargo su influencia esta contenida en la temperatura crítica T_c , que como se mostró previamente, depende de los parámetros que definen el potencial dipolar, i.e. depende tanto de χ como de Λ , así como de la red óptica. En la figura (4-4) se grafica el coeficiente $b(T, \mu) = \frac{b(T)}{(k_B T)^3}$ para distintos valores del potencial químico μ , dicho coeficiente es siempre positivo para cualquier valor de μ y T , esto permite usar consistentemente la teoría de Ginzburg-Landau pues la fase superfluida es estable termodinámicamente. Para tamaños finitos de redes ópticas se aprecia un pico en la función $b(T, \mu)$ en $\mu = 0$, dicho pico en el límite termodiámico corresponde a una divergencia logarítmica de la densidad de estados. La divergencia logarítmica en la densidad de estados se debe a

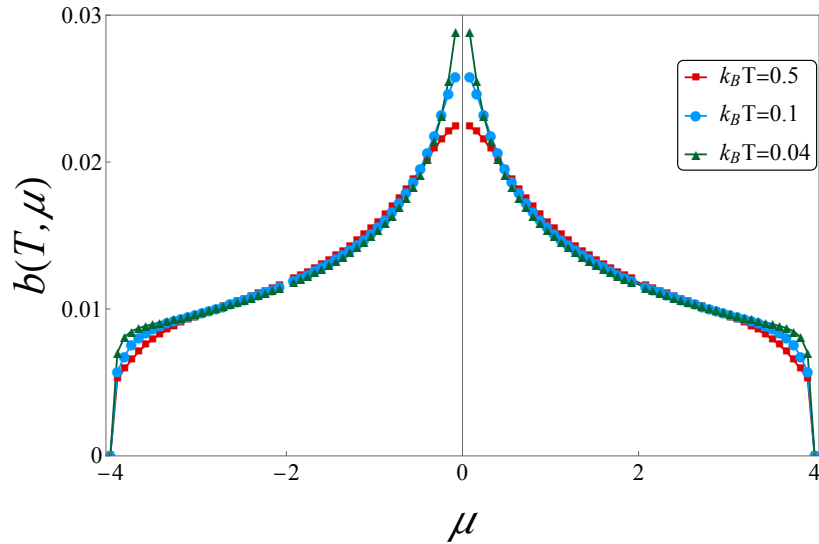


Figura 4-4: Coeficiente $b(T, \mu)$ de la red óptica. Consistentemente con la teoría de Ginzburg-Landau es siempre positivo.

las superficies de Fermi que define la relación de dispersión ideal. Cerca de la fracción de llenado medio, cuando $\mu = \epsilon_F = 0$, la superficie de Fermi cambia de ser abierta a cerrada, este es un efecto de la dimensionalidad del sistema, y hace que la densidad

de estados exhiba esta singularidad.

4.4. Densidad del Superfluido

Basados en la teoría de Ginzburg-Landau y la descripción del superfluido de Landau, la hidrodinámica del sistema esta conformada por dos términos, el primero concerniente a la parte normal del fluido; que fluye con viscosidad, además de una componente superfluida, la cual no disipa energía. En el esquema original descrito por Landau, la densidad del superfluido es un escalar, sin embargo, para sistemas inhomogéneos, la densidad del superfluido es un tensor, en principio anisotrópico. A continuación describiremos la idea básica del tensor de la densidad del superfluido.

La idea es separar las componentes normal y superfluida del sistema, esto se consigue haciendo explícita la dependencia de la velocidad del superfluido en el Hamiltoniano, lo cual en principio se consigue a través de la fase en el parámetro de orden

$$\Delta = \Delta_0 e^{i\Theta_{\vec{r}} \cdot \vec{R}}. \quad (4.10)$$

No obstante, debido a la simetría del sistema, el Hamiltoniano es invariante ante transformaciones de norma (4.10), por lo cual es necesario hacer la transformación de norma en los operadores de campo

$$\begin{aligned} \hat{a}_i &\rightarrow \hat{a}_i e^{i\Theta_i} \\ \hat{b}_i &\rightarrow \hat{b}_i e^{i\Theta_i}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

donde los operadores están escritos en la base de sitio. Por lo tanto, el Hamiltoniano escrito en la base de sitios

$$\hat{H} = - \sum_{\vec{i}, \vec{j}} t_{\vec{i}, \vec{j}} (\hat{a}_{\vec{i}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}} + \hat{b}_{\vec{i}}^\dagger \hat{b}_{\vec{j}} + h.c.) + \sum_{\vec{i}, \vec{j}} V_{\vec{i}, \vec{j}} \hat{a}_{\vec{i}}^\dagger \hat{b}_{\vec{j}}^\dagger \hat{b}_{\vec{j}} \hat{a}_{\vec{i}} - \mu \sum_{\vec{i}} (\hat{a}_{\vec{i}}^\dagger \hat{a}_{\vec{i}} + \hat{b}_{\vec{i}}^\dagger \hat{b}_{\vec{i}}), \quad (4.12)$$

se transforma en un Hamiltoniano con dependencia explícita en la fase H_Θ , donde el

término correspondiente a la parte ideal es,

$$\begin{aligned}
H_0^\Theta &= - \sum_{\vec{j}} t_x \left(\hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}+\vec{\delta x}} e^{i\Theta_x} + \hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}-\vec{\delta x}} e^{-i\Theta_x} \right) \\
&+ t_y \left(\hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}+\vec{\delta y}} e^{i\Theta_y} + \hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}-\vec{\delta y}} e^{-i\Theta_y} \right), \tag{4.13}
\end{aligned}$$

donde los desplazamientos por una unidad en la red óptica están denotados por $\vec{\delta x} = (\delta x, 0)$ y $\vec{\delta y} = (0, \delta y)$. Por otra parte, el término de la interacción es invariante ante esta transformación. Asumiendo que la velocidad del superfluido es pequeña, se hace un desarrollo para la contribución de la fase del parámetro de orden,

$$e^{i\pm\Theta_{x,y}} \approx 1 \pm i\Theta_{x,y} - \frac{\Theta_{x,y}^2}{2}, \tag{4.14}$$

con ello el Hamiltoniano rotado es a segundo orden en Θ

$$\begin{aligned}
H_0^\Theta &= - \sum_{\vec{j}} t_x \left(\hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}+\vec{\delta x}} \left(1 + i\Theta_x - \frac{\Theta_x^2}{2}\right) + \hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}-\vec{\delta x}} \left(1 - i\Theta_x - \frac{\Theta_x^2}{2}\right) \right) \\
&- \sum_{\vec{j}} t_y \left(\hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}+\vec{\delta y}} \left(1 + i\Theta_y - \frac{\Theta_y^2}{2}\right) + \hat{a}_{\vec{j}}^\dagger \hat{a}_{\vec{j}-\vec{\delta y}} \left(1 - i\Theta_y - \frac{\Theta_y^2}{2}\right) \right). \tag{4.15}
\end{aligned}$$

En la base \vec{k} el Hamiltoniano rotado se escribe como

$$H_\Theta = H_0 + \sum_{\gamma=x,y} \sum_{\vec{k}} 2t \left(\Theta_\gamma \sin(k_\gamma a) + \frac{\Theta_\gamma^2}{2} \cos(k_\gamma a) \right) (\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}}) + H_I \tag{4.16}$$

Es conveniente abreviar los términos en el Hamiltoniano,

$$\begin{aligned}
h_{1,\gamma} &= \frac{1}{2N_\gamma} \frac{d^2 \epsilon_{\vec{k}}}{d(k_\gamma a)^2} \\
h_{2,\gamma} &= \frac{1}{N_\gamma} \frac{d \epsilon_{\vec{k}}}{d(k_\gamma a)},
\end{aligned}$$

el Hamiltoniano rotado se escribe de forma compacta

$$\begin{aligned}\hat{H}_\Theta &= \hat{H}_0 + \sum_{\vec{k}} (\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}}) \sum_{\alpha=x,y} \left(\Theta_\alpha \frac{\partial \epsilon_{\vec{k}}}{\partial (k_\alpha a)} + \frac{\Theta_\alpha^2}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\vec{k}}}{\partial (k_\alpha a)^2} \right) \\ &\quad + \hat{H}_I.\end{aligned}\tag{4.17}$$

La acción en términos del parámetro de orden Δ y la fase Θ resulta

$$\begin{aligned}S(\phi, \Delta) &= \frac{1}{\beta} \sum_{k,q} \sum_{\gamma=x,y} \Phi^*(k) \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) + f(\Theta) & \Delta(k, q) \\ \Delta(k, q) & i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) - f(\Theta) \end{pmatrix} \Phi(k, q) \\ &\quad - \Delta(k, q) V^{-1}(\vec{k} - \vec{k}') \Delta(k', q),\end{aligned}\tag{4.18}$$

bajo la definición de $f(\Theta) = \Theta_\gamma h_{1\gamma} + \Theta^2 h_{2,\gamma}$. En el mismo esquema que en la teoría BCS, se hace un desarrollo perturbativo ahora en potencias de Θ , separando las partes dependientes e independientes de Θ , es decir

$$\mathbb{G}^{-1} = \mathbb{G}^{-1}(\Theta = 0)(1 + \mathbb{G}(\Theta = 0)\Sigma_\Theta),$$

donde,

$$\begin{aligned}\hbar\mathbb{G}^{-1}(\Theta = 0) &= \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) & \Delta(k, q) \\ \Delta(k, q) & i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) \end{pmatrix} \\ \Sigma_\Theta &= \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} \Theta_\gamma h_{1\gamma} + \Theta^2 h_{2,\gamma} & 0 \\ 0 & -(\Theta_\gamma h_{1\gamma} + \Theta^2 h_{2,\gamma}) \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{4.19}$$

Conservando los términos cuadráticos en Θ , hasta segundo orden los términos de la traza son

$$\begin{aligned}\sum_{n,\vec{k}} \text{Tr}(\mathbb{G}(\Theta = 0)\Sigma_\Theta) &= - \sum_{\gamma,\vec{k}} h_{2,\gamma} \Theta_\gamma^2 \frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu}{\xi_{\vec{k}}} \beta \tanh(\beta \xi_{\vec{k}}/2) \\ \sum_{n,\vec{k}} \text{Tr}((\mathbb{G}(\Theta = 0)\Sigma_\Theta)^2) &= \\ \sum_{\gamma,\gamma',\vec{k}} h_{1,\gamma} h_{1,\gamma'} \beta^2 &\left(-\text{sech}^2(\beta \xi_{\vec{k}}/2) \frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2}{4\xi_{\vec{k}}^2} + \frac{\Delta^2}{2\beta \xi_{\vec{k}}^3} \tanh(\beta \xi_{\vec{k}}/2) \right)\end{aligned}\tag{4.20}$$

Esto permite concluir con una acción efectiva incluyendo la velocidad del superfluido

$$S_{ef} = \sum_{\vec{k}, \gamma} \hbar \frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu}{\xi_{\vec{k}}} h_{1, \gamma} \Theta_{\gamma}^2 \tanh(\beta \xi_{\vec{k}}/2) + \frac{1}{4} \sum_{\gamma'} \Theta_{\gamma} \Theta_{\gamma'} h_{2, \gamma} h_{2, \gamma'} (\beta^2 \operatorname{sech}^2(\beta \xi_{\vec{k}}/2) \frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2}{\xi_{\vec{k}}^2} + \frac{2\Delta_0^2}{\xi_{\vec{k}}^3} \tanh(\beta \xi_{\vec{k}}/2)).$$

A través de la acción efectiva, es posible obtener la energía libre de Ginzburg-Landau, la cual determina la fracción del fluido en estado superfluido [6]

$$\rho_{\alpha, \alpha'} = \lim_{\Theta \rightarrow 0} \frac{1}{Nt} \frac{F_{\Theta} - F_0}{\Theta_{\alpha} \Theta_{\alpha'}} = \frac{1}{Nt} \frac{\partial^2 F_{\Theta}}{\partial \Theta_{\alpha} \partial \Theta_{\alpha'}}, \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (4.21)$$

siendo F_0 y F_{Θ} las energías libres de Ginzburg-Landau de la fase normal y las fases superfluidas. La densidad superfluida $\rho_{\gamma, \gamma'}$

$$\rho_{\gamma, \gamma'} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \delta_{\gamma, \gamma'} \frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu}{\xi_{\vec{k}}} h_{1, \gamma} \tanh(\beta \xi_{\vec{k}}/2) + \frac{1}{4} h_{2, \gamma} h_{2, \gamma'} (\beta \operatorname{sech}^2(\beta \xi_{\vec{k}}/2) \frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2}{\xi_{\vec{k}}^2} + \frac{2\Delta_0^2}{\xi_{\vec{k}}^3} \tanh(\beta \xi_{\vec{k}}/2)) \quad (4.22)$$

Esta última expresión, suele simplificarse y es la forma usual que se encuentra en la literatura es,

$$\rho_{\gamma, \gamma'} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left(\delta_{\gamma, \gamma'} h_{1, \gamma} n_{\vec{k}} + \frac{1}{4} h_{2, \gamma} h_{2, \gamma'} Y_{\vec{k}} \right), \quad (4.23)$$

Donde $n_{\vec{k}}$ es el número de ocupación del estado \vec{k} y $Y_{\vec{k}} = \beta/4 \operatorname{sech}^2(\beta \xi_{\vec{k}})$ es la función de Yoshida, con $\xi_{\vec{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}$. Dado que los elementos fuera de la diagonal del tensor de densidad superfluida son pequeños, entonces la expresión final para la densidad superfluida es $\rho = (\rho_{xx} + \rho_{yy})/2$.

La figura (4-5) muestra la fracción de la densidad superfluida como función de la temperatura para distintos valores de la intensidad de la interacción. Normalizamos respecto al valor de la densidad superfluida a temperatura cero, denotado por ρ_0 . La densidad superfluida a temperatura cero en contraste con la situación homogénea es en general distinta de la unidad [100].

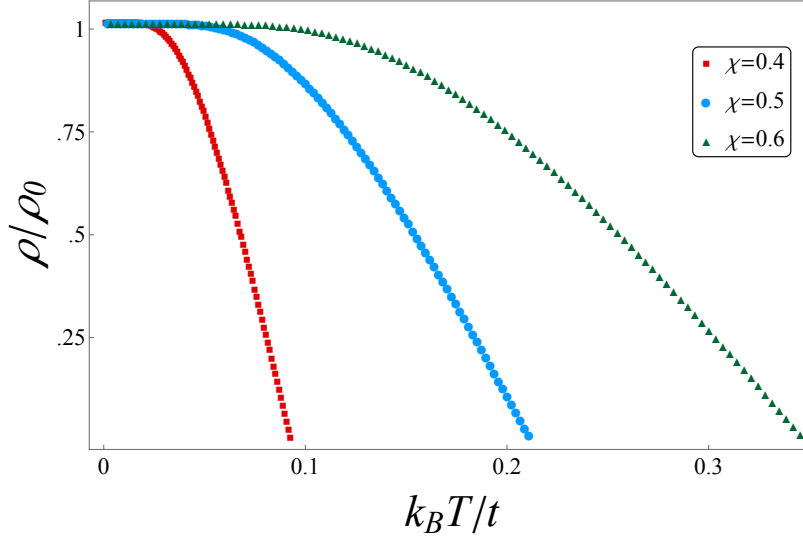


Figura 4-5: Densidad del superfluido para distintos valores de la interacción χ como función de la temperatura, manteniendo fijo $\Lambda = 0,75$.

4.5. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless

Debido al carácter bidimensional del sistema, las fluctuaciones térmicas destruyen cualquier orden convencional de largo alcance. Para sistemas magnéticos, Mermin y Wagner demostraron que no existe magnetización espontánea en sistemas bidimensionales, por otra parte Hohenberg demostró que el parámetro de orden superfluido para un gas de Bose es cero en dos dimensiones. Sin embargo la teoría de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) provee una definición alternativa de transiciones de fase para sistemas bidimensionales, en los cuales existe un orden topológico de largo alcance. La función de correlación de la densidad de dos puntos es finita en la transición, sin embargo por encima de cierta temperatura, presenta un decaimiento algebraico, mientras que por debajo de dicha temperatura el decaimiento es exponencial. La teoría BKT predice una densidad superfluida distinta de cero, y una temperatura crítica finita, además de ser termodinámicamente estable. Dicha temperatura crítica se obtiene a través de la expresión

$$k_B T_{BKT} = \frac{\pi}{4} J \quad (4.24)$$

donde $J = \rho t$ [87, 88, 147], siendo ρ la densidad superfluida obtenida en la sección previa. En esta sección se incluye la teoría de BKT resolviendo la ecuación (4.24), y se compara con la predicción de la teoría de BCS, que se conoce falla para interacciones fuertes χ , en los cuales, la predicción de la teoría BCS no corresponde a la temperatura crítica del superfluido.

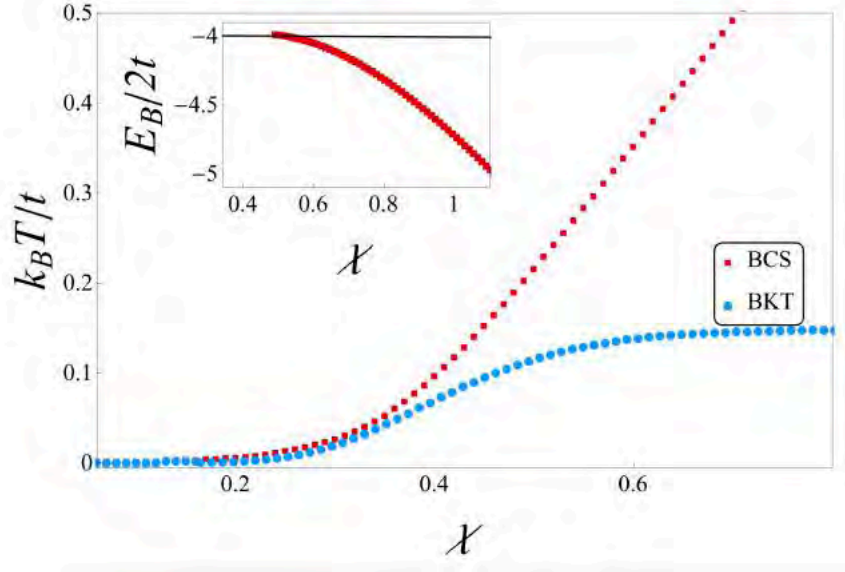


Figura 4-6: Temperatura crítica del modelo BCS T_c y la temperatura crítica de la transición de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless T_{BKT} como función de la interacción χ para $\Lambda = 0,75$. En el recuadro interior se muestra la energía de ligadura del problema de dos cuerpos en presencia de la red óptica.

En la Fig. (4-6) se muestra la temperatura crítica como función de la interacción para el esquema BCS y para la temperatura de BKT. Observamos que para el régimen de interacciones débiles, la temperatura de la teoría BKT T_{BKT} es cercana al modelo BCS T_{BCS} , mientras que la temperatura de BCS crece indefinidamente para interacciones fuertes, la temperatura de BKT tiende a un valor constante discrepando de la solución de BCS. La predicción de BCS falla cerca de $\chi \approx 0,45$. Más allá de este valor la temperatura de transición BCS no se puede entender como una temperatura a la cual se rompen los pares de Cooper, sino como la temperatura a la cual se disocia un dímero [93–95]. Dentro de la Fig. (4-6) se muestra la energía de ligadura usando un método variacional para la función de onda del problema de dos cuerpos, $\phi(r, \gamma) = A(\gamma)e^{-\gamma r}$. Comparando el valor de la interacción a la cual se forman los

pares diméricos desde el contexto de dos cuerpos denotada por $\chi_{2C} \approx 0,51$, con la predicción donde falla teoría BCS $\chi \approx 0,45$, se aprecia que existe una discrepancia de cerca del 11 %. Sin embargo en la región en la cual la temperatura crítica de BCS se separa de la solución de la predicción de BKT es inexacto decir que el sistema pasa ser de un superfluido tipo BCS a un superfluido BKT, en la región del cruce BCS-BKT el sistema no está compuesto enteramente de pares de Cooper ni de pares de dímeros, sino más bien una combinación de ellos. La región profunda de BKT si corresponde a la formación de un estado puramente superfluido dimerico, esta región ocurre para $\chi \approx 0,52$, valor consistente con χ_{2C} del problema de dos cuerpos. Esto se puede comparar con la Fig:(2-8) donde es posible observar que para el problema en 3D con interacción de contacto, la discrepancia de la teoría BCS con el modelo NSR no ocurre exactamente en la resonancia de Feshbach, sino primero se forma una fase de pseudopag, luego cerca de la resonancia de Feshbach la temperatura del superfluido alcanza un máximo y después se vuelve constante, entonces los resultados mostrados coinciden con el esquema delineado por [92].

En la figura 4-8 se esquematiza el cruce BCS-BKT, en el cual el sistema pasa de ser un superfluido BCS para valores de $\chi < 0,45$, en la región intermedia $0,52 > \chi > 0,45$ se da el cruce BCS-BKT en el cual se forman dímeros, para finalmente en la región de BKT $\chi > 0,52$ el sistema se compone por dímeros de moléculas.

4.6. Conclusiones

Se presentó el estudio del estado superfluido de un sistema de moléculas fermiónicas confinadas en redes ópticas bidimensionales, en el límite en el cual la interacción intraplano es despreciada. La interacción atractiva dipolar entre las moléculas de distintos planos da lugar a un estado superfluido de onda -s tipo BCS en el límite de interacciones débiles. Dentro del esquema de Ginzburg-Landau para transiciones fases continuas es posible determinar la temperatura crítica, el parámetro de orden del superfluido y la densidad superfluida. Además de verificar que la fase es estable termodinámicamente dentro del mismo contexto de la teoría de Ginzburg-Landau. La

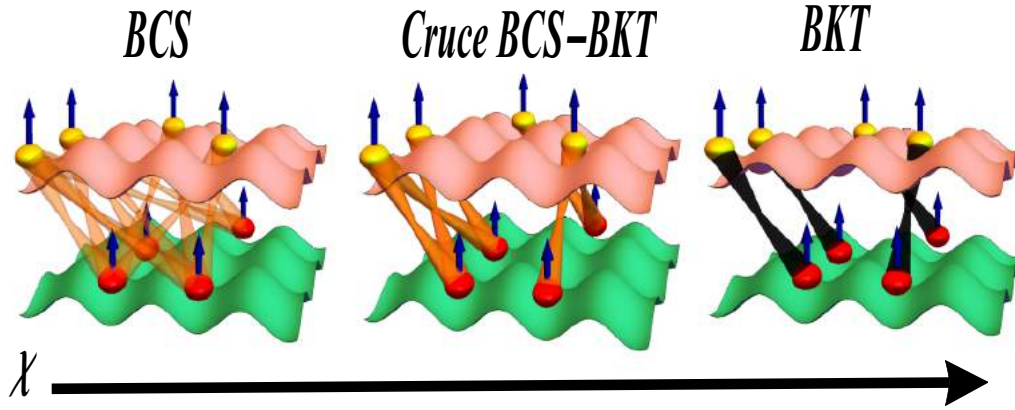


Figura 4-7: Cruce BCS-BKT en una bicapa dipolar de redes ópticas de gases dipolares de Fermi. Para interacciones débiles se forma un estado superfluido BCS, al incrementar la interacción se da el cruce BCS-BKT, finalmente cuando la interacción es lo suficientemente fuerte se forma un gas de dímeros.

teoría BCS predice la formación de pares para valores arbitrarios de los parámetros estudiados, la temperatura crítica aumenta indefinidamente al aumentar la interacción interplanar. Al incluir la teoría BKT se hace evidente que la predicción del modelo BCS es incorrecta para interacciones fuertes. En la región de interacciones fuertes la temperatura de BCS incluye sólo apareamientos con momento de centro de masa cero, de la misma manera que en el modelo NSR [92], la temperatura de condensación es menor que la temperatura a la cual se disocian los dímeros de moléculas. Es decir, la temperatura crítica BCS es una temperatura de disociación de dímeros más que una temperatura crítica del superfluido. Se estudia la región del cruce BEC-BCS el cual se da para interacciones cercanas a $\chi \approx 0,43$, finalmente el límite BKT en el cual el sistema está compuesto sólo de dímeros se presenta para $\chi \approx 0,52$, consistente con los resultados obtenidos en el capítulo: (3). En la siguiente sección se presenta el estudio del mismo problema incluyendo la interacción repulsiva intraplanar, la cual puede dar lugar a distintos tipos de inestabilidades como ondas de densidad o fases superfluidas, e incluso fases supersólidas.

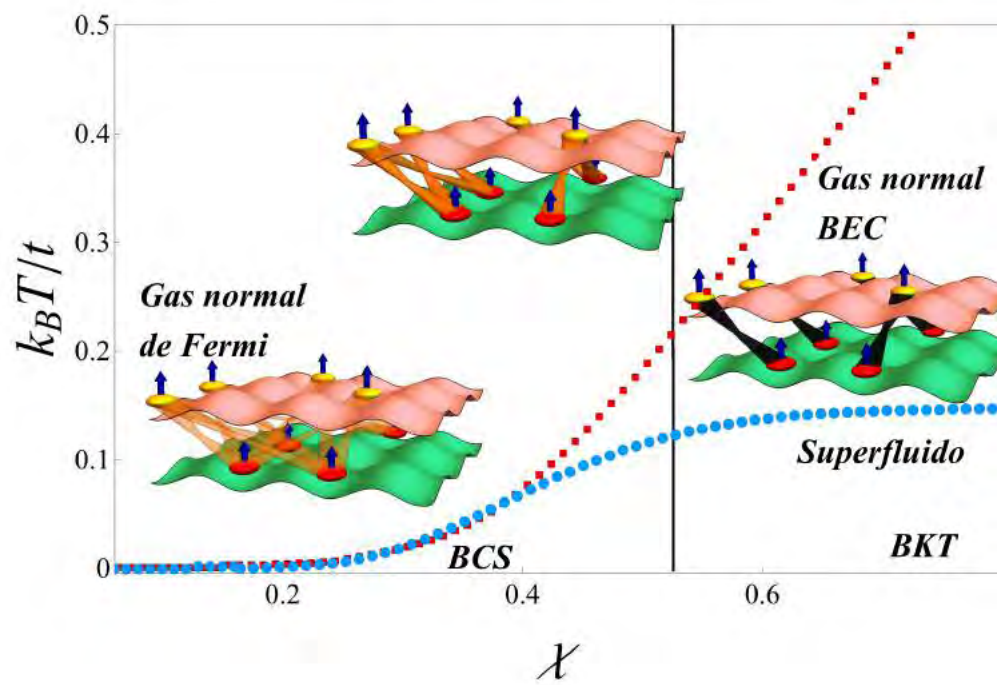


Figura 4-8: Diagrama de fases.

Capítulo 5

Gas dipolar de Fermi: Supersólido

En el presente capítulo se concluye el estudio de la bicapa del gas dipolar de Fermi considerando la presencia de una trampa armónica que confina las moléculas así como la interacción entre moléculas de la misma capa. El sistema estudiado se esquematiza en la figura (5-1). Como en las secciones previas d denota el momento dipolar de las moléculas, a la constante de red y λ la separación entre las capas definidas por las redes ópticas. De igual manera se alinea el momento dipolar de las moléculas perpendicular al plano que definen las redes ópticas. La interacción atractiva interplanar y la repulsiva intraplanar tienden a formar fases superfluidas e inestabilidades en la densidad respectivamente, a continuación se presentan las fases del sistema debido a la competencia entre ambas interacciones.

Inestabilidades de densidad han sido estudiadas previamente para fermiones moleculares confinados en monocapas, así como sistemas en confinamiento homogéneo en las referencias [108, 109, 115, 148–151]. La fase supersólida por otro lado ha sido reportada experimentalmente para sistemas bosónicos confinados en redes ópticas en cavidades cuánticas así como con acoplamiento espín-órbita. El presente capítulo reportado en el manuscrito [116] constituye pues una propuesta encaminada a la observación experimental de la fase supersólida en fermiones dipolares confinados en un arreglo cristalino en dos dimensiones.

5.1. Modelo

La interacción interplanar es atractiva para distancias intraplanares $r < \frac{\lambda}{\sqrt{2}}$, y repulsiva para distancias $r > \frac{\lambda}{\sqrt{2}}$, por otra parte la interacción intraplanar es siempre repulsiva,

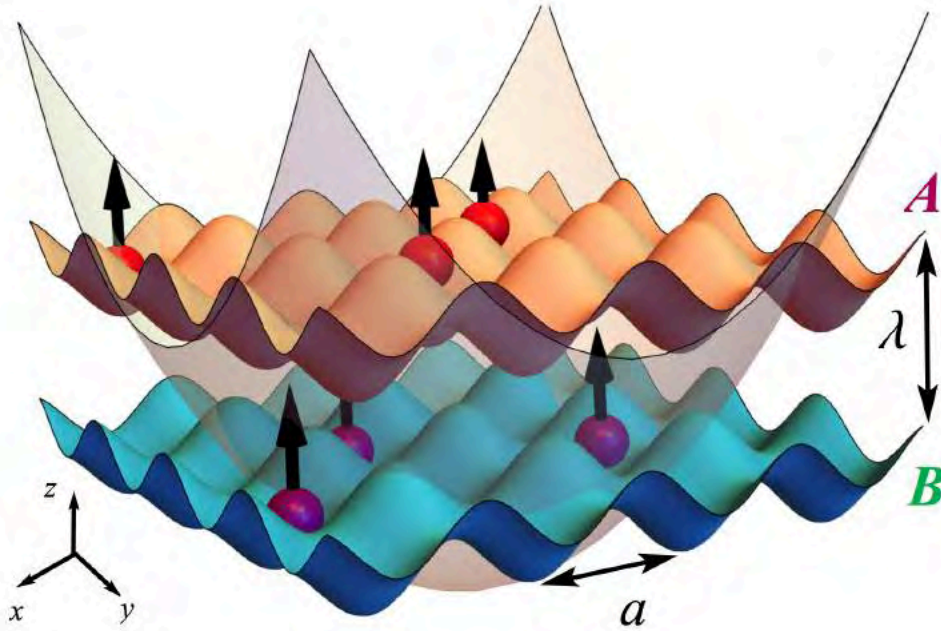


Figura 5-1: Gas dipolar de Fermi en presencia de una trampa armónica.

$$\begin{aligned} V^{\alpha,\alpha}(\vec{r}) &= d^2 \frac{1}{r^3}, \\ V^{\alpha,\beta}(\vec{r}) &= d^2 \frac{r^2 - 2\lambda^2}{(r^2 + \lambda^2)^{5/2}}, \end{aligned} \quad (5.1)$$

Los índices griegos denotan la capa en la cual la molécula es puesta. Los superíndices α, α (α, β) indican si la interacción ocurre en la misma (distintas) capas. Por claridad, se denota a la interacción intraplanar por $V^{\alpha,\alpha}(\vec{r}) = V(\vec{r})$, mientras la interacción interplanar se indica $V^{\alpha,\beta}(\vec{r}) = U(\vec{r})$.

El Hamiltoniano del sistema corresponde a un modelo extendido de Fermi-Hubbard

dado por $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{U}$, con

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \sum_{\alpha=A,B} \sum_{\vec{k}} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu_{\alpha}) \hat{n}_{\vec{k}}^{\alpha} + \sum_{\alpha=A,B} \sum_{\vec{i}} \frac{m\omega^2}{2} r^2(\vec{i}) \hat{n}_{\vec{i}}^{\alpha} \\
\hat{V} &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\alpha=A,B} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} V(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}, \alpha} \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}, \alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}', \alpha} \\
\hat{U} &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} U(\vec{k} - \vec{k}') \hat{c}_{\vec{q}/2+\vec{k}, A}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{q}/2-\vec{k}, B}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{q}/2-\vec{k}', B} \hat{c}_{\vec{q}/2+\vec{k}', A}.
\end{aligned} \tag{5.2}$$

Nuevamente $V(\vec{q})$ y $U(\vec{k} - \vec{k}')$ denotan la transformada de Fourier de los potenciales de interacción y $\hat{c}_{\vec{k}, \alpha}^{\dagger}, \hat{c}_{\vec{k}, \alpha}$ son los operadores de creación y aniquilación en las capas A y B , el término correspondiente al confinamiento armónico está escrito en la base de sitios de Fock, donde el vector posición está denotado por $\vec{r}(i) = a(i_x, i_y)$ y ω es la frecuencia armónica de la trampa que confina a las moléculas. Se mantiene la suposición de amarre fuerte con tunelaje a primeros vecinos, y todas las energías se reescalan al coeficiente de tunelaje t . Por otra parte, es conveniente en esta sección redefinir la interacción adimensional $\chi = a_d/a$, donde recordamos que $a_d = m_{eff}d^2/\hbar^2$ en términos de la masa efectiva $m_{eff} = \hbar^2/2ta^2$, mientras se conserva el cociente $\Lambda = \lambda/a$ como una variable relevante.

Para investigar la física del modelo, se emplea la aproximación de campo-medio inhomogéneo con la finalidad de incluir el apareamiento BCS al nivel de Hartree [115, 152], y las posibles inestabilidades en la densidad. Esta aproximación es razonable en el régimen de interacciones débiles. El Hamiltoniano de campo medio es diagonalizado autoconsistentemente resolviendo las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes. Este método como se explica en el capítulo 2 es la extensión para sistemas inhomogéneos de la aproximación estándar de Bogoliubov para las cuasi partículas. Este procedimiento nos permite capturar la esencia del estado superfluido BCS y de la fase de orden en la densidad en presencia del ambiente inhomogéneo [108, 109, 153]. Este esquema es ampliamente usado para estudiar la competencia de fases magnéticas y superconductoras en el contexto de superconductividad a altas temperaturas [154, 155], así como en el contexto de átomos ultrafríos [156]. Recientemente también ha sido

empleado para describir sistemas altamente correlacionados como superfluidos onda - p , así como superfluidos topológicos en bajas dimensiones (1D and 2D) [123].

Las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para nuestro sistema son

$$\sum_i \begin{pmatrix} H_{ij,\alpha}^0 & \Delta_{i,j} \\ \Delta_{i,j} & -H_{ij,\bar{\alpha}}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{j,\alpha}^n \\ v_{j,\bar{\alpha}}^n \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_{j,\alpha}^n \\ v_{j,\bar{\alpha}}^n \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

donde los elementos de matriz $H_{ij,\alpha}^0$ incorporan los términos de partícula individual del Hamiltoniano Eq. (5.2) así como la interacción interplanar al nivel de Hartree, donde se espera que dicho término domine [152].

El Hamiltoniano ideal bajo esta aproximación está dado por $H_{ij,\alpha}^0 = -t\delta_{\langle i,j \rangle} + \left(\sum_{l \neq i} V_{li} \langle n_{l,\alpha} \rangle + \epsilon_i - \mu \right) \delta_{i,j}$. El tunelaje a primeros vecinos está contenido en $\delta_{\langle i,j \rangle}$ siendo la delta de Kronecker a primeros vecinos. El efecto del potencial armónico es incluido en $\epsilon_i = \frac{m\omega^2}{2}r^2(i)$. Por otra parte el parámetro superfluido se obtiene de forma autoconsistente obteniendo el valor de expectación de $\Delta_{i,j} = U_{i,j} \langle c_{i,A} c_{j,B} \rangle$. Los valores de E_n corresponden a los eigenvalores de la energía de excitación de la n -ésima excitación elemental de las cuasi partículas de Bogoliubov. Dichos eigenvalores también se obtienen de forma autoconsistente usando como *ansatz* recursivo, el parámetro de orden superfluido y las relaciones estándares $n_{i,A} = \sum_n |u_{i,A}^n|^2 f(E_n)$ y $n_{i,B} = \sum_n |v_{i,B}^n|^2 (1 - f(E_n))$ con $(u_{i,\alpha}^n, v_{i,\bar{\alpha}}^n)$ las amplitudes de las excitaciones de cuasi-partícula locales de Bogoliubov, y $f(E_n)$ la distribución de Fermi, $n_{i,\alpha}$ es el valor de expectación de $\hat{n}_{i,\alpha}$. Por simplicidad se supone que ambas capas están igualmente pobladas.

Debido a la inhomogeneidad que introduce la presencia de la trampa armónica, adicionalmente a los parámetros de orden globales que describen las transiciones de fase al estado superfluido (SF) y onda de densidad (DW), se incluirán un par de parámetros de orden locales que tomen en cuenta la formación de estas fases en subespacios de la red óptica completa. El parámetro de la densidad está dado por $\rho_{\vec{Q},\alpha} = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{Q},\alpha}^\dagger c_{\vec{k},\alpha}$, donde el vector \vec{Q} identifica si se forma un patrón tipo tablero de ajedrez $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$, o una fase de densidad ordenada en líneas $\vec{Q} = (\pi/a, 0)$, o $(0, \pi/a)$ ver Fig:(5-2). El parámetro local de orden de la densidad $\phi_i =$

$\sum_{j_i} (-1)^{j_x+j_y} n_j$, donde el índice j_i denota que la suma corre sobre primeros y segundos vecinos. Este parámetro de orden describe una fase ordenada en la densidad tipo tablero de ajedrez para una sub-red de 3×3 centrada en el sitio i . Mientras el parámetro local de orden superfluido esta dado por $\Delta_i = \sum_{j_i} \Delta_{i,j}$. El parámetro global del superfluido como es usual es introducido a través del promedio de $\Delta = \sum_i \Delta_i / N_A$.

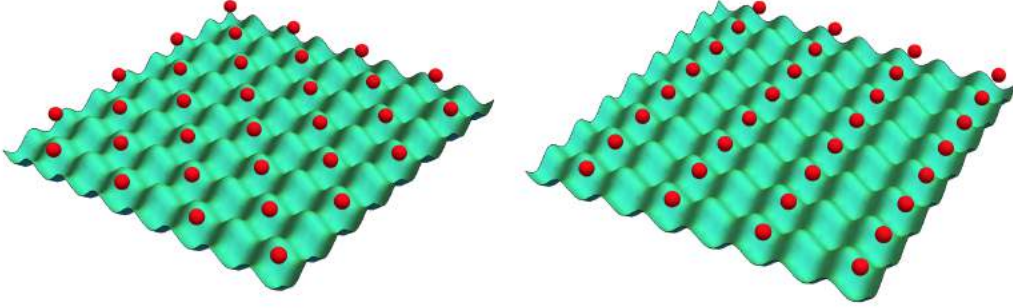


Figura 5-2: Inestabilidades de densidad, vistas de canto para una monocapa de red óptica. Del lado izquierdo se muestra la inestabilidad debido en $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$, que da lugar a la formación de tablaeros de ajedrez en la densidad. Del lado derecho $\vec{Q} = (\pi/a, 0)$ se aprecian inestabilidades tipo líneas.

Para determinar el perfil de densidad y el perfil espacial del parámetro de orden, se resuelven las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para redes del tamaño de $\Omega = 2 \times 37 \times 37$ manteniendo fijo el potencial químico $\mu/t = 1,5$. Esta restricción causa que el número de partículas decrezca conforme la temperatura tienda a cero, para una temperatura de $k_B T/t = 0,5$ el número de partículas es $N_A + N_B = 335$ mientras que a temperatura cero el número total de fermiones decrece a $N_A + N_B = 320$, esto debido a que el número de partículas es función en este esquema de la temperatura y del potencial químico, en otras palabras, al mantener fijo el potencial químico y variar la temperatura el número de partículas se modifica. Se mantiene constante la intensidad de la interacción $\chi = 0,3$, así como la frecuencia de la trampa armónica $\frac{1}{2}m(\omega a)^2/t = 0,025$.

Para ilustrar la competencia entre las distintas fases, se muestran los casos $\Lambda = 0,8; 0,85; 0,9$ y $1,0$. Se muestra el perfil de la densidad así como el parámetro de orden

para distintos valores de la temperatura. La temperatura se incrementa de forma adiabática y se muestran los valores particulares de $k_B T/t = 0,0; 0,10; 0,25$ y $0,45$.

5.2. Superfluido

Para el caso en el cual $\Lambda = 0,8$, en la Fig.(5-3) se observa un perfil homogéneo en la densidad en el centro de la trampa a temperatura cero y temperatura finita. El perfil de la densidad superfluida también es homogéneo en el centro de la trampa, a temperatura cero se forma un perfil tipo parábola invertida, el cual decrece conforme la temperatura aumenta. La temperatura a la cual el parámetro de orden del superfluido se hace cero es $k_B T/t = 0,28$, es decir, esta temperatura corresponde a la temperatura crítica del estado BCS. Como se mostró en el capítulo anterior, el estado superfluido tipo BCS se forma en el régimen de interacciones débiles, mientras que las interacciones fuertes pueden dar lugar a la formación de dímeros. En este capítulo nos enfocamos en la transición del superfluido BCS a un estado de orden de la densidad o un estado supersólido. Es por ello, que los valores de los parámetros que se eligen en este capítulo están restringidos a interacciones débiles.

5.3. Supersólido

Cuando el espaciado entre las capas aumenta, la competencia entre las interacciones atractivas y repulsivas se vuelve evidente. Como se muestra en la Fig. (5-4) para $\Lambda = 0,85$ a bajas temperaturas existe una región en el centro de la trampa armónica con un parámetro de orden superfluido coexistiendo con una densidad tipo tablero de ajedrez. Esta coexistencia es la firma del estado supersólido. Cuando la temperatura aumenta, tanto el parámetro de orden superfluido como el orden en la densidad se desvanecen. La temperatura crítica del superfluido es de $k_B T/t = 0,13$, mientras que el tablero de ajedrez se derrite a una temperatura de $k_B T/t = 0,26$.

Se observa que el radio en el cual existe superfluido es relativamente más grande que aquel para el cual existe onda de densidad. Esto se debe a que la inestabilidad tipo

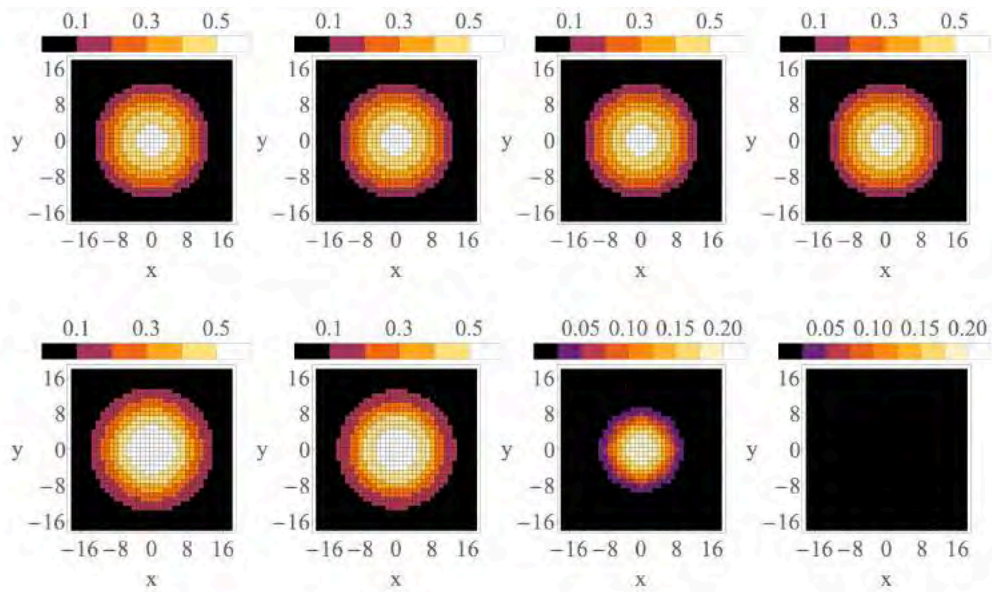


Figura 5-3: Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0, 0,10, 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,80$ y $\chi = 0,3$.

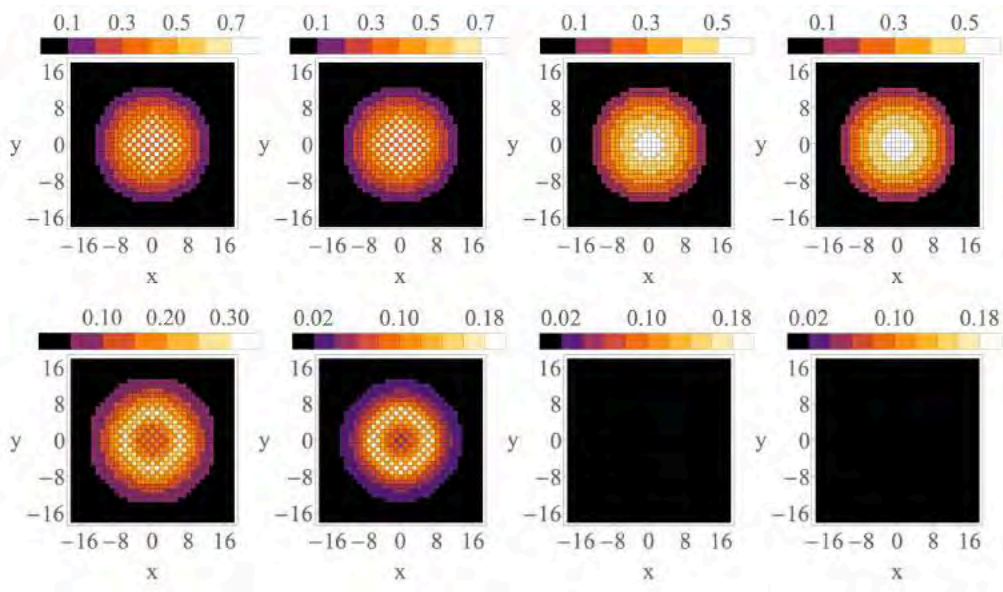


Figura 5-4: Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0, 0,10, 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,85$ y $\chi = 0,3$.

tablero de ajedrez se pronuncia cerca de la región de llenado medio [108], la inclusión de la trampa armónica forma un perfil parabólico en la densidad, de esta manera en las orillas de la parábola la densidad es baja y no permite la formación de ondas de densidad. Por otra parte, el estado superfluido sí se puede formar a densidades bajas, y es por ello que el disco del superfluido es mayor que el de densidad.

Se muestran las secciones transversales de los parámetros de orden locales en Fig.(5-5) con la finalidad de apreciar la existencia del estado supersólido en el centro de la trampa, esto es, un traslape espacial de la fase superfluida y el orden en la densidad. En una región amplia alrededor del centro de la trampa coexisten los parámetros de orden locales del superfluido y onda de densidad, cuando la densidad cae, el sistema no permite ondas de densidad y se forma un superfluido rodeando al supersólido.

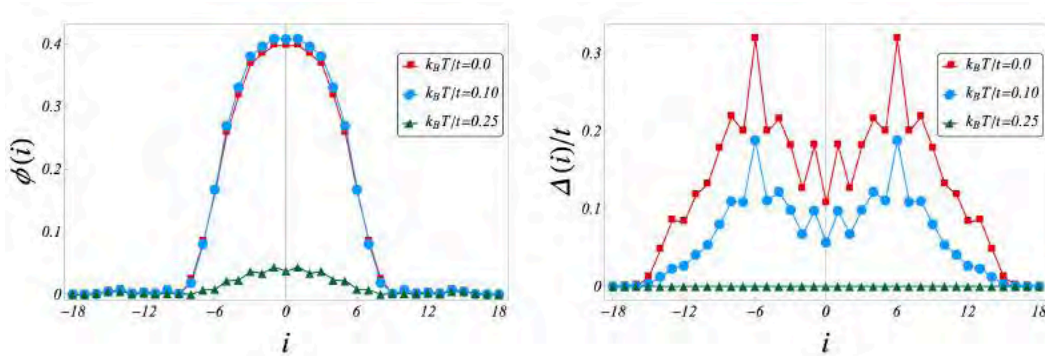


Figura 5-5: Parámetros de orden locales a través de una sección transversal. Se grafica el parámetro de orden tipo tablero de ajedrez y el parámetro superfluido local. Ambos se grafican en un corte transversal que cruza el centro de la trampa, $\phi(x, 0)$ y $\Delta(x, 0)$ para $k_B T/t = 0,0; 0,10$ y $0,25$. $\Lambda = 0,85$ y $\chi = 0,3$.

Para $\Lambda = 0,9$ la interacción repulsiva intraplana empieza a dominar en el centro de la trampa. En Fig. (5-6) es posible observar que existe una amplia región en el centro de la trampa con un orden en la densidad de tablero de ajedrez, dicho orden se destruye a $k_B T/t = 0,26$. También se observa un parámetro de orden superfluido tenue en el centro de la trampa, que aumenta rodeando el tablero de ajedrez. Esto es, cuando la densidad no es lo suficientemente grande para soportar un orden en la densidad, el estado superfluido emerge en dicha región. La temperatura crítica de dicho estado es $k_B T/t = 0,06$. Las secciones transversales muestran que existe una pequeña región

donde ambas fases se traslapan espacialmente [158, 159]. Esta separación de fases en la cual una fase rodea a la otra, ha sido estudiada en sistemas bosónicos en ambientes inhomogéneos, tales como modelos de Bose-Hubbard. En dichos modelos las fases de aislante de Mott y estados superfluidos tienden a formar discos y anillos, como consecuencia de la presencia armónica que a través del potencial químico local impone las fases accesibles del sistema. En estos sistemas, incluso en baja dimensionalidad campo medio coincide con calculos tipo Monte Carlo entre otros [158, 159].

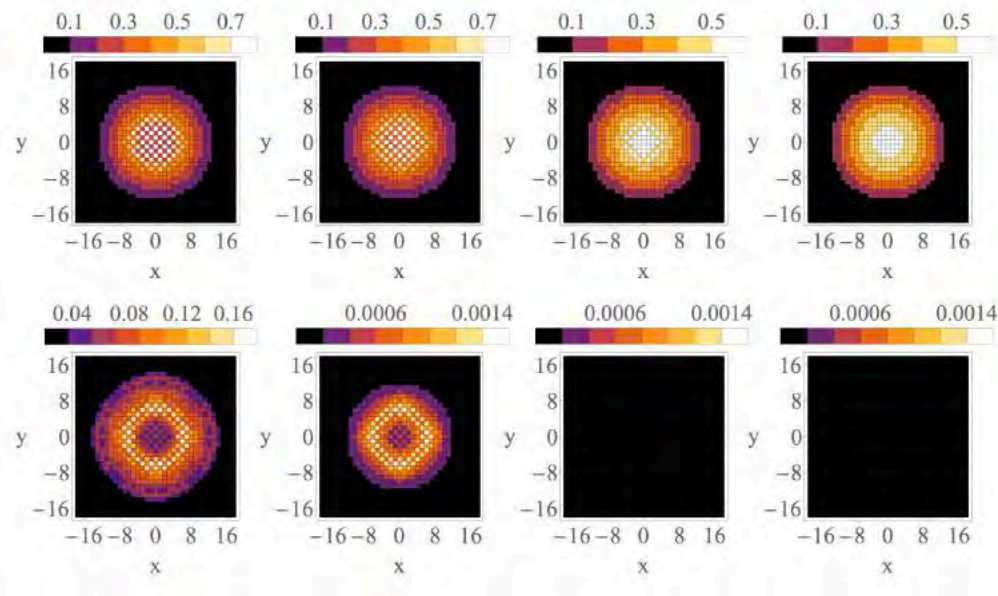


Figura 5-6: Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0,0; 0,10; 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,90$ y $\chi = 0,3$.

5.4. Onda de densidad

Finalmente cuando la separación interplanar es lo suficientemente grande, la interacción repulsiva en la misma capa domina, destruyendo la densidad superfluida. Para $\Lambda = 1,0$, el apareamiento esta completamente inhibido. Para valores mayores de Λ no se forman ningún tipo de fases superfluidas, mientras que el orden en la densidad de ajedrez persiste en el centro de la trampa tal y como se muestra en la figura (ver Fig. (5-8)), la temperatura crítica para el orden de la densidad se vuelve

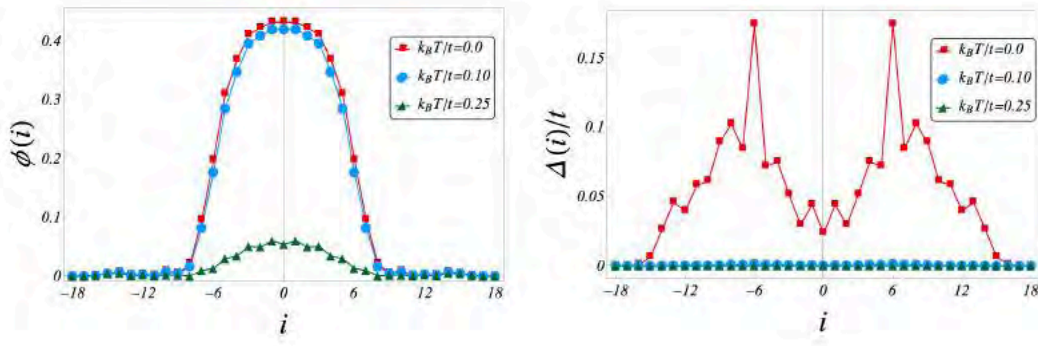


Figura 5-7: Parámetros de orden locales a través de una sección transversal. Se grafica el parámetro de orden tipo tablero de ajedrez y el parámetro superfluido local. Ambos se grafican en un corte transversal que cruza el centro de la trampa, $\phi(x, 0)$ y $\Delta(x, 0)$ para $k_B T/t = 0, 0,10$ y $0,25$. $\Lambda = 0,90$ y $\chi = 0,3$.

independiente de la separación Λ . Estos resultados coinciden con estudios previos de fermiones en monocapas con orientaciones arbitrarias del momento dipolar [108, 109]. Esto es, cuando $\Lambda \gg 1$ el sistema se convierte en dos capas idénticas desacopladas, entonces es posible comparar con los resultados de la monocapa.

En la Fig. (5-9) se grafican los parámetros de orden globales Δ y ρ como función de la temperatura para distintos valores de Λ . Se puede apreciar que la diagonalización de Bogoliubov-de Gennes predice transiciones de fase continuas de segundo orden. Tanto la transición de fluido normal-superfluido, normal-DW, DW-supersólido son transiciones de segundo orden en las que el parámetro de orden se mantiene continuo para valores arbitrarios de la temperatura, y la derivada presenta una discontinuidad en el punto de la transición. La temperatura crítica del superfluido es menor que la temperatura crítica de la onda de densidad. En la figura (5-9) del lado derecho se observa la transición de fluido normal a DW, el parámetro de orden ρ presenta una discontinuidad en la derivada en la temperatura en la cual emerge el estado superfluido. Para $\Lambda = 0,85$ donde la región del supersólido es mayor, la discontinuidad en la derivada de ρ en la transición DW-SS es más evidente.

En la figura Fig. (5-10) se presenta el diagrama de fase de dicho modelo resultante de la solución de las ecuaciones de Bogoliubov de Gennes a temperatura finita. En el recuadro interior se muestra el diagrama de fase a temperatura cero. La región de

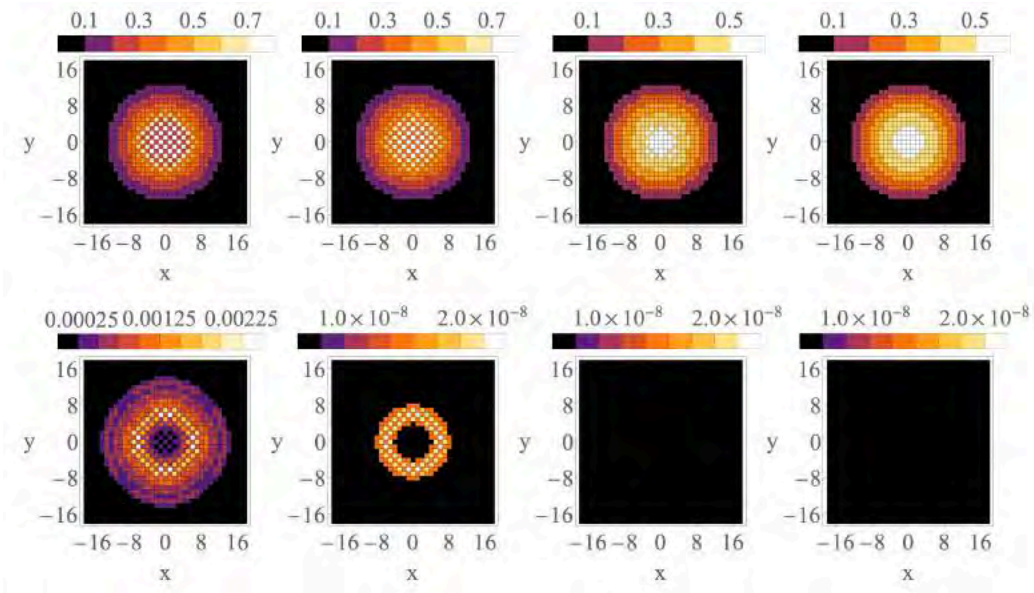


Figura 5-8: Perfil de la densidad (arriba) y parámetro de orden superfluido (abajo) como función de la temperatura. De izquierda a derecha se grafican las temperaturas $k_B T/t = 0,0; 0,10; 0,25$ y $0,45$ para $\Lambda = 0,90$ y $\chi = 0,3$.

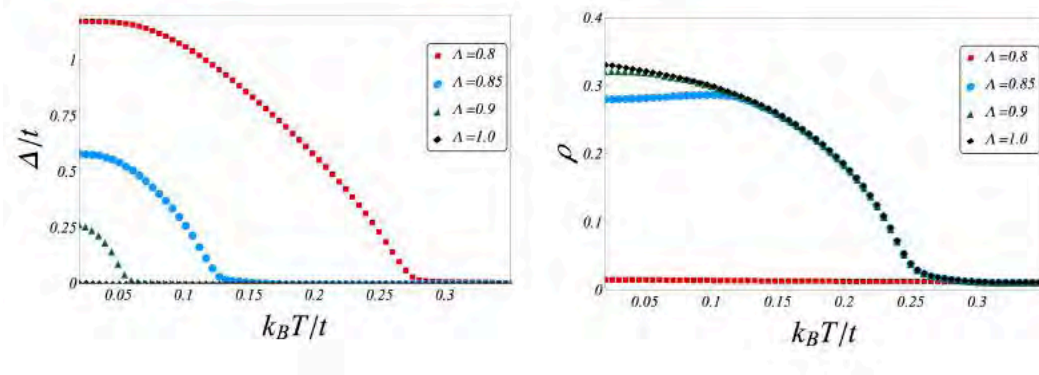


Figura 5-9: Parámetros de orden como función de la temperatura. Se observa una transición de fase de segundo orden.

coexistencia entre la fase superfluida y el orden de densidad es la denominada fase supersólida. Como es de esperar, en el régimen en el cual la interacción atractiva domina la fase superfluida domina cualquier tipo de orden de densidad. Cuando la interacción repulsiva empieza a competir con la interacción atractiva, esto es, cuando λ se vuelve comparable con la constante de red a , la fase superfluida y el orden en la densidad coexisten. Para $\Lambda < 0,83$ no hay orden en la densidad y la temperatura crítica del superfluido decrece monótonamente. Cerca de $\Lambda \approx 0,83$ dicha temperatura crítica decrece abruscamente y aparece la formación del tablero de ajedrez, mientras la temperatura crítica del orden de la densidad se vuelve distinta de cero y se vuelve prácticamente constante como función de Λ . Mientras el parámetro de orden del superfluido, vuelve a decrecer monótonamente después del cambio abrupto, eventualmente sólo existe fracción superfluida en el borde del tablero de ajedrez sin la coexistencia espacial de fases, es decir, sin la fase supersólida.

El valor máximo que se predice para la temperatura crítica de la fase supersólida en nuestro modelo tomando en cuenta los parámetros experimentales actuales es $k_B T/t \approx 0,23$. Dicha temperatura aún se encuentra lejos de las temperaturas actuales alcanzadas en experimentos con gases fermiónicos KRb [63] and NaK [49], sin embargo existen esfuerzos actuales para disminuir la temperatura de degeneración de los gases moleculares y hay prospectos de alcanzar dicha temperatura en un futuro cercano.

Las fases que despliega el sistema son función del parámetro Λ el cual puede ser modificado externamente incrementando o disminuyendo la separación entre las capas de las redes ópticas. En principio, las mismas fases pueden ser investigadas modificando el factor de llenado en la red óptica a través del potencial químico μ , es decir, pasando de fracciones de llenado bajas a intermedias es posible transitar del estado superfluido, al supersólido y a la onda de densidad, sin embargo, para densidades bajas el número de sitios que es necesario incluir para que el sistema tenga sentido físico es demasiado grande para ser resuelto numéricamente. Es decir, al modificar μ es necesario incrementar el número de sitios para que en todo momento tenga sentido hablar de un sistema termodinámico.

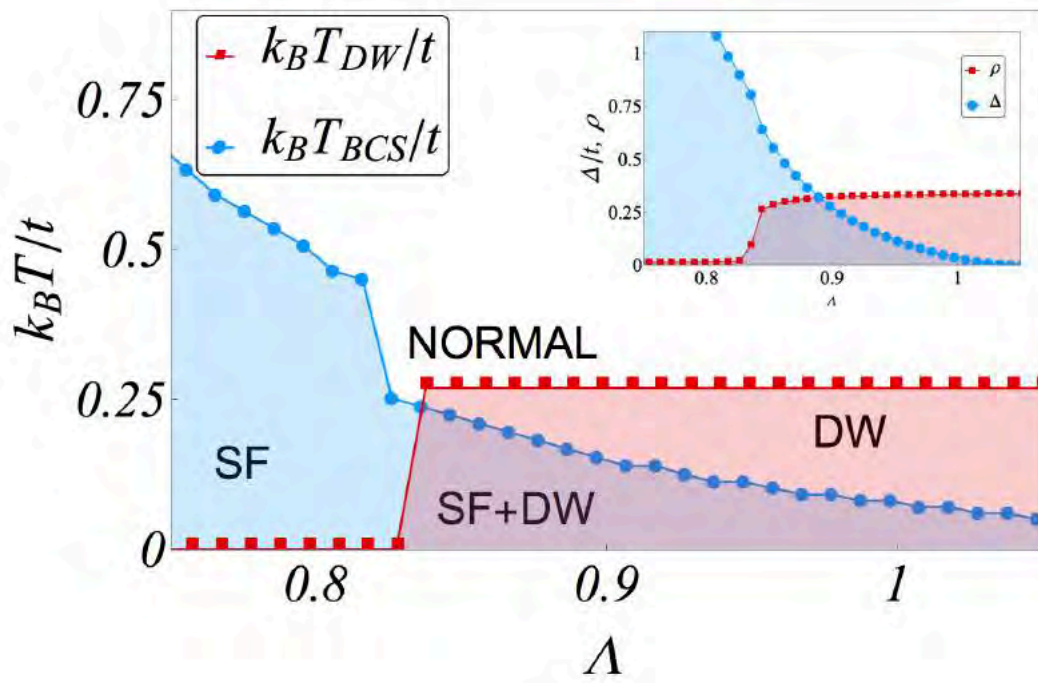


Figura 5-10: Diagrama de fase para redes ópticas $2 \times 37 \times 37$, como función del espaciamiento entre las redes ópticas a interacción fija $\chi = 0,3$.

5.5. Conclusiones

En este capítulo se estudiaron las fases termodinámicas de un gas dipolar de Fermi confinado en una bicapa de redes ópticas en presencia de un confinamiento armónico. La naturaleza de la interacción dipolar, da lugar a una riqueza de fases inexploradas en el contexto actual de los gases ultrafríos. Se predice la formación de estados superfluidos fermiónicos tipo BCS a través de las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para interacciones intraplanares despreciables. La interacción intraplana repulsiva da origen a la formación de ondas de densidad tipo tableros tipo ajedrez, y la competencia de ambas fases da lugar a la hasta ahora inexplorada fase de supersólido con gases de Fermi. La presencia de la trampa armónica es la responsable de la separación de las fases superfluidas y de onda de densidad, en la cual aunque ambas fases coexisten no se traslapan espacialmente, un anillo superfluido tiende a rodear la fase de onda de densidad, este resultado se deduce a través de la inclusión de los parámetros de orden locales. La transición de fluido normal a onda de densidad, y de onda de densidad a supersólido se muestran son de segundo orden en el esquema de la teoría de Ginzburg-Landau.

Este estudio en combinación con la gran capacidad para atrapar moléculas de Fermi y la posibilidad de producir gases degenerados en su estado base absoluto, ofrece una oportunidad de estudiar la fase supersólida en gases ultrafríos. A través del control de la separación entre las capas, el modelo actual representa el candidato ideal para estudiar las fases cuánticas que surgen de la competencia entre interacciones de largo y corto alcance, así como interacciones repulsivas contra interacciones atractivas.

Capítulo 6

Gases de Fermi en Cavidades Cuánticas.

En el presente capítulo se estudia el estado base de una mezcla de dos componentes hiperfinas de átomos de Fermi confinada en una red óptica unidimensional en el interior de una cavidad cuántica. La interacción de los modos de luz en la cavidad con los átomos en el interior de la misma provee la posibilidad de diseñar arbitrariamente perfiles espaciales de la interacción efectiva entre los átomos, dicha interacción átomo-átomo es mediada por la interacción luz-materia en un régimen completamente cuántico, en el cual, la luz es usada para controlar las fases cuánticas de los átomos [160–167]. En este capítulo se demuestra que a través de la polarización de un haz de luz de bombeo, el cual incide perpendicularmente a la cavidad, es posible tener control absoluto sobre las fases cuánticas emergentes del sistema. Los resultados originales del presente capítulo se encuentran en preparación para ser sometidos a arbitraje.

Redes ópticas de gases ultrafríos confinadas en cavidades cuánticas han sido previamente estudiadas en el contexto de fases superradiantes, tanto para sistemas bosónicos como para sistemas fermiónicos. Recientes estudios han explotado la interacción átomo-luz en el régimen cuántico dentro del contexto teórico, con la finalidad de estudiar estados topológicos superradiantes en gases de Fermi [169, 173], campos magnéticos artificiales [174], imanes y modelos de Ising [168, 171, 176], fases topológi-

cas y quirales [170, 172] y simuladores cuánticos de efectos tipo Meissner [175], cruce BEC-BCS [177] así como fases supersólidas, ondas de enlace, y control de fases magnéticas [178–185], así como localización de muchos cuerpos (trabajo en preparación).

El capítulo está estructurado de la siguiente manera, en la sección (6.1) se introduce el modelo a estudiar, describiendo de forma breve la deducción del Hamiltoniano efectivo de materia. La sección (6.2) está enfocada al estudio del modelo cuando se considera la incidencia de un sólo haz de bombeo con polarización lineal en las direcciones $-y$ (6.2.1) y $-x$ (6.2.2). Posteriormente se estudia polarización lineal arbitraria (6.2.3). Finalmente se presenta un esquema para simular fases de superconductores a altas temperaturas.

6.1. Modelo

6.1.1. Hamiltoniano efectivo

El sistema a considerar consiste de una mezcla de átomos de Fermi en dos estados hiperfinos confinados en una red óptica dentro de una cavidad cuántica, la cual se ilumina con un haz de bombeo/prueba clásico coherente. Es decir, el haz de bombeo está descrito por el electromagnetismo clásico, mientras que los fotones dentro de la cavidad son descritos por la mecánica cuántica, el campo electromagnético producido por el haz de bombeo está polarizado linealmente en alguna dirección arbitraria. La cavidad cuántica se supone unimodal de frecuencia ω_c , fuera de resonancia de la frecuencia atómica ω_a . La cavidad cuántica tiene una constante de decaimiento κ , y la emisión espontánea de los átomos Γ se supone mucho menor que la desintonía entre los modos de la luz de bombeo ω_p y la frecuencia atómica ω_a . El acoplamiento entre los átomos y la cavidad cuántica está dado a través del coeficiente $g_p = \frac{g_c \Omega_p}{2\Delta_p}$, siendo g_c la constante de acoplamiento luz-materia, Δ_p la desintonía $\omega_p - \omega_a$, y Ω_p la amplitud del haz de bombeo [160–166]. En figura (6-1) se esquematiza el modelo a estudiar; una red óptica compuesta de una mezcla de estados hiperfinos, es puesta en el interior de la cavidad cuántica, el campo amarillo indica el campo producido por

los haces de luz de bombeo.

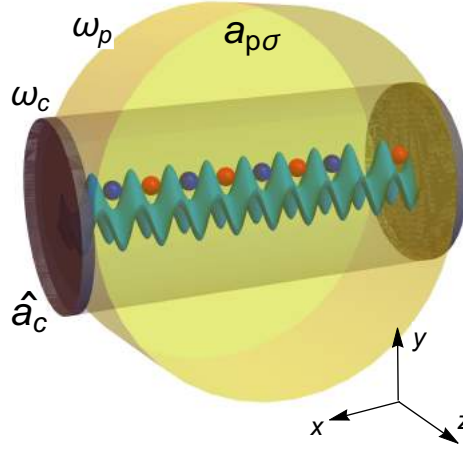


Figura 6-1: Representación esquemática del modelo. Una red óptica de dos especies hiperfinas es puesta en el interior de una cavidad cuántica. Un haz de bombeo clásico denotado por el campo clásico $a_{p,\sigma}$ de frecuencia ω_p ilumina a los átomos, lo cual se representa con el campo en amarillo. El campo cuántico de la cavidad se denota por \hat{a}_c .

El Hamiltoniano se encuentra derivado en el Apéndice(C), el cual se compone de la contribución de los átomos en la red óptica, del Hamiltoniano de luz, y del término que toma en cuenta la interacción luz-materia. El Hamiltoniano de los átomos en la red óptica está descrito a través del modelo usual de Fermi-Hubbard bajo la aproximación de amarre fuerte con interacción local atractiva. Dicho Hamiltoniano es

$$\hat{H}^F = -t \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + H.c + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (6.1)$$

donde t es el coeficiente de tunelaje, y U la interacción entre especies diferentes en el mismo sitio.

Por otra parte, el Hamiltoniano de la luz en el interior de la cavidad unimodal está dado por

$$H^L = \hbar\omega_c \hat{a}_c^{\dagger} \hat{a}_c, \quad (6.2)$$

donde los operadores $\hat{a}_c, \hat{a}_c^{\dagger}$ denotan los operadores de creación y aniquilación respectivamente de los modos de luz de la cavidad de frecuencia ω_c [160].

Para un sólo modo de bombeo, cuyas amplitudes son respectivamente $a_{p,\sigma}^*$ y $a_{p,\sigma}$ (campo electromagnético representado en amarillo en Fig: (6-1)), la interacción de la luz con los átomos de la cavidad está dada por [162–164]

$$\hat{H}^{FL} = \sum_{\sigma} U_c (a_{p\sigma}^* \hat{a}_c \hat{F}_{pc}^{\dagger\sigma} + \hat{a}_c^\dagger a_{p,\sigma} \hat{F}_{cp}^{\sigma}), \quad (6.3)$$

siendo $U_c = g_c g_p / \Delta_p$. Por su parte $\hat{F}_{c,p}^{\sigma} = \hat{D}_{c,p}^{\sigma} + \hat{B}_{c,p}^{\sigma}$, donde $\hat{D}_{c,p}^{\sigma}$ describe el acoplamiento de la luz con la densidad de los átomos $\hat{D}_{c,p}^{\sigma} = \sum_i J_{ii}^{cp} \hat{n}_{i,\sigma}$ y $\hat{B}_{c,p}^{\sigma}$ toma en consideración la interferencia de las densidades del campo de materia. $\hat{B}_{c,\sigma}^{\sigma} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j}^{cp} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + H.c)$. La estructura espacial de la luz determina los coeficientes $J_{i,j}^{cp}$ que pueden ser calculados como

$$J_{i,j}^{cp} = \int dx w(\vec{x} - \vec{x}_i) u_c^*(\vec{x}) u_p(\vec{x}) w(\vec{x} - \vec{x}_j), \quad (6.4)$$

donde $w(\vec{x})$ son las funciones de Wannier atómicas, y $u_{c,p}(\vec{x})$ son los modos de la luz de bombeo.

La polarización del haz de bombeo juega un papel crucial en el acoplamiento de la luz con fermiones en dos estados hiperfinos. Por ejemplo, si la polarización es circular, entonces la luz sólo se acopla a una componente hiperfina. Mientras que si la polarización es lineal, entonces la interacción como se mostrará a continuación, puede dar lugar a distinto tipo de fases magnéticas y de ondas de densidad y espín.

Es de nuestro interés el estudio del Hamiltoniano en el límite adiabático, suponiendo $|\kappa| \ll |\Delta_c|$, $|U| \ll |\Delta_c|$ y $t \ll |\Delta_c|$, siendo $\Delta_c = \omega_p - \omega_c$, el estado estacionario para los modos en la cavidad es en dicha aproximación [161, 166]

$$\hat{a}_c \otimes \mathbb{1}_a = \sum_{\sigma} C_{\sigma} \mathbb{1}_p \otimes \hat{D}_{cp}^{\sigma}, \quad (6.5)$$

donde $C_{\sigma} = \frac{U_c a_{p\sigma}}{\Delta_c + i\kappa}$, y $\mathbb{1}_{a,p}$ las identidades de los espacios de Fock de los átomos y la luz respectivamente. Escribiendo a las polarizaciones lineales x/y en términos de las

polarizaciones circulares derechas e izquierdas

$$\begin{aligned} a_{p,x} &= \frac{a_{p,L} + a_{p,R}}{\sqrt{2}}, \\ a_{p,y} &= -i \frac{-a_{p,L} + a_{p,R}}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (6.6)$$

es posible mostrar que el Hamiltoniano para polarización lineal en x/y es respectivamente

$$\begin{aligned} \hat{H}_{x/y}^{FL} &= \frac{U_c |a_{p,x/y}|^2}{\Delta_c^2 + \kappa^2} \left((\Delta_c - i\kappa) \hat{D}_{p,c}^{x/y} \hat{F}_{cp}^{\dagger x/y} + (\Delta_c + i\kappa) \hat{D}_{c,p}^{\dagger x/y} \hat{F}_{pc}^{x/y} \right) \approx \\ &= \frac{U_c |a_{p,x/y}|^2}{\Delta_c^2 + \kappa^2} \left(\Delta_c \hat{D}_{p,c}^{x/y} \hat{F}_{cp}^{\dagger x/y} + \Delta_c \hat{D}_{c,p}^{\dagger x/y} \hat{F}_{pc}^{x/y} \right), \end{aligned} \quad (6.7)$$

si la red óptica es lo suficientemente profunda, es razonable suponer que $J_{j,j}^{cp} = u_c^*(\vec{x}_j) u_p(\vec{x}_j)$, y por tanto $\hat{F}_{cp}^{x/y} \approx \hat{D}_{c0}^{x/y}$, de manera que el Hamiltoniano efectivo se escribe para luz linealmente polarizada como

$$\hat{H}_{eff} = H^F + \frac{g_{eff}}{N_s} \left(\hat{D}_{p,c}^{\dagger x/y} \hat{D}_{cp}^{x/y} + \hat{D}_{c,p}^{x/y} \hat{D}_{pc}^{\dagger x/y} \right), \quad (6.8)$$

donde se ha definido $g_{eff} = \frac{\Delta_c}{\Delta_c^2 + \kappa^2} N_s \left| \frac{g_c g_p a_{x/y}}{\Delta_p} \right|^2$. Dependiendo de la polarización la luz se acopla a los átomos a través de la densidad $\hat{\rho}_j = \hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow}$ o a la magnetización $\hat{m}_j = \hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}$, es decir,

$$\begin{aligned} \hat{D}_{cp}^x &= \sum_j J_j^{cp} \hat{\rho}_j \\ \hat{D}_{cp}^y &= \sum_j J_j^{cp} \hat{m}_j. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Por su parte, el coeficiente J_j^{cp} determina la forma explícita en la cual se acopla de manera efectiva la luz con los átomos. Así, la capacidad potencial de ajustar tanto la polarización como el coeficiente J_j^{cp} proveen una gran motivación para estudiar las fases magnéticas, de ondas de densidad, así como estados superfluidos y de orden de

enlace en redes ópticas.

En general, si se define polarización lineal en un ángulo θ , y su complementaria ortogonal a $\theta + \pi/2$,

$$\begin{aligned} a_{p,\theta} &= \frac{a_{p,L}e^{i\theta} + a_{p,R}e^{-i\theta}}{\sqrt{2}}, \\ a_{p,(\theta+\pi/2)} &= -i\frac{-a_{p,L}e^{i\theta} + a_{p,R}e^{-i\theta}}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (6.10)$$

es posible mostrar que para polarización en θ en el límite adiabático, la interacción luz-átomo es de forma efectiva

$$\hat{H}_\theta^{FL} = \frac{U_{c0}|a_{p,\theta}|^2}{\Delta_c^2 + \kappa^2} \Delta_c \frac{1}{2} \left(\hat{D}_{cp}^{\dagger\theta} \hat{D}_{pc}^\theta + \hat{D}_{cp}^\theta \hat{D}_{pc}^{\dagger\theta} \right), \quad (6.11)$$

siendo $\hat{D}_{pc}^\theta = (\hat{D}_{pc}^\uparrow e^{i\theta} + \hat{D}_{pc}^\downarrow e^{-i\theta})$.

El coeficiente $J_j^{cp} = u_c^*(\vec{x}_j)u_p(\vec{x}_j)$ puede ser controlado a través de los modos de la cavidad y el haz de prueba. Por ejemplo, si $u_c(\vec{x}) = \exp(i\vec{k}_c \cdot \vec{x})$ y $u_p(\vec{x}) = \exp(i\vec{k}_p \cdot \vec{x})$, y la cavidad esta alineada con la red óptica, de manera que el vector \vec{k}_c apunta en la dirección de la cavidad, y el vector de onda del haz de prueba incide perpendicularmente a la cavidad $\vec{k}_c \cdot \vec{k}_p = 0$, entonces $J_j^{cp} = (-1)^j$ si $\lambda = 2a$. En particular con ondas planas es posible crear interacciones con varios modos atómicos como función del ángulo de incidencia del haz de bombeo y la dirección de la cavidad con respecto a los ejes de la red óptica, es decir si $J_j^{cp} = \exp((i\vec{k}_c - \vec{k}_p) \cdot \vec{r}_j)$, entonces la interacción efectiva, tiene una dependencia espacial proporcional al producto de las $J_j = J_j^{cp}$,

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}^F + \frac{g_{eff}}{N_s} \sum_{j,l} \frac{1}{2} \left(J_j^* J_l \hat{d}_j^{\dagger\theta} \hat{d}_l^\theta + J_j J_l^* \hat{d}_j^\theta \hat{d}_l^{\dagger\theta} \right), \quad (6.12)$$

donde $\hat{d}_j^\theta = n_{j,\uparrow} e^{i\theta} + n_{j,\downarrow} e^{-i\theta}$. Entonces la interacción de largo alcance esta caracteri-

zada por un perfil dado por

$$W_{ij} = \cos[(\vec{k}_c - \vec{k}_p) \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_j)], \quad (6.13)$$

esto da lugar a la posibilidad de generar un número arbitrario de modos atómicos R , eligiendo

$$\cos(\theta_p) = \cos(\theta_c) - \frac{\lambda}{aR},$$

siendo $\theta_{c,p}$ los ángulos de la cavidad y del haz de prueba con respecto al eje de la cavidad, λ la longitud de onda del haz de bombeo, y a la constante de la red óptica. Aunado a esto es posible generar interacción espacialmente desordenada si se elige a la periodicidad como incommensurable [186] con la constante de red a . En la figura

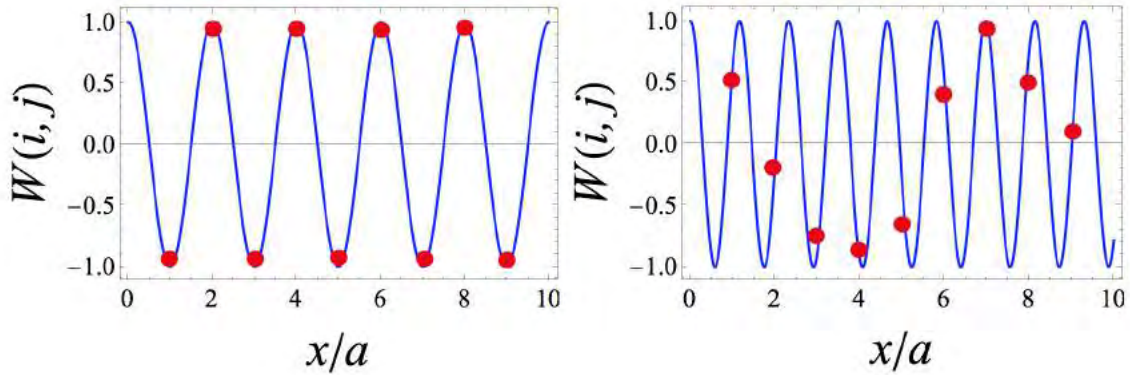


Figura 6-2: Interacción interatómica $\theta_c = p$, $\theta_p = \pi/2$. En azul se muestra el potencial $W(i, j)$, mientras que en negro, la línea punteada indica la posición de la red óptica. Los círculos en rojo, indican el valor de la interacción en los mínimos del potencial óptico, que es donde se sitúan los átomos. Del lado izquierdo se muestra un potencial de signos intercambiantes $\theta_c = 0$, $\theta_p = \pi/2$, del lado derecho un potencial desordenado eligiendo la periodicidad de la red incommensurable con el potencial $W(i, j)$. Siendo $x = |i - j|$

(6-2), se esquematiza la estructura del potencial como función de la distancia de separación interatómica. Para incidencia perpendicular ($\theta_c = 0$, $\theta_p = \pi/2$) es posible crear un potencial con signos intercambiantes $W(i, j) = (-1)^{|i-j|}$ si la longitud de onda de la luz de bombeo es $\lambda = 2a$, un potencial constante sobre toda la red óptica manteniendo $\lambda = 3a/2$, ($\theta_c = 0$, $\theta_p = \pi/3$), o bien un potencial de interacción espacialmente desordenado $\lambda = \gamma a$, con γ un número irracional.

6.1.2. Parámetros y parámetros de orden

A continuación, haciendo la conexión con criterios bien establecidos para identificar la presencia de fases termodinámicas, se delinea la forma en la que se elegirán los parámetros para identificar las fases del sistema en consideración.

Es importante resaltar a este nivel que el teorema de Mermin-Wagner establece que en el sentido estricto a temperatura finita no existe fase superconductora en modelos tipo Hubbard en una dimensión, sin embargo, a temperatura $T = 0$ es posible tener estados superconductores en los cuales emerge un orden no-diagonal de largo alcance (ODLRO) responsable de la fase superconductora. Los resultados que a continuación se presentan son resultado de diagonalización exacta para sistemas de 10 sitios, por lo cual, el orden no-diagonal de largo alcance se debe entender en el contexto de sistemas finitos. Debido a que el alcance de la interacción es infinito, aproximaciones de campo medio, DMRG guiarán a un resultado incorrecto, por el contrario, se presentarán los resultados con la limitación del tamaño del sistema, los cuales se deberán interpretar bajo las consideraciones antes mencionadas.

La idea de orden no-diagonal introducido por Yang para fermiones se basa en el concepto de la matriz de densidad reducida de dos cuerpos, la existencia de ODLRO implica el efecto Meissner y por tanto el estado superconductor [187]. Para un estado puro $|\Psi\rangle$ de un sistema discreto tipo Hubbard, el ODLRO está caracterizado por el *comportamiento* de la matriz reducida de dos cuerpos [188, 189],

$$(\rho_2)_{i,j} = \langle \Psi | \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} | \Psi \rangle. \quad (6.14)$$

El concepto ODLRO establece que si el máximo de los eigenvalores de $(\rho_2)_{i,j}$, digamos λ_{max} escala proporcional al número de sitios del sistema $\lambda_{max} = cN_s$ para $N_s \gg 1$ siendo c una constante independiente de N_s , entonces el estado posee ODLRO, y por tanto es superfluido. Este criterio es equivalente a pedir que $(\rho_2)_{i,j} \neq 0$ en el límite $|i-j| \rightarrow \gg 1$. Estados con ODLRO han sido extensamente estudiados en el contexto de la superconductividad, en particular para modelos de Fermi-Hubbard. Para estos modelos es del conocimiento que el estado BCS tradicional no es eigenestado del

Hamiltoniano, sin embargo Yang mostró que estados del tipo η [188] se caracterizan por conformarse por pares tipo Cooper, tener ODLRO y por ende presentar efecto Meissner, aunque en principio pueden no corresponder al estado base del modelo de Fermi-Hubbard atractivo. Posterior al trabajo de Yang, la discusión de ODLRO se amplió para sistemas uni-dimensionales [189–198]. En el presente trabajo se estudia la presencia de ODLRO usando el criterio de Yang, y para fines de comparación, se introduce el parámetro de orden $\mathcal{O}_\eta = \lambda/\lambda_\eta$, siendo λ_η el máximo eigenvalor de los estados η introducidos por Yang, y λ el máximo eigenvalor del sistema estudiado. Es importante recalcar que el coeficiente c es independiente de N_s pero en la red óptica es dependiente de la fracción de llenado $\rho = (N_\uparrow + N_\downarrow)/N_s$, siendo máximo en la región de llenado medio. En la figura (6-3) se grafica en el límite termodinámico el eigenvalor máximo de los estados η como función de ρ .

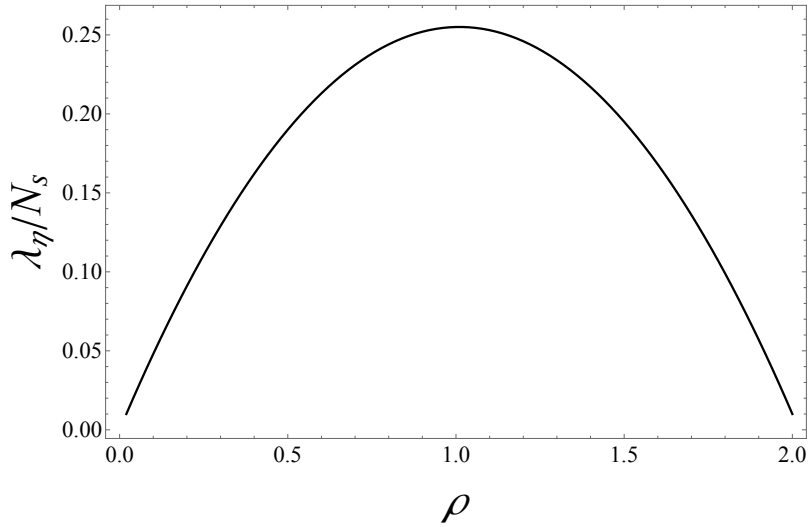


Figura 6-3: Eigenvalor máximo en el límite termodinámico como función de la fracción de llenado, para redes balanceadas $N_\uparrow = N_\downarrow$.

Por otra parte, la formación de ondas de densidad también ha sido estudiada previamente en sistemas tipo Hubbard. La inclusión de la cavidad permite incluir más de dos modos atómicos, es decir la formación de ondas de densidad con modulaciones espaciales con distintas longitudes de onda. Estas ondas de densidad son estudiadas a través del operador $\hat{D}_\sigma = \sum_{l=1}^R \hat{N}_{l,\sigma} e^{i2\pi l/R}$, donde R denota el número de modos atómicos, para $R = 2$ esta expresión se convierte en $\hat{D}_\sigma = \hat{N}_\sigma^E - \hat{N}_\sigma^O$ donde $\hat{N}_\sigma^{E/O}$

denotan operadores de número en los sitios pares e impares respectivamente. Los patrones de difracción $J_{ii} = (-1)^i$ y $J_{ii} = (1 + (-1)^i)/2$ inducen $R = 2$, creando dos modos atómicos correspondientes a sitios pares e impares. Modos $R = 3, 4, \dots$ requieren de distintos ángulos entre la cavidad y la red óptica con el haz de bombeo. Dado que el estado base puede estar en un estado tipo gato de Schrödinger, es decir, el estado base puede ser la superposición de más de un elemento de la base de Fock, se estudia el rompimiento de la simetría a través del valor de expectación de

$$\mathcal{O}_{DW} = \frac{1}{N_s^2} \langle (\sum_{\sigma} \hat{D}_{\sigma})^2 \rangle.$$

Debido al tamaño finito considerado en el presente trabajo, se verifica que dicho valor de expectación se mantenga constante para el rango de los valores de N_s explorados y no decaiga como función de N_s . Es decir, algunos parámetros de orden \mathcal{O} pueden ser distintos de cero debido al tamaño finito del sistema y no debido a un rompimiento de simetría, en particular para el orden no diagonal, y de orden de densidad como se explicará en los resultados se tomó la precaución de tomar este efecto en los diagramas de fase.

Adicionalmente se introduce el tunelaje a primeros vecinos, calculando el valor de expectación de

$$\mathcal{T} = \frac{1}{N_s} \langle \sum_{i,\sigma} (\hat{c}_{i+1,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} + \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{i+1,\sigma}) \rangle,$$

el cual se recalca **no** es un parámetro de orden.

Por otra parte, la magnetización por sitio esta definida por $\hat{m}_i = \hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}$, siendo la magnetización total $\hat{M} = \sum_i \hat{m}_i$. Dados los modos atómicos es conveniente introducir el factor de estructura definido por

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{j,l} e^{iq(j-l)} (\langle \hat{m}_j \hat{m}_l \rangle - \langle \hat{m}_j \rangle \langle \hat{m}_l \rangle),$$

siendo \vec{q} un vector en la primera zona de Brillouin. Se define $\mathcal{O}_{AFM} = S(\vec{q} = \pi)/N_s$.

Dadas las identificaciones de las fases en términos de los valores de los parámetros de orden, es conveniente resumir la notación que se utilizará para caracterizar las

citadas fases. En la tabla (6.1) se establece la notación según el parámetro cuyo valor de expectación sea no nulo y la fase de muchos cuerpos en cuestión. CDW

Cuadro 6.1: Parámetros de orden

QP/Parámetro	\mathcal{T}	\mathcal{O}_{DW}	\mathcal{O}_η	\mathcal{O}_{AFM}
SF $_\eta$	0	0	$\neq 0$	0
DW	0	$\neq 0$	0	0
CDW	$\neq 0$	$\neq 0$	0	0
AFM	0	0	0	$\neq 0$
SDW	$\neq 0$	0	0	$\neq 0$
PDW	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$	0
DF	$\neq 0$	0	0	0

denota densidad de onda de carga, SDW densidad de onda de espín, PDW denota densidad de onda de pares y DF es para fermiones degenerados (por sus siglas en inglés). Dada la simetría del problema, i.e. un sistema con espines balanceados en una dimensión, $S(q = 0) = 0$, por lo cual, el orden magnético irá siempre referido a $\mathcal{O}_{AFM} = S(q = \pi)/N_s$. Para fines de comparación, se grafican todos los parámetros de orden normalizados, \mathcal{O}_η se normaliza con respecto a los estados de Yang (6-3), por comodidad de ahora en adelante $g_{eff} = g$.

A continuación se presentan las soluciones numéricas para distinto tipo de polarización lineal de los haces de bombeo. Esto nos permite acoplar de distintas formas a la magnetización y a la densidad con la luz.

6.2. Polarización Lineal

Los átomos de Fermi en dos estados hiperfinos se encuentran en una cadena unidimensional, la cual se orienta en la dirección x . Se incide de forma perpendicular a la red óptica un haz de luz en la dirección z como se indica en la figura (6-4) el cual se encuentra polarizado en una dirección arbitraria θ en el plano $x - y$. Esto crea un perfil de intensidad de interacción efectiva luz-átomo $W_{i,j} \propto (-1)^{|i-j|} J_i J_j$. Se estudia el estado base de muchos cuerpos, inicialmente se considera luz polarizada en las direcciones $-x$ e $-y$, para posteriormente describir las fases que exhibe el estado

base a ángulos de polarización arbitrarios.

6.2.1. Polarización lineal -y: Competencia AFM vs ODLRO

A continuación se describen las fases del sistema considerando polarización lineal en la dirección y que acopla la luz y la materia de forma efectiva a través de la magnetización, $\hat{D}_y = \sum_i J_{ii} \hat{m}_i$. Bajo la suposición que las funciones de Wannier se encuentran localizadas para que la suposición $\hat{F}_\sigma \approx \hat{D}_\sigma$ se mantenga válida, el Hamiltoniano es

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}^F + \frac{g}{N_s} \sum_\sigma \hat{D}_y^2,$$

para el modelo de Fermi-Hubbard atractivo $U < 0$, se estudia la competencia entre

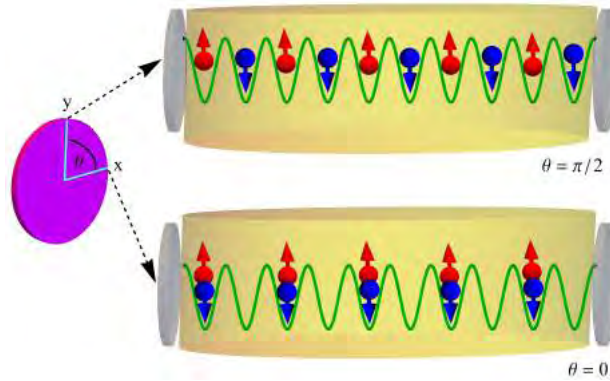


Figura 6-4: Representación esquemática del modelo. Una red óptica de dos especies hiperfinas es puesta en el interior de una cavidad cuántica. Una onda plana circularmente polarizada es polarizada linealmente en un ángulo θ arbitrario. Esta onda plana linealmente polarizada incide en la dirección $-z$ sobre la red óptica.

la formación de pares correlacionados que dan lugar a ODLRO, estados AFM y formación de DW. Con el fin de entender las fases del sistema, estudiamos el estado base del sistema, para lo cual diagonalizamos de forma exacta para $N_s = 10$ y se presenta el diagrama de fases a continuación.

El diagrama de fases presentado en la Fig:(6-5)(derecha) muestra la formación de distintas fases; SF_η , AFM, SDW y DF como función de los parámetros que definen al sistema.

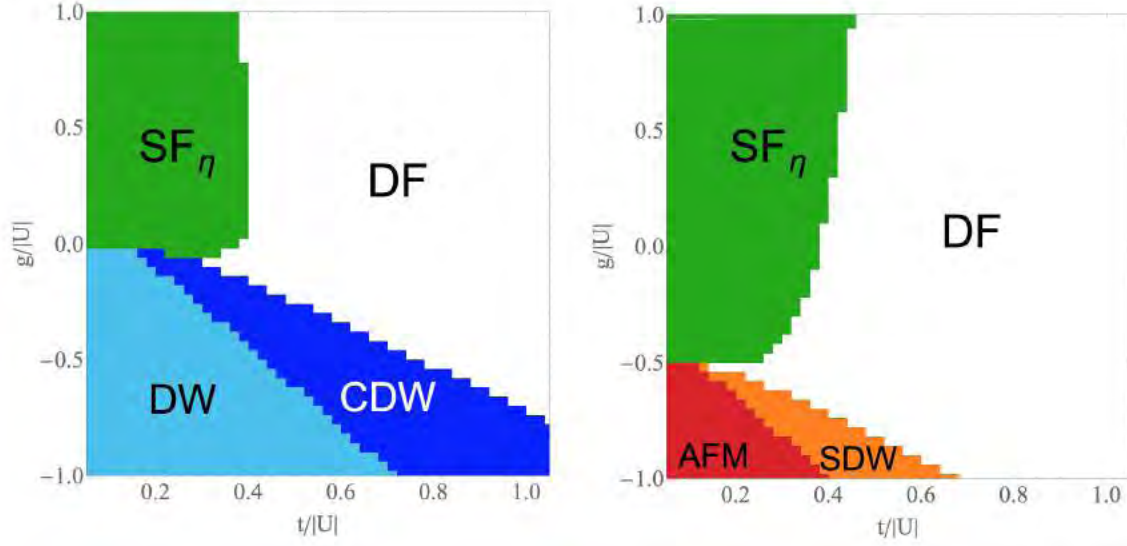


Figura 6-5: Se muestran los diagramas de fases para $N_s = 10$, y $N_\uparrow = N_\downarrow = N_s/2$. Del lado derecho se considera luz linealmente polarizada en la dirección- y , esto produce fases antiferromagnéticas y de onda de densidad, caracterizadas por un máximo en $S(q = \pi)$ el cual corresponde a un estado AFM. Por otra parte, para $g/|U| < 0$, se forma un estado superfluido. Del lado izquierdo se muestra el caso en de polarización en la dirección $-x$. En este caso se forma una onda de densidad para $g < 0$ y CDW cuando el tunelaje es relevante. A interacciones fuertes y $g > 0$ se forma un estado con ODLRO. Finalmente en el límite no interactuante persiste sólo la fase DF.

En la figura Fig:(6-5)(derecha) se distinguen esencialmente cuatro regiones, para $g < g_c$, con $g_c/|U| = -0,5$ emerge un estado AFM para $t/|U| \ll 1$, es decir en el régimen de interacciones fuertes el estado base posee orden magnético y se encuentra doblemente degenerado, por tanto, el estado base se encuentra en una superposición tipo gato de Schrödinger

$$|GS\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, \dots\rangle + |\downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, \dots\rangle),$$

compuesto por los dos estados de Néel denotados arriba. Es interesante hacer notar la competencia entre la interacción atractiva U de corto alcance con la interacción mediada por los fotones de alcance infinito, la primera promueve la formación de estados de pares, mientras la segunda tiende a inducir orden magnético, debido a esta competencia, el sistema forma presenta orden magnético a $g_c < -0,5$ en lugar de $g_c < 0$. Cuando $t/|U|$ aumenta, el orden magnético persiste con energía cinética no

nula, dando lugar a la formación de estados de SDW.

Cuando la interacción $g/|U| > -0,5$ se forman pares con orden no diagonal en régimen de interacciones fuertes $t/|U| \ll 1$, en este límite fuertemente interactuante, es posible mostrar numéricamente que este orden permanece en el límite termodinámico. Mientras que fuera de este límite el orden no diagonal se desvanece, cuando $t/|U|$ aumenta. En este régimen débilmente interactuante se forma un gas degenerado de Fermi con todos los parámetros de orden nulos.

En la figura (6-6) se muestran los parámetros de orden como función de $g/|U|$ y $t/|U|$ a cortes constantes del segundo y primero respectivamente. En la fila superior se muestran los parámetros de orden cuando para valores de $t/|U| = 0; 0,25; 0,5$, y $0,75$ fijos, de izquierda a derecha respectivamente. Para interacciones fuertes, se observa que el estado AFM toma lugar a $g/|U| < -0,5$, mientras para $g/|U| > -0,5$ se forma un estado con orden no diagonal. Es importante hacer notar que aunque el parámetro de orden $O_{DW} \neq 0$ no hay formación de onda de densidad, este parámetro es distinto de cero debido al tamaño finito del sistema. Al disminuir la intensidad de la interacción $|U|/t$, se observa que la amplitud del orden magnético disminuye.

Por su parte, a cortes de $t/|U|$ a $g/|U| = -1; 0,5; 0$ y $0,5$ constantes, en la fila inferior de la figura (6-6), se observa como el estado magnético disminuye con las excitaciones inducidas por el tunelaje que tiende a romper el estado AFM.

6.2.2. Polarización lineal $-x$: Competencia DW vs ODLRO

A continuación se presenta el estudio del diagrama de fases cuando la luz de prueba esta polarizada en la dirección x , el Hamiltoniano acopla ahora los modos de densidad, siendo

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}^F + \frac{g_{eff}}{N_s} \sum_{\sigma} \hat{D}_x^2,$$

con $\hat{D}_x = \sum_i J_i \hat{\rho}_i$.

La figura (6-5)(izquierda) muestra el diagrama de fases para la polarización x . Se observa que emergen fases de DW, CDW, SF_{η} y gas degenerado de Fermi. A

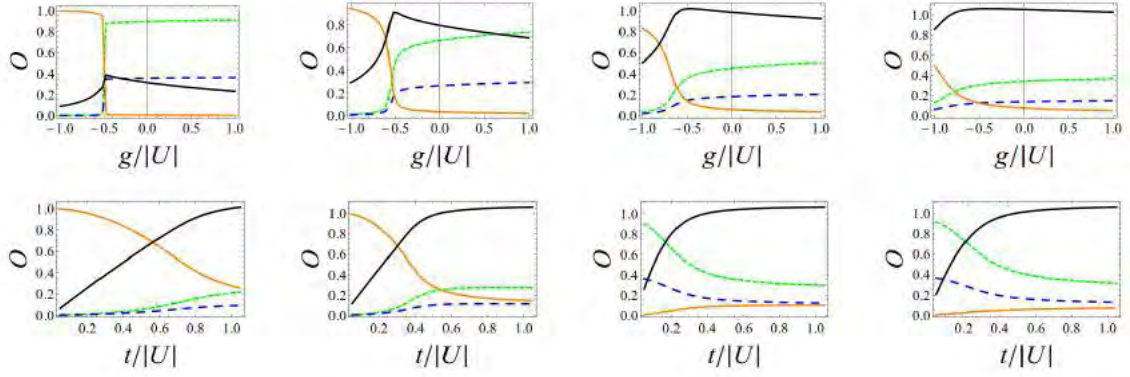


Figura 6-6: Para polarización en $-y$, se muestra en el renglón superior cortes a t constantes como función del cociente $g/|U|$, se presenta $t/|U| = 0; 0,25; 0,5; 0,75$ (De izquierda a derecha). En el renglón inferior se presentan los parámetros como función de $t/|U|$ a $g/|U| = -1; 0,5; 0; 0,5$ (De izquierda a derecha). \mathcal{T} (negro), \mathcal{O}_η (verde), \mathcal{O}_{AFM} (azul) y \mathcal{O}_{DW} (naranja). En el renglón superior se observa que la fase de $\mathcal{O}_{AFM}(\pi)$ a $t/|U|$ pequeño domina cuando $g/|U| < -0,5$. Cuando $g/|U| > -0,5$ se desvanece dicha fase y da lugar a estados con ODLRO. Por su parte, en el renglón inferior, se observa que independientemente del signo de g , las interacciones débiles $t/|U| \approx 1$ destruyen todas las fases.

diferencia del diagrama de fases para la polarización y , para esta polarización las fases inducidas por la interacción de corto alcance U , y la interacción de largo alcance g , ambas tienden a formar pares. Sin embargo, la interacción mediada por los fotones g predispone a romper la simetría translacional, la cual en el régimen de interacciones fuertes $t/|U| \ll 1$ se rompe cuando $g < 0$. En éste régimen fuertemente interactuante, el estado base se encuentra doblemente degenerado y es de la forma

$$|GS\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\downarrow, 0, \uparrow\downarrow, 0, \uparrow\downarrow, 0, \dots\rangle + |0, \uparrow\downarrow, 0, \uparrow\downarrow, 0, \uparrow\downarrow, 0, \dots\rangle),$$

dicho estado aunque esta formado por pares no presenta orden no diagonal, es inmediato mostrar que la matriz de densidad reducida de dos cuerpos, tiene elementos idénticos a cero fuera de la diagonal, así mismo, en este régimen fuertemente interactuante, el tunelaje tiende a cero. Mientras al aumentar el cociente $t/|U|$ se forma una fase de CDW. La matriz de densidad reducida de dos cuerpos en este límite tiene como eigenvalor máximo $\lambda_{max} = 0,5$ independientemente de la dimensión del sistema, por lo cual, el cociente $\lambda_{max}/N_s \rightarrow 0$ si $N_s \gg 1$. Con respecto a este valor mínimo, donde se forman pares pero sin orden no-diagonal se interpretó la fase ODLRO.

Cuando $g/|U| > 0$ el estado base del sistema esta compuesto de todos los elementos de la base de Fock compuesto por pares con $\langle \hat{D}_x \rangle = 0$, en el límite $t/|U| \ll 1$ es posible mostrar que $\mathcal{O}_\eta = 0,15/0,25 \neq 0$ independiente del número de sitios de la cadena, por lo cual, existe ODLRO. Para esta polarización, el AFM es idénticamente cero.

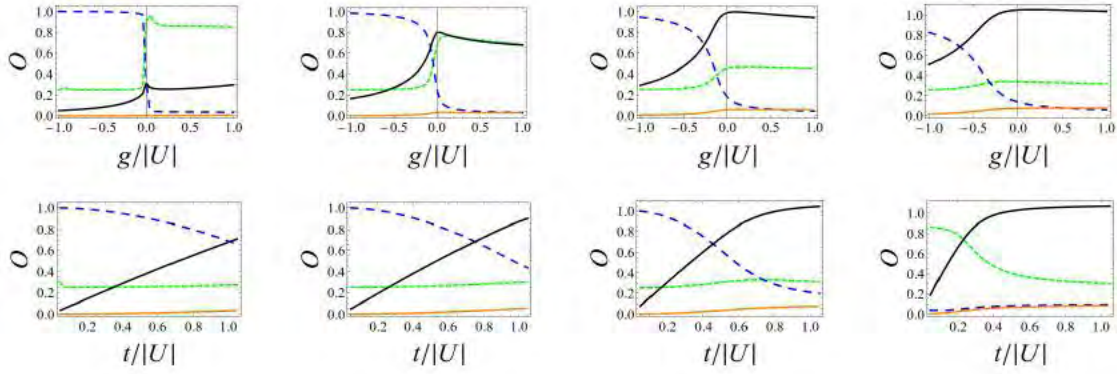


Figura 6-7: Para polarización en $-x$, se muestra en la fila superior cortes a t constantes como función del cociente $g/|U|$, se presenta $t/|U| = 0; 0,25; 0,5$ y $0,75$ (De izquierda a derecha). En la fila inferior se presentan los parámetros como función de $t/|U|$ a $g/|U| = -1; 0,5; 0$ y $0,5$ (De izquierda a derecha). \mathcal{T} (negro), \mathcal{O}_η (verde), \mathcal{O}_{AFM} (azul) y \mathcal{O}_{DW} (naranja). En la fila superior se observa que la fase de \mathcal{O}_{DW} a $t/|U|$ pequeño domina cuando $g < 0$. Cuando $g > 0$ se da lugar a estados con ODLRO. De igual forma que para polarización $-y$ en la fila inferior, se observa que independientemente del signo de g , las interacciones débiles $t/|U| \approx 1$ destruyen todas las fases.

En la figura (6-7) se muestran los parámetros de orden a $t/|U|$ y $g/|U|$ constantes, en la columna superior e inferior respectivamente. En el primer caso se considera $t/|U| = 0; 0,25; 0,5$ y $0,75$ (de izquierda a derecha), se observa la transición de DW a SF_η es a $g = 0$. Para $g < 0$ prevalecen dominios en la densidad tipo DW, y para valores más grandes de $t/|U|$, la transición de DW a SF_η se suaviza. Por su parte en la fila inferior, se muestra como el orden en la densidad es no nulo aún cuando existe tunelaje, es decir, se forma un estado tipo CDW.

6.2.3. Polarización lineal $-\theta$

La presente sección tiene como objetivo demostrar como las fases cuánticas emergentes pueden ser controladas a través de la polarización del haz de prueba. El Ha-

miltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \hat{H}^F + \frac{g}{2} \left(\hat{D}_{cp}^{\dagger\theta} \hat{D}_{pc}^{\theta} + \hat{D}_{cp}^{\theta} \hat{D}_{pc}^{\dagger\theta} \right), \quad (6.15)$$

con $\theta \in [0, \pi/2]$, es decir, de polarización $-x$ ($\theta = 0$) a polarización $-y$ ($\theta = \pi/2$), manteniendo fijo $t/|U|$. Debido a que las inestabilidades de carga y espín se presentan para $g/|U| < 0$ nos enfocamos en dicha región del espacio de parámetros.

En la figura (6-8) se presentan los diagramas de fases para los cocientes $t/|U| = 0,1; 0,25$ y $0,5$ (de izquierda a derecha), para $N_s = 10$ para fracción de llenado medio.

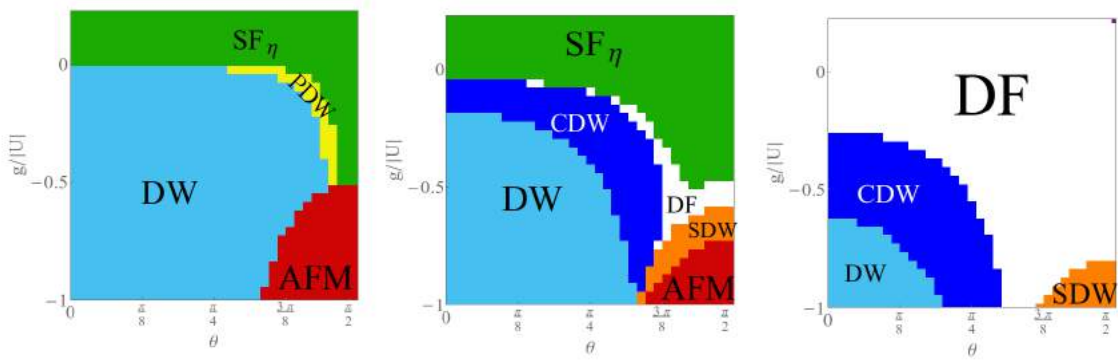


Figura 6-8: Diagrama de fases a $t/|U| = 0,1, 0,25$ y $0,5$ (izquierda a derecha) para $N_s = 10$ y $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 5$. Para $g/|U| > 0$ se observa sólo ODLRO para $t/|U| = 0,25, 0,5$ independientemente del ángulo de polarización de la luz. Para $g/|U| < 0$, existen fases DW, AFM(π), PDW para $t/|U| = 0,1$. Mientras para $t/|U| = 0,25$ tienen lugar fases tipo DW, AFM y coexistencia tipo CDW, SDW y PDW.

Es interesante hacer notar nuevamente la competencia entre las interacciones de corto y largo alcance, ahora en conjunto con la polarización del haz de prueba. En el límite en el cual $g/|U| \gg 1$ y $t/|U| \ll 1$ (6-8)(izquierda) la transición de $DW \leftrightarrow AFM$ tiene lugar a $\theta = \pi/4$, sin embargo, como se puede apreciar en el diagrama de fases, la transición $DW \leftrightarrow AFM$ para valores intermedios del cociente $g/|U|$ es distinto de $\pi/4$, y tiende a $\theta = \pi/2$ cuando $g/|U| \rightarrow -0,5$, es decir, se forma un domo que se desvanece debido a la competencia antes mencionada entre la tendencia a aparearse debido a U , y el estado AFM debido a g . En este límite, existe una región en la cual coexiste la fase SF_{η} y el orden DW. Esto se debe a que la fase AFM se forma para valores de $g/|U| < -0,5$, y cerca de este valor se forma a ángulos próximos a $\theta = \pi/2$, dando

lugar a una región intermedia $0 > g/|U| > g_c/|U$ y $\pi/4 < \theta < \pi/2$ en la cual hay el término de interacción local U forma pares, y la interacción efectiva luz-materia g , rompe la invarianza traslacional.

Para $t/|U| = 0,25$ en fig:(6-8)(centro) el tunelaje se vuelve relevante dando lugar a la formación de ondas de carga CDW, y de espín SDW. Es posible apreciar que el *domo* de AFM se forma para $g/|U| < -0,5$, es decir, el domo se hace más pequeño, mientras que la invarianza traslacional se rompe para $g < 0$.

En el último diagrama de fases mostrado en Fig:(6-8)(derecha) se muestra que el término de tunelaje inhibe para interacciones débiles las fases, en particular impide la formación de estados SF_η , mientras que el rompimiento de la simetría traslacional y el orden magnético, se da para valores de $|g|$ mas grandes.

Para ejemplificar la coexistencia de estas fases, presentamos cortes a distintos valores del cociente $g/|U|$, $g/|U| = -1; -0,8; -0,53$, y $-0,3$. En la figura (6-9) se muestran en el renglón superior para $t/|U| = 0,1$ los parámetros de orden como función de θ , para $g/|U|$, en el orden antes mencionado de izquierda a derecha. Mientras en el renglón superior se grafica para $t/|U| = 0,25$.

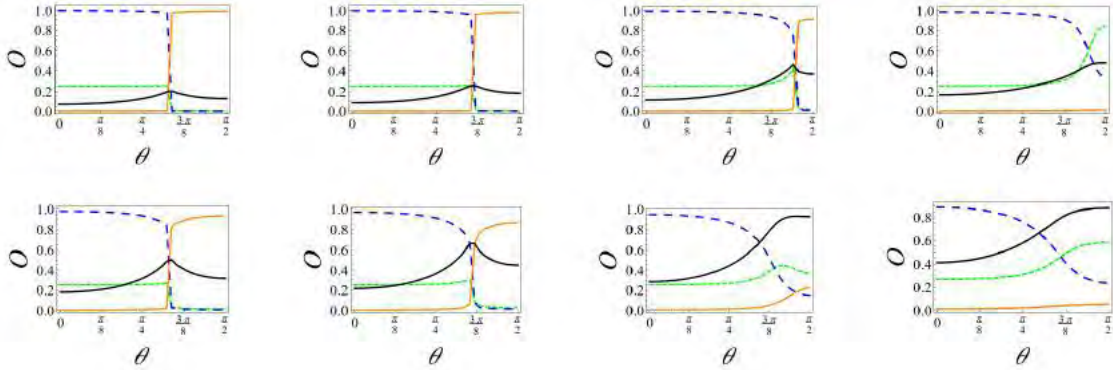


Figura 6-9: Parámetros para distintas polarizaciones lineales considerando $g/|U| = -1, -0,8, -0,53$, y $-0,3$. En el renglón superior para $t/|U| = 0,1$ los parámetros de orden como función de θ , para $g/|U|$ en el orden mencionado de izquierda a derecha. Mientras en el renglón superior se grafica para $t/|U| = 0,25$.

En la Fig:(6-9) se observa la competencia entre las fases AFM y DW como función del ángulo de polarización, estas fases no coexisten en ninguna región del diagrama de fases, para $t/|U| = 0,1$ (renglón superior) el ángulo para el cual el sistema cambia de

DW→AFM, es menor a $\theta = \pi/3$ para $g/|U| = -1$, cuando $g/|U| \rightarrow -0,5$, el ángulo para el cual se da la transición DW→AFM crece $\theta \rightarrow \pi/2$, para $0 > g/|U| > -0,5$ solo persiste la onda de densidad y no hay estados AFM.

6.2.4. Fermi-Hubbard Dopado

Se estudian los diagramas de fases manteniendo fijo el cociente $t/|U| = 0,1$ y $0,25$, para distintas fracciones de llenado, variando la polarización del haz de bombeo, así como la intensidad $g/|U|$.

A continuación se presenta el diagrama de fases para distintas fracciones de llenado, en el límite fuertemente interactuante $g/|U| \gg 1$ la fase de onda de densidad y orden magnético dominan. Para fracciones de dopaje distintas a llenado medio se forman dominios de DW o AFM, con pares o *huecos* actuando como paredes de dicho dominio, donde el dominio DW/AFM se puede localizar en cualquier sitio de la cadena, por ejemplo, si el sistema se dopa con dos huecos, el estado base esta compuesto por elementos de la base de Fock, con un dominio magnético o de densidad de la forma $|0, 0, |AFM\rangle$ o $|0, 0, |DW\rangle$, donde el dominio $|AFM/DW\rangle$ se mueve sobre los 10 sitios de la cadena, dando lugar a un estado base con N_s estados degenerados. Mientras para distintas fracciones de llenado, debido a que la interacción es global, el estado base se conforma de dominios magnéticos o de densidad rodeados de huecos.

$$\begin{aligned}
&|0, 0, 0, \dots |AFM|_1, 0, 0, \dots, |AFM|_2, 0\dots\rangle \\
&|0, 0, 0, \dots |DW|_1, 0, 0, \dots |DW|_2, 0\dots\rangle, \tag{6.16}
\end{aligned}$$

en este caso la localización de los dominios magnéticos y de densidad esta restringida a extremizar el término del Hamiltoniano de la interacción efectiva luz-materia. Por ejemplo, si $N_\uparrow = N_\downarrow = 2$, se pueden formar dominios magnéticos de longitud 1, 2, 3

y 4, de la forma

$$\begin{aligned}
|GS_1\rangle &= |\uparrow, 0, \uparrow, 0, 0, \downarrow, 0, \downarrow, 0, 0\rangle \\
|GS_2\rangle &= |\uparrow, \downarrow, 0, 0, 0, 0, \uparrow, \downarrow, 0, 0\rangle \\
|GS_3\rangle &= |\uparrow, \downarrow, \uparrow, 0, 0, 0, 0, \downarrow, 0, 0\rangle \\
|GS_4\rangle &= |\uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow, 0, 0, 0, 0, 0, 0\rangle,
\end{aligned}$$

la posición de cada dominio magnético esta correlacionada con el resto de los dominios magnéticos debido a la interacción global, a diferencia de otros modelos con interacción de corto alcance donde los dominios magnéticos son del tipo $|GS_4\rangle$, este sistema exhibe orden magnético de largo alcance, el cual permite la formación de dominios magnéticos de distintas longitudes correlacionados. Además, en contraste con el modelo de Hubbard estándar repulsivo en el régimen fuertemente interactuante, lejos de fracción de llenado medio, el orden magnético esta esencialmente inhibido, en el modelo estudiado el orden magnético prevalece.

Para la fase de DW, debido a que los estados de Fock que componen la base están conformados por pares, se pronuncia la formación de ODLRO, es decir, a diferencia del estado base a fracción de llenado medio donde la matriz de densidad reducida de dos cuerpos tiene elementos fuera de la diagonal idénticamente cero, dopar al sistema, junto con la interacción de largo alcance promueve la formación de estados de parejas con orden no-diagonal de largo alcance.

Para $g/|U| \propto 1$ las fases compiten, dando lugar a fases tipo PDW, donde los pares además de estar modulados en la densidad adquieren una correlación cuyo alcance es proporcional a la longitud de la cadena.

Se muestra el diagrama de fases para el sistema dopado con huecos, para $\rho = 1 - \frac{4}{N_s}$ se observa que debido al carácter global de la interacción, el rompimiento de la simetría traslacional es de largo alcance, es decir, el estado de DW es *global*, no esta compuesto por un sólo bloque, sino se puede romper en varios dominios, generando ODLRO, el cual en coexistencia con el rompimiento de la simetría traslacional da lugar a PDW. El orden magnético está compuesto por la superposición de todos los estados que

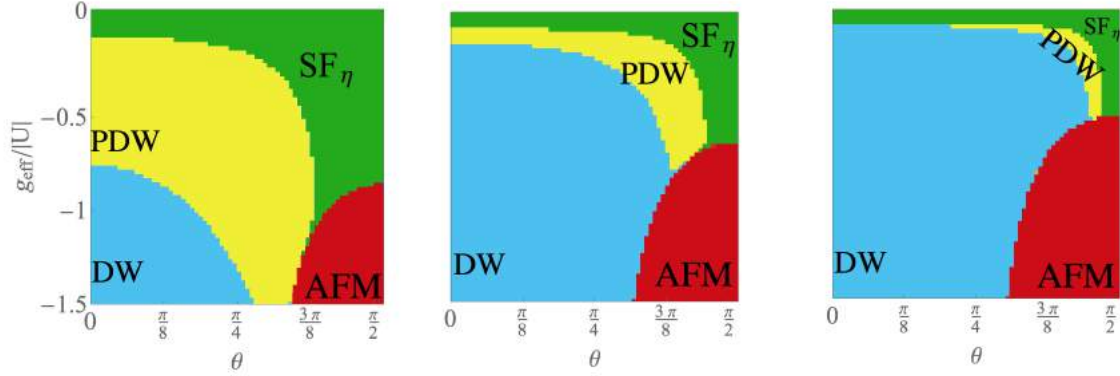


Figura 6-10: diagramas de fases a $t/|U| = 0,1$ para $N_s = 10$ y $N_\uparrow = N_\downarrow$.

extremizan el valor de expectación del operador $D_\theta^\dagger D_\theta + Hc$ para cada función de llenado. El estado base que maximiza dicho operador esta degenerado y compuesto por estados con distintos dominios magnéticos de largo alcance.

6.2.5. En ruta a superconductividad-HighTc

El extenso diagrama de fases al que el sistema puede acceder a través de la polarización del haz de bombeo, así como mediante la desintonía de la luz de la frecuencia del mismo haz con la frecuencia atómica, la cual controla la intensidad g , permiten usar este modelo como un sistema para simular las fases de los superconductores a altas temperaturas a $T = 0$. Es preciso aclarar que no es el objetivo describir la fases de los superconductores a altas temperaturas, sino la motivación esencial, es construir un modelo dentro de la materia ultrafría en el cual a través de factores externos sea posible estudiar la competencia/relación entre las distintas fases comunes al modelo de la materia ultrafría y el modelo original de la materia condensada [81, 205].

En la figura (6-11) se muestran dos esquemas en los cuales las fases cuánticas pueden ser accesadas a demanda al dopar el sistema y simultáneamente orientar apropiadamente el polarizador de la luz de bombeo. En el primer esquema (izquierda) se produce una fase AFM a llenado medio al colocar el polarizador a $\pi/2$, mientras al dopar ligeramente el sistema a $\rho = 1 \pm \frac{2}{N_s}$ se coloca el polarizador a $3\pi/8$ con respecto al eje x , esto induce la formación de pares junto con un orden no diagonal,

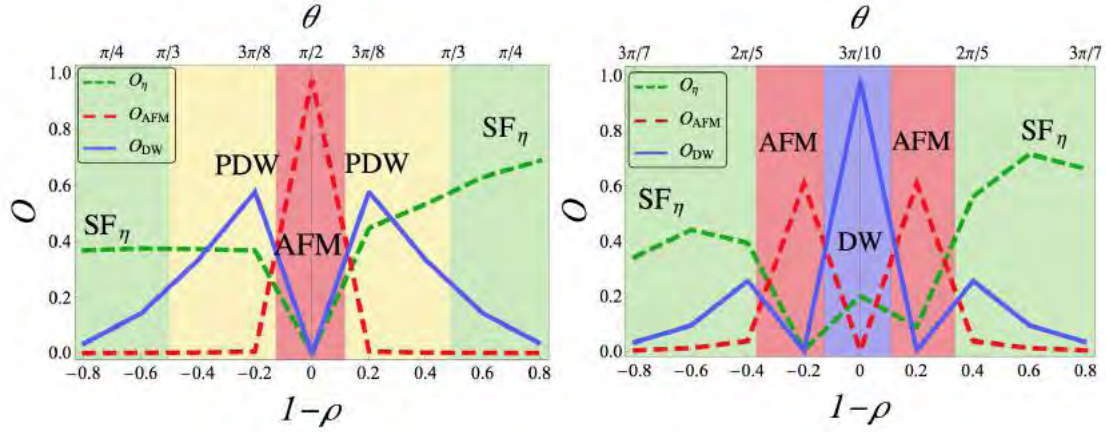


Figura 6-11: Parámetros de orden a $t/|U| = 0,1$, para $N_s = 10$ y $N_\uparrow = N_\downarrow$. Se presentan los parámetros de orden como función del ángulo de polarización θ y la fracción de llenado.

posteriormente lejos de llenado medio, el estado del sistema es del tipo SF_η . Este esquema se obtiene al fijar $t/|U| = 0,1$ y $g/|U| = -0,75$, y es posible transitar de $SF_\eta \rightarrow PDW \rightarrow AFM \rightarrow PDW \rightarrow SF_\eta$, el polarizador se orienta como función del dopaje como $\theta = \frac{\pi}{2}(1 - \frac{\sqrt{n}}{2})$, siendo $n = 1 - \rho$.

Por otra parte, al modificar la polarización del haz de prueba para cada fracción de llenado, es posible invertir el orden en el cual emergen las fases cuánticas. Por ejemplo, al fijar para llenado medio el polarizador a $3\pi/10$ el estado base es una onda de densidad, posteriormente al dopar al sistema emerge un orden magnético, y lejos de llenado medio se forma ODLRO. Para esta realización se fija $t/|U| = 0,1$ y $g/|U| = -1,0$, y el sistema fluye de $SF_\eta \rightarrow AFM \rightarrow DW \rightarrow AFM \rightarrow SF_\eta$ al orientar el polarizador como función del dopaje como

$$\theta = \frac{3\pi}{10}(1 + \frac{\sqrt{n}}{2}),$$

es decir, es posible acceder a las fases de manera arbitraria al dopar y conjuntamente polarizar la luz de bombeo apropiadamente, esto es relevante, pues permite estudiar cómo se entrelazan los distintos ordenes magnéticos, de densidad y no-diagonal en modelos tipo Hubbard, y puede ser el primer paso, para construir en un sistema bidimensional un verdadero simulador cuántico de las fases de los superconductores

de altas temperaturas.

A continuación, en la figura (6-12) se muestra otro par de esquemas para $t/|U| = 0,25$. Del lado izquierdo se orienta el polarizador como función del dopaje $\theta = \frac{\pi}{2}(1 - \sqrt{n})$, manteniendo fijo $g/|U| = -0,75$ mientras del lado derecho se muestra el esquema para $\theta = \frac{3\pi}{10}(1 + \sqrt{n})$, (módulo $\pi/2$) para $g/|U| = -1$. Del lado izquierdo se forma una onda de espín SDW a llenado medio, para posteriormente dar lugar a la formación de onda de densidad en coexistencia con orden no diagonal, finalmente se forma un estado tipo SF_η lejos de fracción de llenado medio. Para el segundo esquema, al fijar $g/|U| = -1$ y mover la orientación de formación del polarizador es posible formar una onda de carga CDW a llenado medio, y un estado con orden magnético cerca de llenado medio. Lejos de llenado medio, se forma un gas degenerado de Fermi.

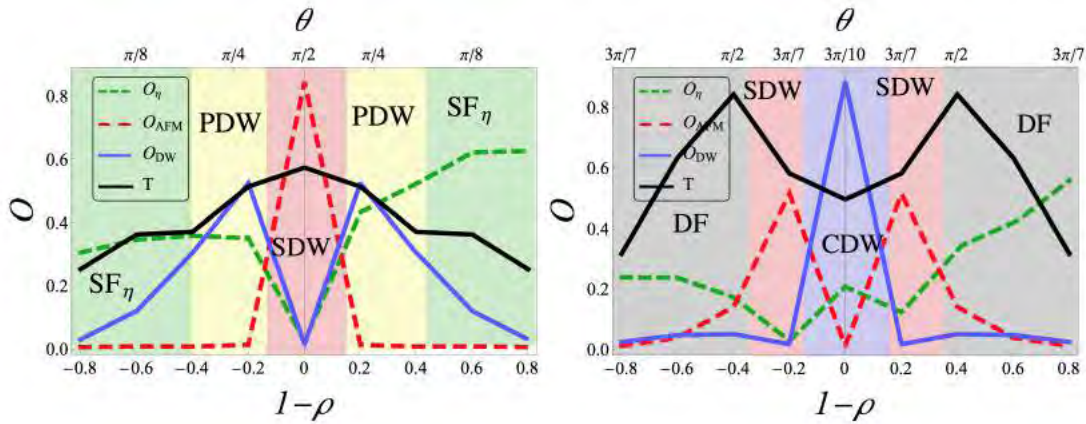


Figura 6-12: Parámetros de orden a $t/|U| = 0,25$, para $N_s = 10$ y $N_\uparrow = N_\downarrow$. Se presentan los parámetros de orden como función del ángulo de polarización θ y la fracción de llenado.

Las figuras (6-11) y (6-12) muestran que es posible controlar la emergencia de las fases cuánticas como función de la polarización de la luz de bombeo. Es importante resaltar, que para acceder a las distintas fases, una vez que el potencial óptico es creado y que la interacción local U se sintoniza atractiva, no es necesario usar resonancias de Feshbach para inducir las fases de orden magnético y de densidad, pues estas se controlan a través de un parámetro completamente manejable como lo es la orientación del polarizador, más aún, este parámetro es clásico y completamente externo a la configuración experimental típica en los gases atómicos ultrafríos.

6.3. Conclusiones

Se estudió una cadena unidimensional de dos componentes hiperfinas de fermiones en el interior de una cavidad cuántica. Se demuestra que la polarización participa de forma crucial en las fases que exhibe el sistema. En particular se estudian las fases presentes en el sistema cuando el haz de bombeo esta polarizado linealmente y es una onda plana. Para polarización lineal en la dirección $-x$ a fracción de llenado medio el sistema exhibe ondas de densidad y ODLRO en el régimen de interacciones fuertes dependiendo de la desintonía entre las frecuencias atómicas y de la cavidad. Por su parte, al incidir luz polarizada en la dirección $-y$, es posible formar estados antiferromagnéticos y de ondas de espín, así como de orden no-diagonal de largo alcance.

Es interesante notar que al modificar el ángulo de polarización entre $[0, \pi/2]$, las fases AFM y DW compiten y dan lugar a diagramas de fases con mayor estructura. Al dopar al sistema, se forman dominios magnéticos y densidad de largo alcance debido al carácter global de la interacción. Los dominios de densidad, al promover la formación de pares junto con la interacción atractiva U local, da lugar a orden no diagonal, siendo éste el precursor de la fase superconductora en sistemas bidimensionales a temperatura finita.

Finalmente se mostró un esquema en el cual se plantea simular el diagrama de fases de cupratos superconductores a $T = 0$, como resultado de variar el ángulo de polarización de la luz de bombeo y las fracciones de llenado. Este hecho es relevante en el contexto de la superconductividad a altas temperaturas, en donde es del conocimiento que la interacción atractiva entre electrones no es debido a excitaciones fonónicas. Dicho en otras palabras, el modelo aquí presentado permite explorar otro tipo de mecanismos que dan lugar a fases cualitativamente similares a la de los cupratos. Debido al carácter unidimensional del sistema y a las fuertes correlaciones, se diagonalizó de forma exacta el Hamiltoniano, bajo la limitación que el espacio de Hilbert crece como 4^{N_s} , por lo cual, la longitud de la cadena esta acotada por la capacidad computacional.

Dentro del contexto experimental, la propuesta es relevante y factible. Recientemente se ha reportado la realización de modelos uni- y bi-dimensionales de fermiones en redes ópticas. El arreglo uni-dimensional experimental para sistemas fermiónicos consiste de átomos de ${}^6\text{Li}$ en el régimen fuertemente interactuante (repulsivo), confinados en redes ópticas con constante de red $a = 1,16\mu$ (superlattices) y del orden de $N_s = 7 - 15$ sitios en la cadena, y en redes ópticas bidimensionales con constante de red $a = 569\text{nm}$. La resonancia de Feshbach del ${}^6\text{Li}$ permite que la longitud de dispersión en 3D sea negativa, y por tanto tener una interacción atractiva en una dimensión *arbitrariamente* grande. Por su parte, dentro del control de gases cuánticos en el interior de cavidades cuánticas, sistemas bosónicos (${}^{87}\text{Rb}$) han sido confinados en redes ópticas y puestas en el interior de cavidad cuánticas, en estos sistemas la desintonía $\Delta_c = \omega_p - \omega_c$ puede ser producida en el rango $-70\text{MHz} > \Delta_c/2\pi > 20\text{MHz}$, $\kappa/2\pi \approx 2\text{MHz}$ al menos un orden de magnitud más pequeño que la magnitud de la desintonía de la cavidad con la frecuencia de prueba. Dada la versatilidad y el control sobre los parámetros de la cavidad, y las redes ópticas, permiten sugerir que este modelo es factible, y motiva a la extensión teórica y experimental de la propuesta.

Capítulo 7

Conclusiones y Perspectivas

En la presente tesis se estudian las fases exhibidas por sistemas fermiónicos confinados en redes ópticas con interacciones de largo alcance. En particular, se investigan dos sistemas, el primero un gas bidimensional de Fermi confinado en una red óptica con interacciones dipolares de alcance finito. Adicionalmente, se estudian las fases en sistemas con interacciones de alcance infinito mediadas por intercambio de un fotón.

Respecto al gas bidimensional de Fermi con interacciones dipolares en bicapas, se estudió el problema de dos y cuatro cuerpos enmarcado en el contexto de muchos cuerpos. Es decir, se estudió el problema de la formación de pares de Cooper en presencia de un mar de Fermi, en dicho análisis se manifestaron las intrínsecas diferencias entre el problema de dispersión de dos cuerpos en un ambiente homogéneo y la dispersión en una red óptica, la cual acopla el momento de centro de masa a las ecuaciones que dictan la formación de pares de Cooper. Los pares de Cooper predichos tienen momento de centro de masa nulo cuando las poblaciones entre capas se encuentran balanceadas, y son los precursores de los estados FFLO cuando hay desbalance entre las poblaciones. La interacción interplanar dada la bidimensionalidad del sistema soporta estados ligados que pueden dar lugar a la formación de dímeros, esto es, pares de fermiones, que a diferencia de los estados de Cooper, la función de onda que describe al par decae exponencialmente como función de la distancia que los separa. Estos estados se abordaron desde un contexto variacional, en el cual se comparó la energía de los estados de Cooper con la propuesta variacional, para determinar el estado base

del problema de dos cuerpos. Finalmente resolviendo el problema de cuatro cuerpos, considerando la interacción dímero-dímero en la aproximación de mancuerna rígida se obtuvo una expresión cerrada para la interacción dímero-dímero, esto da pie a poder escribir el Hamiltoniano de muchos cuerpos en la región BEC.

Desde el contexto de muchos cuerpos se estudió al gas bidimensional de Fermi con interacciones dipolares en bicapas. En el límite de interacciones débiles, y fuera de la región de llenado medio se estudiaron las fases superfluidas que despliega el sistema. Con esta motivación, desde el contexto de teoría cuántica de campos se escribió la acción de muchos cuerpos y a través de la transformación de Hubbard-Stratonovich se introdujo el campo efectivo bosónico que da lugar a los pares de Cooper, y a través de una transformación de norma, este mismo campo permitió determinar la fracción del superfluido en el contexto de la teoría de Ginzburg-Landau. En el límite de interacciones débiles la fase superfluida es del tipo BCS, mientras en la región de interacciones fuertes, al incluir la teoría BKT, se muestra que la descripción del superfluido BCS es incorrecta, debido a que se forman pares de dímeros, tal y como se predice desde el contexto de dos cuerpos. En este límite, la temperatura BCS corresponde a la temperatura de disociación de las moléculas, mientras que la temperatura BKT corresponde a la temperatura crítica del superfluido. Se muestra que la descripción del enfoque de muchos cuerpos esta en acuerdo con la descripción de dos cuerpos.

Cerca de la región de llenado medio, aunado a la fase superfluida, el gas bidimensional de Fermi con interacciones dipolares en bicapas exhibe otro tipo de inestabilidades debido a la posible formación de densidades ondas. Estas densidades de onda se estudiaron dentro del contexto de campo medio inhomogéneo, y mostraron emerger cuando la interacción intraplanar se vuelve comparable con la interacción atractiva intraplanar. Con la finalidad de incluir un modelo experimentalmente realista, se incluyó la presencia de la trampa armónica en el estudio del sistema a nivel de aproximación de densidad local. En las regiones en la que compiten las interacciones inter- e intra-planar, se encontró una región en la cual la fase superfluida coexiste con un estado de densidad de onda en una región amplia en el centro de la trampa

armónica, esta fase es denominada como fase supersólida. Debido a la presencia de la trampa armónica, la densidad tiene una distribución espacial parabólica alrededor del mínimo del potencial armónico, esto permite la coexistencia de fases en el centro de la trampa, pero además da lugar a separación de fases, debido a que en las regiones donde la densidad cae y no es lo suficientemente cercana a la fracción de llenado medio no soporta onda densidad, entonces da lugar a la formación de un anillo superfluido que tiende a rodear al supersólido. Finalmente, cuando la interacción repulsiva domina, el estado de onda de densidad se vuelve predominante y no da lugar a coexistencia con la fase superfluida, formandose un perfil de densidad de tablero de ajedrez en el centro de la trampa, rodeado por un superfluido en las zonas de baja densidad. Vale la pena resaltar que si bien aun se discute la plausibilidad y caracterización de la fase supersólida, el modelo aquí propuesto es una ruta más encaminada a probar la existencia de dicha fase.

El gas dipolar de Fermi confinado en una bicapa de redes ópticas ofrece la oportunidad de estudiar teórica-y experimentalmente fases inexploradas en el contexto de la física atómica y es un excelente candidato para fines de simulación cuántica de materia condensada. La temperatura crítica predicha para los estados superfluidos y supersólidos es un orden de magnitud más pequeños que la temperatura en la cual se realizan los experimentos con gases de Fermi, sin embargo, existe un interés creciente en la comunidad de átomos ultrafríos de producir los primeros superfluidos fermiónicos moleculares en trampas armónicas, así como confinados en redes ópticas, por lo cual, se considera factible la propuesta teórica.

En relación con el estudio del diagrama de fases de la cadena unidimensional dentro de la cavidad cuántica, se consideró una mezcla de dos especies hiperfinas de fermiones. Se demostró que la polarización de la luz juega un papel crucial en las fases que exhibe el sistema, en particular para polarización lineal, se demostró que es posible controlar las fases antiferromagnéticas y de onda de densidad modificando el ángulo de polarización de la luz. Debido a la dimensionalidad del sistema, las soluciones al estado base del Hamiltoniano se encontraron a través de diagonalización exacta, considerando el modelo estándar de Fermi-Hubbard atractivo y la interacción

luz-materia en el límite adiabático.

A temperatura cero, se estudiaron las fases de orden no-diagonal de largo alcance ODLRO, ondas de densidad DW, y orden magnético AFM, así como las ondas de espín SDW, ondas de carga CDW y ondas de pares PDW, o gas degenerado de Fermi DF. Para polarización lineal en dirección $-x$, el diagrama fase exhibe a interacciones fuertes ODLRO y DW, las cuales se convierten CDW y DF respectivamente cuando el tunelaje crece $t/|U|$. Por su parte, la polarización en y exhibe ODLRO, y orden magnético AFM. Al variar adiabáticamente el ángulo de polarización las fases AFM y DW compiten, y pueden dar lugar a estados donde ODLRO y DW coexisten.

La estructura de los diagramas fase como función del ángulo de polarización y la interacción $g/|U|$ adquiere interés debido a que mediante la variación del polarizador de la luz de bombeo es posible estudiar la competencia entre fases relevantes en sistemas de materia condensada, como lo es la conexión entre fases tipo AFM \leftrightarrow SDW \leftrightarrow PDW \leftrightarrow SF donde la relación entre dichas fases es aún un enigma en superconductores a altas temperaturas. Con esta motivación se esbozó un esquema para simular el diagrama fase de dichos superconductores a $T = 0$, en dicho esquema a través de la polarización y la fracción de llenado es posible reproducir cualitativamente el diagrama fase a $T = 0$.

Es necesario precisar, que aunque mediante estos sistemas es posible simular fases de la materia condensada, y en particular de los superconductores a altas temperaturas, el estudio realizado es un primer esfuerzo por entender los enmarañados vínculos entre las fases presentes en dichos cupratos. En principio, aunque el modelo inicial no comparte elementos esenciales que se conocen en los cupratos, la motivación del estudio se enfocó en analizar mecanismos alternos que pueden dar lugar a las distintas fases de interés. El panorama para la extensión del modelo estudiado a redes ópticas bidimensional es estimulante, tanto desde la perspectiva teórica, como experimental.

Los modelos de Fermi-Hubbard aunque son el principio el modelo más sencillo para describir fermiones moviéndose en un potencial periódico siguen siendo un reto teórico y experimental, en particular, sistemas de baja dimensionalidad. La presente tesis se une a los esfuerzos de entender a dichos sistemas, desde un modelo bidimen-

sional donde se estudian las fases superfluidas y supersólidas para un potencial con interacciones finitas, hasta un modelo unidimensional con interacciones de largo alcance donde se muestra la versatilidad y complejidad de los modelos de Fermi-Hubbard extendidos. En breves palabras, las fases propias de la materia ultrafría aquí estudiadas, representan un laboratorio versátil para someter a prueba distintas hipótesis de la materia condensada y sistemas fuertemente correlacionados.

Apéndice A

Teoría de densidad funcional

La teoría de densidad funcional es la extensión natural del concepto de integrales de trayectoria de mecánica cuántica a la teoría cuántica de campos.

La idea básica es conectar la función de partición de muchos cuerpos con el concepto de integrales de trayectoria. Esto es, partiendo de la función de partición,

$$Z = \text{Tr} \exp^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}, \quad (\text{A.1})$$

es fácil ver que si se identifica a $\tau = -i\hbar\beta$, la función de partición es idéntica al operador de evolución temporal

$$\hat{U}(t, 0) = \exp^{-i\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar}, \quad (\text{A.2})$$

copiando la idea de integrales de trayectorias, el intervalo $\hbar\tau$ se divide en N subintervalos y se consideran todas las trayectorias posibles entre cada intervalo de longitud $\Delta\tau = \hbar\beta/N$. Para calcular la función de partición es necesario calcular la traza del operador $(\hat{H} - \mu\hat{N})$, por lo cual es necesario elegir una base sobre la cual se trazará. La base mas conveniente es la de los estados coherentes. Para fermiones los estados coherentes son los eigenvectores del operador de aniquilación, con eigenvalor $\phi_{\vec{k}}$,

$$a_{\vec{k}}|\phi\rangle = \phi_{\vec{k}}|\phi\rangle, \quad (\text{A.3})$$

Debido a la anticonmutación de los operadores fermiónicos, los números $\phi_{\vec{k}}$ no pueden ser números ordinarios, sino que deben de anticonmutar entre sí, esto es

$$\phi_{\vec{k}}\phi_{\vec{l}} + \phi_{\vec{l}}\phi_{\vec{k}} = 0,$$

esto introduce los números de Grassmann y su álgebra correspondiente [73], de la cual no se ahondará. Es fácil ver que el estado fermiónico coherente es

$$|\phi\rangle = \exp\left(-\sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger}\right)|0\rangle, \quad (\text{A.4})$$

siendo $|0\rangle$ el estado del vacío. Con esta definición es posible mostrar que

$$1 = \int d\phi^* d\phi \exp\left(-\sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^* \phi_{\vec{k}}\right), \quad (\text{A.5})$$

donde

$$\int d\phi^* d\phi = \int \prod_{\vec{k}} \frac{d\phi_{\vec{k}}^* d\phi_{\vec{k}}}{2\pi i}. \quad (\text{A.6})$$

Volviendo al cálculo inicial de la función de partición y usando las propiedades de los estados coherentes, la traza en cuestión puede ser calculada

$$Z = \int d\phi^* d\phi \exp\left(-\sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}^* \phi_{\vec{k}}\right) \langle -\phi | \exp^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi \rangle, \quad (\text{A.7})$$

al dividir el tiempo complejo en N y denotando por $\phi(j) = \phi(\tau = \hbar\beta j/M)$ y denotando por $\langle \phi | \phi \rangle = \exp(\phi | \phi)$, el producto interno puede ser escrito como

$$\langle -\phi | \exp^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi \rangle = \int \prod d\phi^*(j) d\phi(j) \exp(\phi(N) | \phi(N)) \times \quad (\text{A.8})$$

$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^N \Delta\tau \left(\hbar \frac{(\phi(j) | \phi(j)) - (\phi(j-1) | \phi(j-1))}{\Delta\tau} + H(\phi(j)^*, \phi(j-1)) \right)\right), \quad (\text{A.9})$$

en el límite $N \rightarrow \infty$ y $\tau \rightarrow 0$, el *bracket* de la función de partición se reduce a

$$\langle -\phi | \exp^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi \rangle = \exp(\phi(\hbar\beta) | \phi(\hbar\beta)) \int d\phi^* d\phi \exp^{-S(\phi^*, \phi)/\hbar},$$

siendo $S(\phi^*, \phi)$ la acción

$$S(\phi^*, \phi) = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d\vec{x} \phi^*(\vec{x}, \tau) \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \phi(\vec{x}, \tau) + H(\phi^*, \phi), \quad (\text{A.10})$$

por tanto

$$Z = \int d\phi^* d\phi \exp^{-S(\phi^*, \phi)/\hbar}, \quad (\text{A.11})$$

donde se imponen como condiciones a la frontera $\phi(0) = -\phi(\hbar\beta)$ (para bosones se omite el signo). En el espacio recíproco, la antiperiodicidad define las frecuencias de Matsubara $\omega_n = (2n + 1)/\hbar\beta$, con $n \in \mathbb{N}$. Toda la física del problema puede ser obtenida a través de la función de partición integrando la acción. Sin embargo, existen pocos problemas físicos para los cuales existe una expresión cerrada dicha integral. Sobre todo cuanto el Hamiltoniano incluye términos de interacción de dos cuerpos, en general no es posible resolver el problema.

Por ejemplo para un sistema cuya acción se escriba con $S = S_0 + S_{int}$, escrito en el espacio de momentos $\phi(\vec{k}, \tau)$

$$\begin{aligned} S(\phi, \phi) = & \int d\tau \sum_{\vec{k}, \alpha} \phi_\alpha^*(\vec{k}, \tau) (\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + H_0) \phi_\alpha(\vec{k}, \tau) + \\ & + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \phi_\alpha^*(\vec{k} + \vec{q}, \tau) \phi_\gamma^*(\vec{k}' - \vec{q}, \tau) V(\vec{q}) \phi_\delta(\vec{k}', \tau) \phi_\beta(\vec{k}, \tau), \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

siendo H_0 un operador de un cuerpo y $V(\vec{q})$ el operador de interacción de dos cuerpos en Fourier, es imposible encontrar la función de partición en términos de los operadores fermiónicos ϕ . Es por ello que es necesario introducir la transformación de Hubbard-Stratonovich para desacoplar al Hamiltoniano y escribir a la acción en una forma cuadrática en los campos fermiónicos.

La elección de la transformación de Hubbard-Stratonovich es en general un *arte* y depende específicamente del problema en cuestión. Existen tres formas para hacer esta transformación, que son los denominados canales *directo*, *intercambio* y *Cooper*

Los canales directo y de intercambio involucran un operador de campo de creación y otro de aniquilación, es decir son proporcionales al operador de densidad $\hat{\rho} \propto \phi_\alpha^* \phi_\gamma$,

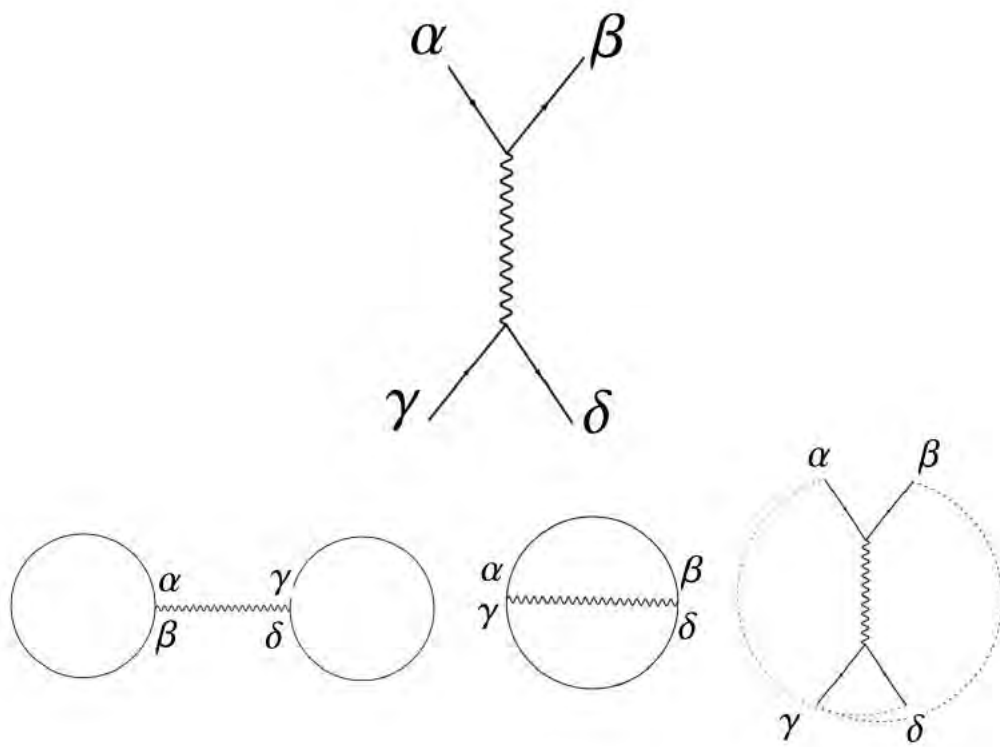


Figura A-1: Esquematzación de los posibles desacoplamientos en la transformación de Hubbard Stratonovich. Los índices $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, son los índices del término de la interacción.

mientras el canal de Cooper involucra dos operadores de creación o dos de aniquilación, esto es crean o aniquilan pares de partículas $\hat{\rho} \propto \phi_\alpha^* \phi_\beta^*$.

La forma exacta de la transformación de Hubbard-Stratonovich depende del potencial $V(\vec{q})$ y el canal empleado. Cuando se desea estudiar una transición de fase, la elección del canal lleva consigo la elección del parámetro de orden. La integración sobre algún campo *borra* esos grados de libertad y toda la información se guarda en el nuevo campo introducido. Por ejemplo, en la superconductividad, la información la guarda el campo bosónico de Cooper y los campos fermiónicos representan grados de libertad innecesarios para describir al problema. En un plasma de electrones, no hay formación de pares y es la densidad el parámetro de orden. En otros sistemas, bosónicos, como la condensación de Bose-Einstein basta con una aproximación estática $\phi(\tau) = \phi_0$ para describir al sistema.

En el siguiente apéndice, se describe con cuidado el significado de la transformación de Hubbard-Stratonovich para el problema abordado, y el significado de la acción efectiva.

Apéndice B

Acción Efectiva

La transformación de Hubbard-Stratonovich introduce un nuevo campo Δ que engloba la información a bajas energías. Y permite realizar la integral sobre aquellos grados de libertad *irrelevantes* para describir macroscópicamente al problema cerca de la transición de fase.

Para el problema de BCS con interacción de largo alcance, se introduce el campo bosónico Δ , cuyo significado físico es el de la formación de pares de Cooper. Este campo satisface

$$\langle \Delta(k, q) \rangle = \sum_{\vec{k}'} V_{dip}(\vec{k} - \vec{k}') \langle \phi_A(q - k) \phi_B(k) \rangle \quad (\text{B.1})$$

la dependencia en q permite tomar en cuenta al centro de masa del par de Cooper.

$$S(\phi, \Delta) = \frac{1}{\beta} \sum_{k, q} \Phi^*(k) \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) & \Delta(k, q) \\ \Delta(k, q) & i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) \end{pmatrix} \Phi(k, q) - \\ - \Delta(k, q) V^{-1}(\vec{k} - \vec{k}') \Delta(k', q), \quad (\text{B.2})$$

esta acción resulta cuadrática en los campos fermiónicos, por lo cual se puede realizar

la integral gaussiana, el resultado es

$$S_{ef}(\Delta) = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}} \hbar \text{Tr} \text{Ln}(\mathbb{G}^{-1}(\Delta)) - \Delta(k, q) V^{-1}(\vec{k} - \vec{k}') \Delta(k', q). \quad (\text{B.3})$$

Esta expresión es exacta, y encontrar Δ equivale a resolver el problema original, lo cual resulta imposible, es por ello que se propone un desarrollo perturbativo alrededor del parámetro Δ . La idea es separar la parte que depende de Δ , $\mathbb{G}^{-1} = \mathbb{G}_0^{-1}(1 + \mathbb{G}_0\Sigma)$ y hacer el desarrollo de $\text{Ln}(-\mathbb{G})$ alrededor de \mathbb{G}_0 , donde

$$\begin{aligned} \hbar\mathbb{G}_0^{-1} &= \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) & 0 \\ 0 & i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) \end{pmatrix}, \text{ y} \\ \Sigma &= \begin{pmatrix} 0 & \Delta(k) \\ \Delta(k) & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

se puede verificar que sólo los términos pares contribuyen en el desarrollo $(\mathbb{G}_0\Sigma)^n$, y la su expresión final es

$$(\mathbb{G}_0\Sigma)^{(2n)} = \mathbb{1} |\Delta(k)|^2 \frac{(G_0^{(11)} G_0^{(22)})^n}{((\hbar\omega_n)^2 + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2)^2} \quad (\text{B.5})$$

donde $G_0^{(11)} = i\hbar\omega_n + (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)$ y $G_0^{(22)} = i\hbar\omega_n - (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)$.

Al realizar las sumas sobre las frecuencias de Matsubara se obtienen los coeficientes $a(T)$ y $b(T)$ y la ecuación para el parámetro de orden. Sumando sobre las frecuencias de Matsubara se obtienen los coeficientes $a(T)$ y $b(T)$

$$a(T) = V^{-1} - \frac{\beta}{A} \sum_{\vec{k}} \frac{\tanh(\beta\xi_{\vec{k}}/2)}{2\xi_{\vec{k}}} \quad (\text{B.6})$$

Mientras el coeficiente $b(T)$ puede ser calculado fácilmente resultando

$$b(T) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} \left(-\beta^2 \frac{\text{sech}^2(\frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)\beta}{2})}{8(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2} + \frac{1}{4} \beta \frac{\sinh(\frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)\beta}{2})}{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^3} \right), \quad (\text{B.7})$$

Enfatizamos que el coeficiente $a(T)$ implica la inversión del operador de interacción

V , lo cual puede no ser trivial, sin embargo, dado que la transición es de segundo orden y el desarrollo perturbativo es alrededor del parámetro de orden es alrededor de $\Delta \approx 0$, basta resolver la ecuación para el parámetro de orden

$$\Delta_0(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k} - \vec{k}') \frac{\Delta_0(\vec{k}') \tanh(\beta\xi_{\vec{k}'}/2)}{2\xi_{\vec{k}'}} \quad (\text{B.8})$$

encontrar la temperatura crítica T_c definida como la temperatura para la cual se tienen soluciones no triviales y hacer la expansión de $a(T)$ alrededor de esta temperatura. Mientras el coeficiente $b(T)$ en principio es independiente de las características del potencial de interacción, sin embargo toda la información de la interacción la guarda la temperatura crítica T_c y el signo de $b(T_c)$.

Apéndice C

Gases Cuánticos en Cavidades Cuánticas

A continuación se presenta la derivación del Hamiltoniano presentado en el Capítulo 6 concerniente al estudio de un gas ultrafrío confinado en una red óptica en el interior de una cavidad cuántica, la cual es iluminada con un haz clásico de prueba. Para mostrar la derivación del Hamiltoniano de muchos cuerpos, se hará primero un muy breve comentario acerca del Hamiltoniano de Jaynes-Cummings, del cuál se motiva y deriva el Hamiltoniano de muchos cuerpos, el cual se esquematizará a continuación del modelo de Jaynes-Cummings.

C.1. Modelo de Jaynes-Cummings

El Hamiltoniano en cuestión es una extensión al problema de muchos cuerpos del Hamiltoniano de Jaynes-Cummings para un sistema de un átomo con dos niveles de energía en un campo electromagnético. Brevemente describimos al sistema átomo-campo de radiación.

El Hamiltoniano del sistema de dos niveles esta dado por

$$\hat{H}_a = \hbar\omega_a \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma}^-, \quad (\text{C.1})$$

donde los operadores $\hat{\sigma}^{+/-}$ son los operadores de ascenso y descenso respectivamente para el estado base y el estado excitado. Si $|e\rangle$ y $|g\rangle$ denotan el estado excitado y base del sistema, entonces $\hat{\sigma}^+ = |e\rangle\langle g|$ y $\hat{\sigma}^- = |g\rangle\langle e|$. El campo electromagnético dentro de la cavidad es unimodal de frecuencia ω_c . La interacción átomo-campo esta dada por

$$\hat{H}_{int} = -\hat{d} \cdot \hat{E}, \quad (\text{C.2})$$

siendo \hat{d} el momento dipolar del átomo y \hat{E} el campo electromagnético. Bajo la aproximación de onda rotante, es posible mostrar que el Hamiltoniano de interacción se reduce a

$$\hat{H}_{int} = i\xi(g\hat{a}_c\hat{\sigma}^+ - g^*\hat{a}_c^\dagger\hat{\sigma}^-), \quad (\text{C.3})$$

donde g es la constante de acoplamiento del campo con el átomo y $\xi = \sqrt{\hbar\omega/2\epsilon_0}$, siendo \hat{a}_c el operador del campo electromagnético, y ϵ_0 la constante dieléctrica en el vacío. Mientras que el Hamiltoniano del campo electromagnético considerando un haz de bombeo \hat{a}_0 de frecuencia ω_p que ilumina la cavidad esta dado por

$$\hat{H}_L = \hbar\omega_c\hat{a}_c\hat{a}_c + \hbar\eta(\hat{a}_o\hat{a}_c^\dagger e^{i\omega_p t} + \hat{a}_c\hat{a}_o^\dagger e^{-i\omega_p t}), \quad (\text{C.4})$$

. Es conveniente expresar al Hamiltoniano en el sistema de referencia del haz de bombeo, para ello se hace una transformación unitaria $\hat{U}(t) = \exp(i\omega_p(\hat{\sigma}_z + \hat{a}_c^\dagger\hat{a}_c))$, introduciendo las desintonías $\Delta_c = \omega_p - \omega_c$ y $\Delta_a = \omega_p - \omega_a$, la expresión final del Hamiltoniano en este sistema de referencia es

$$\hat{H} = \hat{H}_A - \hbar\hat{\sigma}_z - \hbar\Delta_c\hat{a}_c^\dagger\hat{a}_c + \hbar\eta(\hat{a}_c\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_o\hat{a}_c^\dagger) + \hbar(\hat{\sigma}^+\hat{a}_c + \hat{\sigma}^-\hat{a}_c^\dagger). \quad (\text{C.5})$$

C.2. Hamiltoniano de Muchos Cuerpos

El Hamiltoniano de muchos cuerpos, el cual contempla la interacción de la luz de la cavidad y del haz de bombeo con un sistema de muchos átomos es una extensión del modelo de Jaynes-Cummings. El cual es la suma de los Hamiltonianos $\hat{H} =$

$\hat{H}_A + \hat{H}_R + \hat{H}_{A-R} + \hat{H}_{A-P} + \hat{H}_{A-A}$, donde el Hamiltoniano atómico está dado por

$$\hat{H}_A = \int d\vec{x} \left(\hat{\phi}_g^\dagger(\vec{x}) \hat{H}_g^0 \hat{\phi}_g(\vec{x}) + \hat{\phi}_e^\dagger(\vec{x}) \hat{H}_e^0 \hat{\phi}_e(\vec{x}) \right), \quad (\text{C.6})$$

siendo ϕ los operadores de campo y $\hat{H}_{e,g}^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{g,e}(\vec{x})$ con $V(x)$ el Hamiltoniano de confinamiento externo. La interacción átomo-átomo es

$$\hat{H}_{A-A} = \frac{U}{2} \int d\vec{x} \hat{\phi}_g^\dagger(\vec{x}) \hat{\phi}_g^\dagger(\vec{x}) \hat{\phi}_g(\vec{x}) \hat{\phi}_g(\vec{x}), \quad (\text{C.7})$$

mientras la interacción de los átomos con la luz de la cavidad y del haz de bombeo está dada respectivamente por

$$\hat{H}_{A-R} = -i\hbar \int d\vec{x} \hat{\phi}_g^\dagger(\vec{x}) u_c(\vec{x}) \hat{a}_c \hat{\phi}_e(\vec{x}) + Hc, \quad (\text{C.8})$$

la interacción con el haz de bombeo es

$$\hat{H}_{A-P} = -i\hbar \int d\vec{x} \hat{\phi}_g^\dagger(\vec{x}) u_p(\vec{x}) \hat{a}_0 \hat{\phi}_e(\vec{x}) + Hc, \quad (\text{C.9})$$

siendo $u_{c/p}(\vec{x})$ los modos espaciales de los haces de luz de la cavidad y bombeo respectivamente. Es posible eliminar adiabáticamente el estado excitado del sistema, para ello calculamos las ecuaciones de Heisenberg,

$$\frac{\partial \hat{\phi}_e(\vec{x})}{\partial t} = i \left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_e^0 + \Delta_a \right) \hat{\phi}_e(\vec{x}) - \left(\sum_{l=c,p} \hat{a}_l u_l(\vec{x}) \right) \hat{\phi}_g(\vec{x}), \quad (\text{C.10})$$

$$\frac{\partial \hat{\phi}_g(\vec{x})}{\partial t} = i \left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_g^0 - \frac{U}{\hbar} \hat{\phi}_g^\dagger(\vec{x}) \hat{\phi}_g(\vec{x}) \right) \hat{\phi}_g(\vec{x}) - \left(\sum_{l=c,p} \hat{a}_l u_l(\vec{x}) \right) \hat{\phi}_e(\vec{x}), \quad (\text{C.11})$$

el estado estacionario asumiendo que la desintonía Δ_a es mucho mas grande que la energía cinética es para el estado excitado

$$\hat{\phi}_e(\vec{x}) \approx \frac{-i}{\Delta_a} \left(\sum_{l=c,p} \hat{a}_l u_l(\vec{x}) \right) \hat{\phi}_g(\vec{x}), \quad (\text{C.12})$$

sustituyendo esta expresión en el Hamiltoniano, la nueva expresión para el Hamiltoniano no depende más del estado excitado,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{eff} = & \int d\vec{x} \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \left(\hat{H}^0 + \frac{U}{2} \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\phi}(\vec{x}) \right) \hat{\phi}(\vec{x}) \\ & + \frac{\hbar}{\Delta_a} \sum_{l,m=c,p} \int d\vec{x} \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) u_l(\vec{x}) u_m^*(\vec{x}) \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger + Hc + \sum_l \hbar \omega_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l, \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

donde por comodidad se omite el subíndice del estado base. Se suele añadir de forma fenomenológica la disipación a través de una constante de decaimiento $\kappa > 0$. Al introducir el hecho de que los átomos se encuentran confinados en el interior de una red óptica, entonces se expande al campo en término de los operadores de creación y aniquilación de sitio.

$$\hat{\phi}(\vec{x}) = \sum_i \hat{c}_i \omega(\vec{x} - \vec{x}_i),$$

donde $\omega(\vec{x} - \vec{x}_i)$ son las funciones localizadas de Wannier de la red óptica, con ello el Hamiltoniano se reescribe de la forma

$$\begin{aligned} \hat{H}_{eff} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_i \\ & + \frac{\hbar}{\Delta_a} \sum_{l,m} g_l g_m \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \sum_{i,j} J_{i,j}^{l,m} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \sum_l \hbar \omega_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l - i\kappa \hat{a}_c, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

donde

$$J_{i,j}^{l,m} = \int d\vec{x} \omega(\vec{x} - \vec{x}_i) u_l(\vec{x}) u_m(\vec{x}) \omega(\vec{x} - \vec{x}_j) \quad (\text{C.15})$$

contempla el traslape de las funciones de onda atómicas en la base de Wannier con los modos espaciales de la luz de la cavidad y del haz de prueba. Para átomos localizados es posible aproximar $J_{i,j}^{l,m} \approx J_i^{l,m} \delta_{i,j}$.

Finalmente se calcula el estado estacionario de la luz de la cavidad,

$$\frac{d\hat{a}_c}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(g_c g_p a_p \sum_i J_i^{cp} \hat{n}_i + g_1 g_1 \hat{a}_c \sum_i J_i^{cc} \hat{n}_i + \Delta_c \hat{a}_c + \kappa \right), \quad (\text{C.16})$$

por tanto en el estado estacionario

$$\hat{a}_c \approx \frac{1}{\Delta_c - \sum_i J_i^{cp} \hat{n}_i + \kappa} \hat{D} = C \hat{D}, \quad (\text{C.17})$$

donde C es una constante y $\hat{D} = \sum_i J_i^{cp} \hat{n}_i$.

Para el sistema en cuestión se considera $a_p \rightarrow a_{p,\sigma}$ polarizado linealmente, y dos componentes hiperfinas, por lo cual el estado estacionario se reemplaza después de una álgebra idéntica a la realizada

$$\hat{a}_c \approx \sum_{\sigma} C_{\sigma} \hat{D}_{\sigma}. \quad (\text{C.18})$$

Al sustituir estas expresiones en el Hamiltoniano considerado en el Capítulo 6, se deriva como se esquematiza en dicho Capítulo el Hamiltoniano efectivo de materia con el que se trabaja.

Intrinsic decoherence and purity in a Bose quantum fluid in a triple well potential

This content has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text.

2014 Laser Phys. 24 085501

(<http://iopscience.iop.org/1555-6611/24/8/085501>)

View [the table of contents for this issue](#), or go to the [journal homepage](#) for more

Download details:

IP Address: 132.248.209.200

This content was downloaded on 12/05/2016 at 16:10

Please note that [terms and conditions apply](#).

Intrinsic decoherence and purity in a Bose quantum fluid in a triple well potential

A Camacho-Guardian and R Paredes

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 20-364, DF 01000, Mexico

E-mail: rosario@fisica.unam.mx

Received 7 February 2014, revised 4 April 2014

Accepted for publication 3 April 2014

Published 9 June 2014

Abstract

We consider a quantum Bose fluid confined in a triple well potential in 1D within the exact N -body Bose–Hubbard model to investigate the phenomena of intrinsic decoherence and loss of purity. Our study is done by following the time evolution of one-body properties in an N -particle closed environment. We do an exhaustive exploration of initial conditions to characterize these phenomena. Here we illustrate our main findings with a set of relevant Fock and SU(3) coherent states. Our study shows that signatures of stationarity and maximal mixing are a direct consequence of the inter-particle interactions in the closed system and become evident as the number of particles is increased. This fact is confirmed by quantifying the deviations from stationarity by means of a matrix norm.

Keywords: BEC, optical lattices, decoherence, quantum fluids

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

1. Introduction

The ability to control and manipulate interatomic interactions as well as the confinement potential where they move, have made ultracold atomic gases excellent and clean experimental systems where predictions and phenomena belonging to the field of condensed matter can and have been reenacted [1–8]. This has yielded the opportunity to probe into questions that may not be possible to do directly in the latter systems. In this regard, large ensembles of bosonic atoms confined in optical lattices have been thought as promising candidates in the realization of controllable macroscopic coherent states to pursue quantum computing objectives. This is so because, since the first realization of an optical lattice, signatures of macroscopic coherence were observed [9–14].

Most of the phenomena alluded to above are based on the existence of macroscopic quantum coherence. The opposite, decoherence, is a process in which phase coherence or phase interference is destroyed [15–18]. Due to the unavoidable presence of interatomic interactions, even when they can be externally handled and thus diminished, there exists a

characteristic time when coherence diminishes [19–22]. Since typical measurements carried out in optical lattices are related with oscillations in particle population across lattice wells, these systems can be considered suitable devices to be used as time coherence tracers. In particular, Bose gases confined in arrays of a few wells may be considered ideal realizations for pursuing such aims. A condensate confined in a double-well potential, the so-called bosonic Josephson junction [23], represents the simplest system in which decoherence can be investigated [24, 25].

Theoretical studies of optical lattices have been accomplished within mean field (MF) and Bose–Hubbard (BH) schemes [26]. As it is well known both descriptions predict the opposite regimes of Josephson oscillations (JO) and self-trapping (ST) as a function of the ratio between inter-particle interactions and hopping strengths. However, the most relevant discrepancy among them is that, while the transport of particles across the lattice in MF approximation always shows coherent oscillations, except for exceptional values of the initial conditions associated to fixed points, in the BH description, typically, the dynamics show collapses to quasi-stationary states

with revivals in the particle population. These collapses are caused by the unavoidable presence of the inter-particle interactions, and are observed in actual experiments [16, 24]. Even though interatomic interactions can be externally changed by means of Feshbach resonances, it is almost impossible to completely neutralize them. It is this behavior of collapses and revivals one of our main interests here. That is, we will show, as pointed earlier [27], that as the number of particles N is increased, for fixed interactions, the time spent in the revivals becomes much smaller than the time spent in the collapsed intervals, in such a way that the system is mostly at states that become effectively stationary. We call these states statistically stationary and the decay to those states as ‘intrinsic’ decoherence.

In this work we focus in the study of these aspects on bosons confined in triple well potentials in 1D (TWP1D) within the Bose–Hubbard approach. The dynamic and stationary properties of condensates in TWP1D have been widely investigated within the mean field or Gross–Pitaevskii approach; the latter studies encompassing transport characterization of chaos [28–34], irreversible transport between wells [35–37], dynamics of collective excitations [38] and tunneling inhibition as prospects for transistor-like quantum engineering [39, 40], among others. In the context of BH or full quantum description we can mention the analysis of stationary states and tunneling dynamics for few ($N = 3, 4, 5, 7$) [41–43] and large ($N = 500$) ensembles of bosons [44, 45].

As stated, the main interest of this manuscript is in characterizing the processes of intrinsic decoherence and loss of purity in a Bose condensate confined in a TW1D. We emphasize that this decoherence is termed ‘intrinsic’ to distinguish it from the relaxation process that takes place when a quantum mechanical system weakly interacts with its environment. However, from another perspective, the difference may not be as strong as it may appear, since the environment in this case may be represented by the N -particle states while the ‘system’ is associated with few-body properties. As discussed in [46], intrinsic decoherence can be addressed from two different approaches. By means of modifications to the unitary evolution of Schrödinger evolution or by strict quantum mechanical procedure plus statistical mechanical arguments. Here, we adopt the second one, to study the entitled intrinsic decoherence in an interacting Bose–Einstein condensate in a symmetric triple well potential in 1D. As stated in [25], another name for intrinsic decoherence is the observation of stationary states, which may or may not be thermodynamic equilibrium states. Such stationary states are characterized by having their few-body properties no longer evolving in time. The attainment of such a stationary state can be monitored by following the evolution in time of the matrix elements of the few-body reduced density matrix ρ^R which, once in the stationary state, becomes constant. Such a constancy in time has been identified as a signature of decoherence since it is always possible to find a proper basis, the so-called *preferred basis* [47–49], in which the off-diagonal matrix elements of the reduced density matrix become zero. Another quantity taken from the dynamics within the full quantum scheme, and which allows us to exhibit the influence of inter-particle interactions in a

closed isolated system, is the purity \mathcal{P} of the state. This quantity, defined as $\mathcal{P} = \text{Tr}\rho^2$, with ρ the density matrix of the state [50–52], measures the degree of decoherence or mixing in a system. A totally coherent state has $\mathcal{P} = 1$ indicating that the system state can be specified by a vector state $|\Psi\rangle$ such that $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. As is known, the specification of such a state requires a complete set of measurements consistent with the system’s degrees of freedom. In analogy to the intrinsic decoherence detected from ρ^R , here we shall consider the purity of one-body states. In this work, then, we study the evolution in time of the one-body reduced density matrix, and the purity \mathcal{P} , to demonstrate how an interacting N -particle system, described through a Bose–Hubbard Hamiltonian, exhibits both intrinsic decoherence and loss of purity.

This paper is organized in four sections. In section 2 we present the model that describes the system, namely the BH Hamiltonian, and summarize in a phase diagram all the stationary states as a function of the number of particles and interaction strength. In section 3 we concentrate on studying certain aspects of the full quantum dynamics that emerge as the system size is increased, namely the intrinsic decoherence and the purity. By using relevant sets of N -particle systems we illustrate in this section the existence of a stationary state and the purity in one-body properties. Our calculations are performed for $N = 10, 40, 80, 120$ and 150 . To quantify the deviations from the stationary mean value as a function of N we use the Frobenius norm. Finally, in section 4 a summary of our findings is presented.

2. A three well potential in the one-level picture, stationary eigenstates

The system under study consists of a Bose quantum fluid confined in a symmetric triple well potential in 1D (TW1D). As stated in section 1, the stationary and dynamical properties of this system have been extensively studied in the literature within BH and MF schemes [28–45]. In this section we revisit the analysis of the stationary states for the TW1D. The aim of such a study is to compare the stationary states of the BH model obtained from direct diagonalization, with those predicted from the N -body dynamical evolution. The study of stationary states from dynamical evolution will be performed through the analysis of decoherence and loss of purity.

Within the full quantum N -body scenario, except for constant factors that scale with the number of particles, the Hamiltonian that describes the system in the one level-picture, that is, considering the three lowest single particle states and its corresponding Wannier functions, is the BH model [26, 44]

$$H = -J(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2) + U_0 \sum_{i=1}^3 b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i, \quad (1)$$

where the operators b_i^\dagger and b_i create and annihilate particles in the site i and satisfy the usual commutation rules for bosons $[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}$. The interaction strength U_0 written in terms of the s -wave scattering length a , $U_0 = (2\pi\hbar^2 a/m) \int \psi_i^4(x) dx$, with m the atomic mass of the considered specie and $\psi_i(x)$ the localized Wannier functions, scales the contact interactions

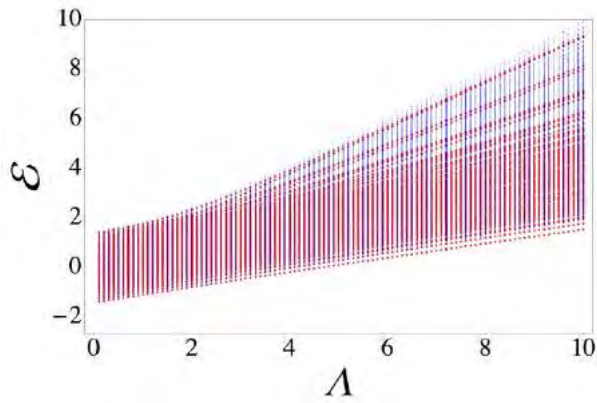


Figure 1. Exact energy eigenvalues $\varepsilon = E_n/NJ$ of the N -particle Hamiltonian (1) as a function of $\Lambda = U_0N/J$. Red and blue dots correspond to $N = 15$ and 150 respectively.

among pairs of particles. For a given number of particles N , the size of the Hilbert space is $\Omega = (N+1)(N+2)/2$ and therefore, the size of Hamiltonian, given by equation (1), scales as $\sim N^2 \times N^2$. The information of the energies of the Hamiltonian stationary states can be encoded in a phase diagram as a function of the parameter $\Lambda = U_0N/J$ that measures the ratio between the interaction U_0 and the tunneling amplitude J ¹. For our calculations we consider $N = 150$ ². Early [41] and recent [43] works report calculations for $3 < N < 90$ for symmetric arrays of trimers in open and closed configurations.

In figure 1 we plot the exact energy eigenvalues of Hamiltonian (1) as a function of Λ , for $N = 15$ and $N = 150$, and for values of Λ ranging from $0.0 \leq \Lambda \leq 10.0$, in steps of 0.1. All the eigenvalues associated with the ground state lie on a straight line with constant slope, while the highest eigenvalues lie on a curve that changes its slope at $\Lambda \approx 1.5$. As it is known [30], such sets of minimum and maximum eigenenergies correspond to states in which particles oscillate coherently or remain trapped respectively, the so-called JO and ST regimes. Since this transition has been studied and characterized in the BH context for the TWID, here we just want to emphasize the dependence (dense or sparse) of the energy spectrum on N . We shall name these energy eigenstates as the truly stationary since their evolution remains unchanged by the full unitary propagator $U = \exp[-iHt/\hbar]$.

Regarding the MF scenario, it is well-known that despite its nonintegrability a BEC confined in a triple well potential represents the simplest system that admits an exhaustive numerical description. For comparison purposes with their BH counterpart, we determine the stationary states (see figure A1). The straightforward procedure to obtain those stationary states is summarized in the Appendix.

¹ The coefficient of the tunneling amplitude J is related with the inverse of the oscillation period τ of a single particle in the symmetric triple well potential as $J = \hbar/\tau$. For our numerical calculations we assume $J = 1$ in dimensionless units. In an experiment this can be done by adjusting the depth of the optical potential, that is, the laser intensity.

² The maximum value of N for which we can perform calculations in a reasonable time is ~ 200 but taking $N = 150$ leads quantitatively to the same features as $N = 200$. For practical reasons we restrict ourselves to consider $N = 150$ for dynamical calculations.

3. Quantum dynamics

In the previous section we determined the stationary eigenstates of the symmetric triple well potential in the BH scheme. We now turn our attention to the study of certain dynamical aspects of one-body properties with the interest of exhibiting phenomena that appear only within the N -particle full-quantum description. First, we shall concentrate on describing the so-called phenomenon of intrinsic decoherence and then analyze the loss of purity in the closed N -particle system. These phenomena can emerge within the full quantum scheme only and their manifestation becomes more evident as the number of particles is increased.

3.1. Stationary states and intrinsic decoherence

The phenomenon of intrinsic decoherence becomes evident in large N -body closed systems when they are evolved in time and a statistically stationary state is observed. Such a state can be registered only through the behavior of few body properties, when they exhibit an oscillatory behavior that decays to a constant value that no longer changes during a period of time large enough compared with a characteristic system time scale. Then, after remaining with that constant value during a time interval, the dynamics show again an oscillatory behavior for another time interval³, before decaying to the same constant value. The elapsed time to reach such a constant value, and the time during which the value of the property under study remains constant, are called the relaxation τ_{rel} and the recurrence τ_{rec} times respectively [19, 21]. In general, the values of both τ_{rel} and τ_{rec} depend strongly on the system size and on the initial state from which the system is evolved. Ultracold bosons confined in optical lattices are ideal systems where these assertions, for macroscopic conglomerates, can be reproduced. The occurrence of a state very close to the initial one, starting from any arbitrary initial condition, is guaranteed because of the fact that within the BH model the Hilbert space has a finite size. For N particles confined in a 1D lattice and composed of n wells it scales as $\binom{N+n-1}{N}$, as a consequence of considering that the Hamiltonian that describes the system takes into account the single particle-modes of the first band only. It is worth mentioning that, as the number of wells n and particles N is increased, numerical analysis becomes impracticable. Regarding the dependence of τ_{rel} and τ_{rec} on the system size, it has been shown for arrays of two wells (using a particular initial condition), that those times scale in such a way that in the limit of large N , $\tau_{\text{rel}}/\tau_{\text{rec}} \rightarrow 0$ [25, 27], thus showing the existence of a stationary state, labeled ‘statistical’ to differentiate it from the stationary eigenstates. Here, we concentrate on characterizing the phenomenon of intrinsic decoherence for the TWID by studying the evolution in time of one-body properties. In particular, we shall show that, for every initial condition the evolution in time of those properties exhibit on average constant values that no longer evolve

³ According to Poincaré’s theorem, certain systems will, after a sufficiently long but finite time, return to a state very close to the initial one, the so-called recurrences.

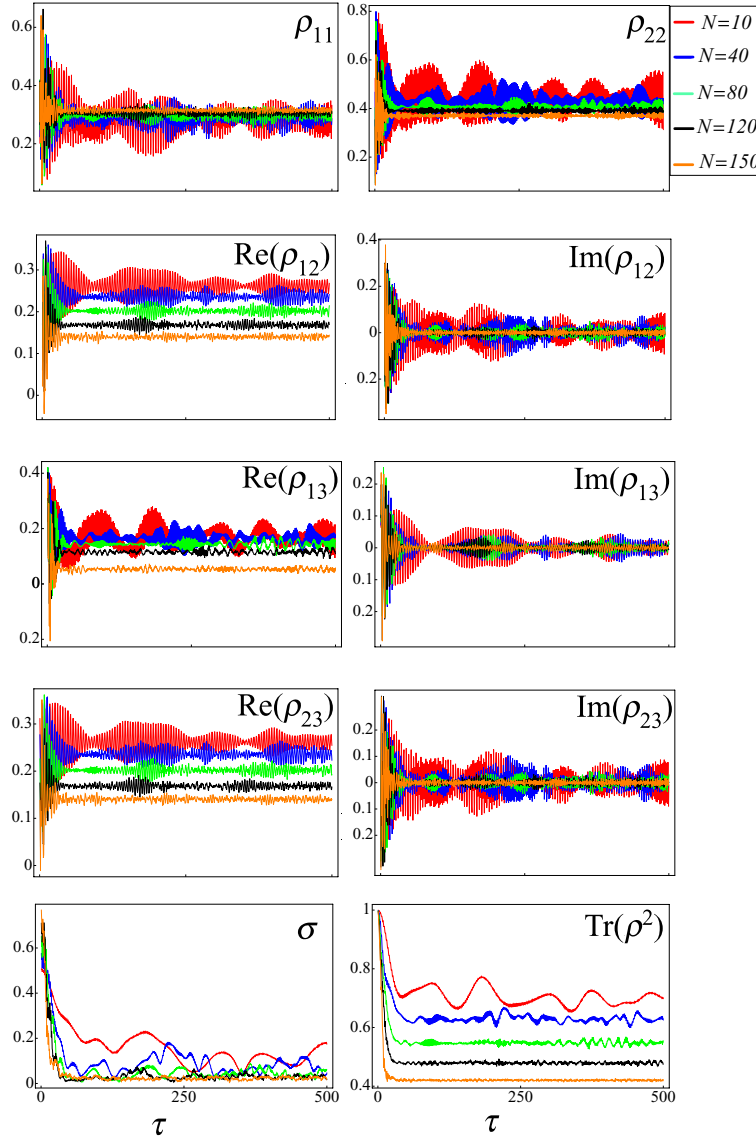


Figure 2. Real and imaginary parts of the diagonal and off-diagonal elements of the one-body reduced density matrix as a function of t for $N = 10, 40, 80, 120$ and 150 . The Frobenius norm and purity are plotted in the lower panels. The initial condition is defined by equation (5) with $n_1 = 0.14, n_2 = 0.81, n_3 = 0.05, \phi_{12} = \phi_{32} = 0$ and the ratio $U_0/J = 0.015$. τ is in dimensionless units.

in time. We shall also analyze the deviations from the mean stationary value as a function of the system size.

The attainment of a state in which the few body properties no longer change within the fluctuations around a mean value identifies a statistically stationary state. The way in which it is possible to detect such states is by following the evolution in time of the expectation value of few-body properties for arbitrary initial states. The expectation value of any few-body property can be determined from either the N -body density matrix or the few-body reduced density matrix ρ^R . As mentioned in the previous paragraph, here we concentrate on the analysis of one-particle properties only. Let $O^{(1)}$ be an one body operator of the N -particle system. That is $O^{(1)} = \sum_{m=1}^N O_m^{(1)}$ where $O_m^{(1)}$ represents a single particle operator. The expectation value of such an operator is given by

$$\langle O^{(1)}(t) \rangle = \text{Tr} \rho^N(t) O^{(1)}, \quad (2)$$

where $O^{(1)} = \sum_{i,j} \langle i | O^{(1)} | j \rangle b_i^\dagger b_j$, being the single particle states represented by $|i\rangle$ with $i = 1, 2, 3$ in the present problem. Written in terms of the one body reduced density matrix,

$$\rho_{ji}^R(t) = \frac{\text{Tr}(b_j \rho^N(t) b_i^\dagger)}{N}, \quad (3)$$

the expectation value of $O^{(1)}$ is

$$\langle O^{(1)}(t) \rangle = \sum_{ij} \langle j | O^{(1)} | i \rangle \rho_{ji}^R. \quad (4)$$

To demonstrate that any arbitrary one-body property attains a stationary state it suffices to show that, for a given

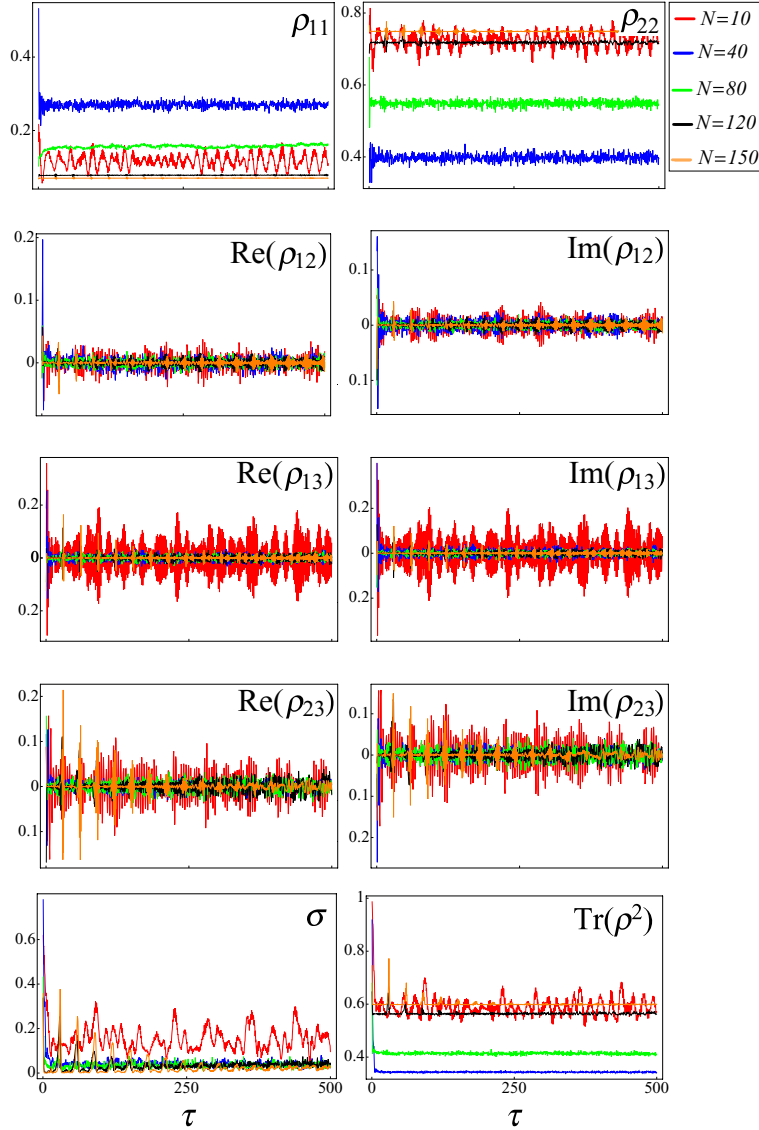


Figure 3. Real and imaginary parts of the diagonal and off-diagonal elements of the one-body reduced density matrix as a function of t for $N = 10, 40, 80, 120$ and 150 in the preferred basis. The Frobenius norm and purity are plotted in the lower panels. The initial condition is defined by equation (5) with $n_1 = n_3 = 0.1, n_2 = 0.8$ and $\phi_{12} = \phi_{23} = 0$, considering $U_0/J = 0.1$ τ is in dimensionless units.

initial condition, every element of the one-body reduced density matrix reaches, within fluctuations around a mean stationary value, a constant value. In addition, to provide one of the signatures that accompanies the manifestation of decoherence, one has to show that in the stationary state the one-body reduced density matrix is a diagonal matrix. That is,

$$\rho_p^R = \mathcal{U} \rho_s^R \mathcal{U}^\dagger = \begin{pmatrix} \rho_{11}^p & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22}^p & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33}^p \end{pmatrix}.$$

where ρ_i^p $i = 1, 2, 3$ denote the mean stationary values that reaches the diagonal elements of ρ^R in a particular basis, the so-called preferred basis [47, 49]. This basis, defined in terms

of the unitary transformation and labeled by the operator \mathcal{U} , can be obtained numerically and depends on the initial condition and the value of Λ .

The N -particle density matrix in equation (2) is given by $\rho^N(t) = |\phi(t)\rangle\langle\phi(t)|$, with $|\phi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\phi(0)\rangle$ where $|\phi(0)\rangle$ is the initial state. Given the eigenstate basis or the number-Fock basis, there exists an infinite number of initial states that can be used to analyze the behavior of the one-body reduced density matrix $\rho^R(t)$. We did an exhaustive exploration considering as initial states those that constitute the Fock basis and we also considered the SU(3) coherent states [41]. Our analysis was performed for values of Λ below and above the transition from JO to SF regimes. We illustrate the generality of our findings by showing first the evolution in time of $\rho^R(t)$ for (i) initial SU(3), and then we show the results for (ii) an

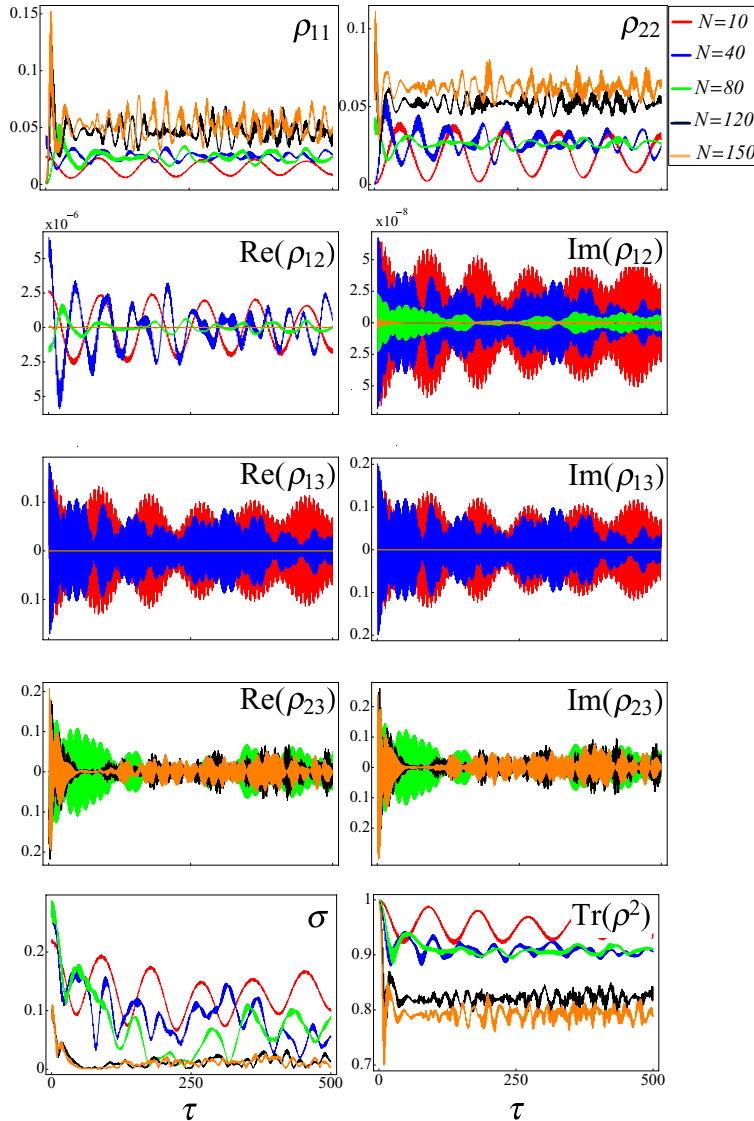


Figure 4. Real and imaginary parts of the diagonal and off-diagonal elements of the one-body reduced density matrix as a function of t for $N = 10, 40, 80, 120$ and 150 . The Frobenius norm and purity are plotted in the lower panels. The initial condition is defined by equation (5) with $n_1 = n_3 = 0.18$, $n_2 = 0.64$ and $\phi_{12} = \phi_{32} = 0$ and the ratio $U_0/J = 0.015$. τ is in dimensionless units.

initial state constructed as a superposition of the number-Fock states. The SU(3) states are defined as

$$|\Phi\rangle_{\text{SU}(3)} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\psi_i}{\sqrt{N}} b_i^\dagger \right)^N |0\rangle, \quad (5)$$

being $|0\rangle$ the vacuum state and ψ_i a complex quantity describing the bosons at lattice site i through a macroscopic local phase ϕ_i and population $|\psi_i|^2$, that is, $\psi_i = \sqrt{N n_i} e^{i\phi_i}$. The special feature that the SU(3) states have is that the quantum expectation value of any operator, and in particular the number operator, can be related to the solutions of the MF coupled equations [41]. For this reason, if ψ_i numbers are chosen to be the stationary solutions of the Hamilton equations for a given value of Λ (the fixed points), then the system will remain in a stationary state under the action of time evolution operator U .

Here and henceforth the time t in each figure has been rescaled to dimensionless units $\tau = Jt/\hbar$. For our numerical calculations we consider $N = 10, 40, 80, 120$ and 150 . The first initial condition that we select to illustrate our results belongs to the SU(3) coherent states defined by equation (5), specifically we chose $n_1 = 0.14$, $n_2 = 0.81$, $n_3 = 0.05$, $\phi_{21} = \phi_{32} = 0$, with $\phi_{ij} = \phi_j - \phi_i$. This initial state corresponds to a non-symmetric state. In figure 2 we plot the real and imaginary components of the elements of the one-body reduced density matrix ρ_{ij}^R for different values of N and a constant interaction strength $U_0/J = 0.015$. In the basis considered—that is, the atom number state or Fock basis—the terms $\rho_{11}(t)$ and $\rho_{22}(t)$ give the particle population fraction for each of the wells, while the terms $\rho_{ij}(t)$, $i \neq j$ are the so-called coherences. As one can see from this figure all the elements of ρ^R show an oscillatory behavior around a mean stationary value. The stationary value that each element

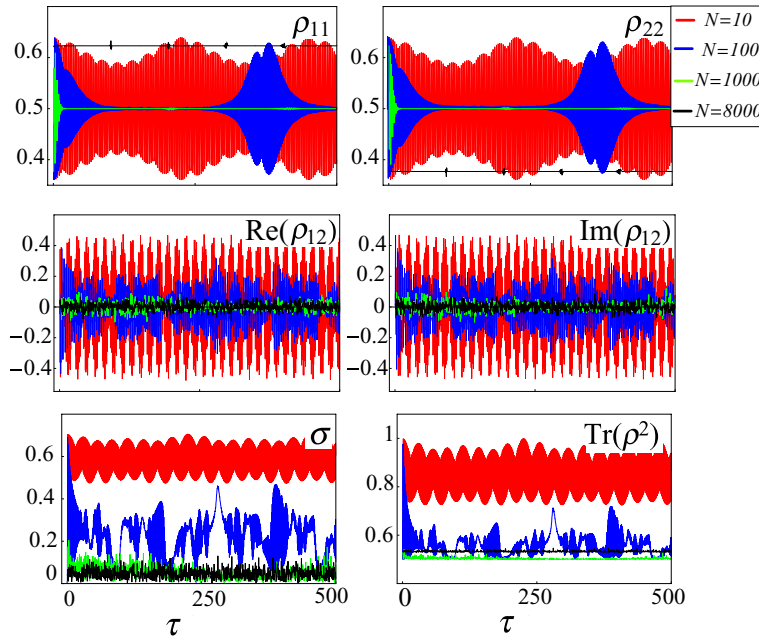


Figure 5. Real and imaginary parts of the diagonal and off-diagonal elements of the one-body reduced density matrix as a function of t for $N = 10, 100, 1000$ and 8000 confined in a DW1D system. The Frobenius norm and purity are plotted in the lower panels. The initial condition is defined by $n_1 = 0.64, n_2 = 0.36$ and $\phi_{12} = 0$ and the ratio $U_0/J = 0.015$. τ is in dimensionless units.

reaches depends on the value of Λ . It is important to note that the time during which we followed the evolution is sufficiently large compared with the system time scale defined by J . One can appreciate in a qualitative way that the deviations from the mean stationary values become smaller as the number of particles is increased. To provide a quantitative estimation of the deviation from the mean stationary value of the elements $\rho_{ij}(t)$ as a function of N , we employ the Frobenius norm given by [53]

$$\sigma = \left(\sum_{i,j} |\rho_{ij}(t) - \rho_{ij}^s|^2 \right)^{1/2} \quad (6)$$

where $\rho_{ij}(t)$ is the value of the matrix element i, j at time t and ρ_{ij}^s is its corresponding mean constant stationary value. This quantity is an extension of the vector norm to a matrix norm and allows us to characterize the fluctuations from the mean stationary as a function of N [53]. Also we should point out that this quantity does not depend on the basis since it is a trace. We plot σ in the bottom of figure 2.

The second initial condition for the analysis of the TW1D belongs also to the $SU(3)$ coherent states. We shall show that, following their evolution in the appropriate basis, the characteristic signature of intrinsic decoherence indeed becomes apparent, namely, that the off diagonal matrix elements become zero on average. We chose $n_1 = n_3 = 0.1, n_2 = 0.8, \phi_{12} = \phi_{23} = 0$ and $U_0/J = 0.1$. Because of the symmetry of Hamiltonian (1) and the fact that this initial condition represents a symmetric state, some of the elements of the reduced one-body matrix are equivalent in the Fock basis.

As before, we follow the evolution in time of the real and imaginary components of the elements of the one-body reduced density matrix ρ_{ij}^R considering several values of N and keeping constant the value of U_0 . The chosen initial condition does not

correspond to any of the MF stationary solutions of figure A1, and thus the matrix elements evolve showing an oscillatory behavior. In an analogous way to the initial condition studied above, we identified for each given value of Λ the constant mean value that each element ρ_{ij} acquires. With those values we construct the stationary matrix ρ_s^R . Then, we numerically determine the unitary transformation defined by \mathcal{U} that allows us to write ρ_s^R , that is, the elements of the reduced density matrix in the preferred basis. In figure 3 we plot the evolution in time of ρ^R in the preferred basis. As shown in the figure, each of the off-diagonal elements of the reduced density matrix oscillates around zero, showing thus the signature of decoherence in the preferred basis. As in the case of the previous initial condition, one can appreciate the dependence of the fluctuations around the mean stationary value on the number of particles N . This information is summarized in the panel at the bottom of figure 3.

To illustrate the advantages of the present analysis for the TW1D system with respect to the double well case (DW1D), here we readdress the study of the one-body reduced density matrix for the double well system. For this purpose we follow the evolution of an initial condition that in the case of three wells corresponds to a symmetric or dimeric regime. This condition is $n_1 = n_3 = 0.18, n_2 = 0.64, \phi_{12} = \phi_{32} = 0$ and $U_0/J = 0.015$. The analog of this situation for the DW1D system is $n_1 = 0.64, n_2 = 0.36$ and $\phi_{12} = 0$. Such an initial condition, used in [23], will allow us to make the appropriate comparison⁴. In figures 4 and 5 we plot real and imaginary components of ρ_{ij}^R for three and two wells respectively. The values of N are indicated in the insets. Several effects can be observed when three wells instead two are considered. First, that the amplitude of the oscillations

⁴ We notice that the election of U_0/J allows us to see the JO-ST transition in three wells in figure 3 and in two wells in figure 5.

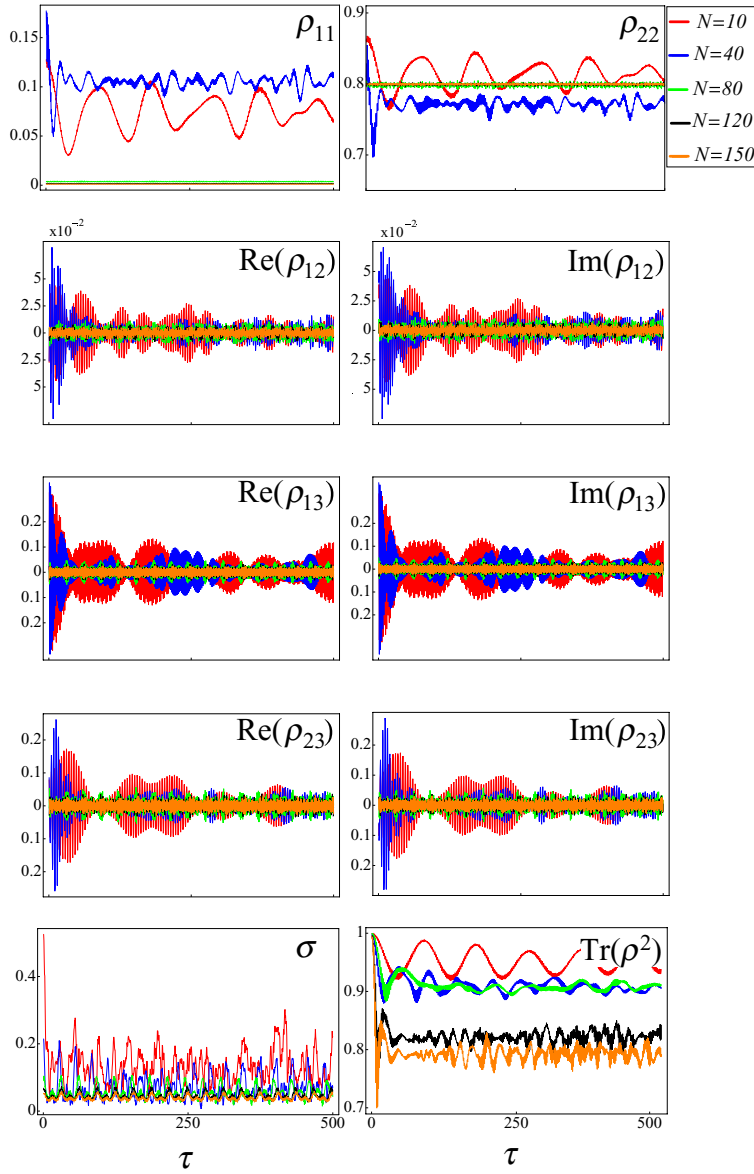


Figure 6. Real and imaginary parts of the diagonal and off-diagonal elements of the one-body reduced density matrix as a function of t for $N = 10, 40, 80, 120$ and 150 in the preferred basis. The Frobenius norm and purity are plotted in the lower panels. The initial condition is $|\phi(0)\rangle = \sqrt{1/5}|N, 0, 0\rangle + \sqrt{4/5}|0, N, 0\rangle$. τ is in dimensionless units.

around the statistically stationary state are smaller for the TWID than those for the DWID. This difference is noticeable despite the fact that the number of particles considered in figures 4 and 5 is very different. Such a qualitative appreciation is confirmed from the behavior of the Frobenius norm σ . As the number of particles is increased, σ becomes proportionally smaller for the TWID system than for the DWID one. We did an exploration of the DWID dynamics for all the initial conditions used in the analysis for the TWID and found that the consequence of dealing with three instead of two wells, is that the number of particles required to detect the stationary state becomes proportionally smaller. This result can be understood as a natural effect of enlarging the accessible Hilbert space for the system. Thus, based on the information of the scaling of the

Hilbert space with the number of wells in an optical lattice, one can say that the greater the number of wells in the lattice, the smaller the number of particles required to detect the stationary state becomes.

Regarding the number Fock states $|n_1, n_2, n_3\rangle$, which as a matter of fact are eigenstates of the interaction term of Hamiltonian (1), one observes that, when the system is evolved from each basis element a behavior similar to that associated with the SU(3) family of coherent states is found; namely, that the time evolution of ρ_{ij} show oscillations with maximum amplitude, and then dampen down until the mean stationary state is reached. To conclude the study of the intrinsic decoherence we select as initial state $|\phi(0)\rangle = \sqrt{1/5}|N, 0, 0\rangle + \sqrt{4/5}|0, N, 0\rangle$. In figure 6 we plot real and imaginary components of ρ^R in the

Fock basis and σ . As one can see from these figures, one can confirm again the existence of the statistically stationary state.

As illustrated above, the time to observe the collapse to a stationary state depends strongly on the initial condition. However, our numerical simulations, together with the experimental counterpart for two well systems [23] and optical potentials composed of more than three wells [16], allow us to estimate that $\Delta t \sim 500$ ms is required to reach such a regime in an experiment for three wells.

Another conclusion reached from our study is that the existence of the stationary state is also a consequence of dealing with a many-body description and not an effect of a nonlinearity, as in the transition from JO-ST in MF scheme. In other words, there is no way in which the nonlinear term in the MF approach can drive the collapses observed within the BH scheme. To verify this statement we have considered values of Λ below and above the transition in both MF and BH schemes for the analyzed initial conditions. We found, as expected, that the Frobenius norm is always larger in MF than in BH as the number of particles increases.

3.2. Purity

Another dynamical aspect that we can study within the BH scheme and that also emerges as a consequence of the presence of particle–particle interactions, is the degree of mixing that a state has. The purity of an N -particle system is defined as

$$\mathcal{P}(t) = \text{Tr}(\rho^N(t)^2) = \text{Tr}(U^\dagger \rho_0^N U U^\dagger \rho_0^N U) = \text{Tr}((\rho_0^N)^2), \quad (7)$$

where U is the evolution operator defined in section 1, and ρ_0^N represents the N -body density matrix at $t = 0$. As mentioned above, such a quantity is an effective measure that specifies the degree of mixing of a state [50–52]. A pure or coherent state is characterized by having $\mathcal{P} = 1$ while $\mathcal{P} < 1$ indicates that the state is mixed. If the initial state is pure—which means that a complete set of measurements has been performed—it remains pure for all times, whenever the state evolves over time under the action of the unitary operator U . However, an interesting question to be addressed is the investigation of the purity of few-body states when they are initially described by a pure state. By making the analogy with the intrinsic decoherence extracted from the one-body reduced density matrix, we investigate here the purity of the reduced density matrix ρ^R to analyze the role of the interactions in transforming an initial pure state into a mixed one.

We define the purity \mathcal{P} of the one-body reduced density matrix ρ^R as

$$\mathcal{P} = \text{Tr}(\rho^R(t)^2). \quad (8)$$

where

$$\text{Tr}(\rho^R)^2 = \sum_{i,j} \langle \phi(t) | b_j^\dagger b_i | \phi(t) \rangle \langle \phi(t) | b_i^\dagger b_j | \phi(t) \rangle,$$

being $|\phi(t)\rangle$ an N -body system state, that is, a pure state. By taking the derivative of $\mathcal{P}(t)$ with respect of time t one finds

$$i\hbar \frac{\partial \text{Tr}(\rho^R)^2}{\partial t} = 2 \sum_{i,j} \langle \phi(t) | [b_j^\dagger b_i, H_0 + H_I] | \phi(t) \rangle \langle \phi(t) | b_i^\dagger b_j | \phi(t) \rangle,$$

where $H_0 = -J(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2)$ and $H_I = U_0 \sum_{i=1}^3 b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i$.

From the commutation relations for bosons it follows that

$$\sum_{i,j} \langle \phi(t) | [b_j^\dagger b_i, H_0] | \phi(t) \rangle \langle \phi(t) | b_i^\dagger b_j | \phi(t) \rangle = 0.$$

By identifying $\alpha_{i,j} = \langle \phi(t) | b_i^\dagger b_j | \phi(t) \rangle$, $\beta_{i,j,k,l} = \langle \phi(t) | b_i^\dagger b_j^\dagger b_k b_l | \phi(t) \rangle$ and rescaling the time t to dimensionless units $\tau = Jt/\hbar$, one can write the final expression for the time derivative of the purity of the reduced density matrix,

$$\frac{\partial \text{Tr}((\rho^R)^2)}{\partial \tau} = -4\Lambda \sum_{i \neq j} \text{Im}(\alpha_{ij}(\beta_{jii} - \beta_{iji})). \quad (9)$$

Since in general the right-hand side of the last equation is not zero, one concludes that when an initial pure state evolves in time it becomes a mixed one. We should note, however, that the right-hand side becomes zero when the stationary state has been reached.

To illustrate the behavior of the evolution in time of the purity for the one-body density matrix we chose as initial states those considered above for the analysis of the intrinsic decoherence. In the lower panel of figures 2–6 it is shown the purity. The initial conditions are specified in their captions. The SU(3) states have an initial purity equal to 1, figure 6 corresponds to a mixed state with $\mathcal{P} = 17/25$.

From figures 2–6 one can confirm, as predicted from equation (9) that, for any arbitrarily small value of Λ , the purity decreases, thus showing the tendency of an initial state to become mixed. In this case we also appreciate the role of the system size, particularly, when the state evolves towards a mixed state. The information provided by the purity is complementary to the information obtained from σ . We observe that the time window in which the coherence is apparently increased is small compared with the time in which it diminishes.

4. Final remarks

We have investigated the dynamics and onset of stationarity in an interacting BEC confined in a triple well potential in 1D. The analysis was performed in the Bose–Hubbard framework by studying the evolution in time of one-body properties. In particular, we concentrated on examining the role of the system's size. In our study we revisited the analysis of the stationary states and distinguished among three kinds of stationary states: the semiclassical stationary state predicted within the MF frame; the truly stationary or eigenenergy state, obtained by direct diagonalization of the Hamiltonian written in the BH scheme; and the statistically stationary state, revealed from the evolution in time of the one-body reduced density matrix.

On the dynamical side we studied two aspects that can only be accounted for within the BH scheme, namely, the effects of intrinsic decoherence and the mixing of an initial pure state. To perform such an analysis we considered the evolution in time of one-body properties in a N -particle environment. From the time behavior of the one-body reduced density matrix we reached the conclusion that, within fluctuations around a mean constant value, stationarity is always observed

in every closed BH-like Hamiltonian structure. To determine the role of the system size in the observation of a stationary state we quantified the deviations from the mean stationary value in terms of a matrix norm, the Frobenius norm. We studied the evolution of the one-body reduced density matrix to trace for signatures of decoherence, namely, we showed that it is always possible to follow the evolution in a particular basis where the off-diagonal elements of the reduced density matrix become, within the fluctuations, zero in the stationary state. Regarding purity, we also considered the one-body reduced density matrix to show the influence of particle–particle interactions in transforming an initially pure state into a mixed one. We demonstrated that this conclusion remains valid for Hamiltonians with Bose–Hubbard-like structures. Our numerical calculations for $N = 10, 40, 80, 120$ and 150 allowed us to verify that the onset of stationarity is also a consequence of dealing with a many-body description, and not an effective result driven by a non-linearity as the transition between JO and ST in the MF approach. We compared these results with those arising from the analysis of the double well system and reach the conclusion that the consequence of having three instead of two wells is that the number of particles required to detect the stationary state becomes proportionally smaller. Our simulations suggest that $N \geq 10^2$ allows observation of stationarity in TW1D systems. In general, one can state that the greater the number of wells in the 1D lattice is, the smaller the number of particles required to detect the stationary state.

According to the fundamental hypothesis of statistical physics, the existence of a stationary state is based on the observation that every isolated many-body system, whose energy is sharply defined and that is left unperturbed, attains a state that no longer evolves in time—the equilibrium state. This state is detected when few-body physical quantities are measured: as, for example, density, temperature, pressure, energy and compressibilities, among others. We believe that the statistically stationary states studied here are analogs of equilibrium states. We make such an analogy since the Bose atoms confined in the triple well potential (and in general an optical lattice) constitute a closed system in which the dynamics of arbitrary initial states is dictated by the evolution operator $U = e^{-iHt/\hbar}$, that leads the system towards a stationary state. It thus appears that intrinsic decoherence is synonymous with relaxation towards an equilibrium state in a closed system, and that the typical observation of equilibrium thermodynamic states in closed systems is a consequence of intrinsic decoherence.

Acknowledgments

This work was partially funded by grants IN107014 DGAPA (UNAM). ACG acknowledges support from CONACYT.

Appendix

Let us start by considering the Gross–Pitaevskii equation for the macroscopic wave function $\Psi(x, t)$, which in the case of a triple well potential represented by $V_{\text{ext}}(x)$, adopts the form

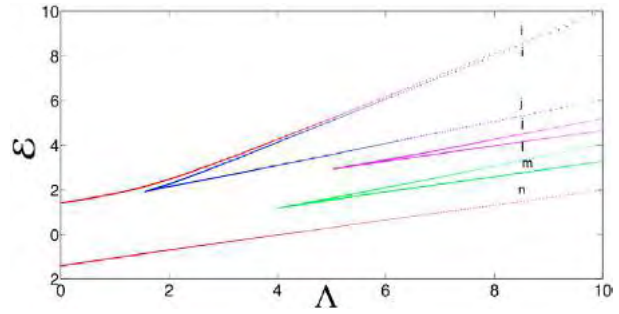


Figure A1. Stationary energies as a function of $\Lambda = U_0 N / J$ for MF scheme. Letters on the curves indicate the number of negative eigenvalues of the Hessian matrix $\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \right)$, i, j, l, m, n correspond to 4, 3, 2, 1 and 0 respectively.

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

In terms of the approximate three lowest eigenfunctions of the single-particle Hamiltonian $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(x)$ [44], one can write the localized basis states $\psi_j(x)$, $j = 1, 2, 3$ and then substitute it into the macroscopic wave function $\Psi(x, t) = \psi_1(x)\Phi_1(t) + \psi_2(x)\Phi_2(t) + \psi_3(x)\Phi_3(t)$, being the time dependence included in $\Phi_j(t)$. Thus, by neglecting constant energy factors proportional to $E_j = \int \left(-\frac{\hbar^2}{m} |\nabla \psi_j|^2 + |\psi_j|^2 V_{\text{ext}} \right) dx$ we arrive at the equations $i\hbar \frac{\partial \Phi_j(t)}{\partial t} = U_j N_j \Phi_j - J_{12} \Phi_2$ and $i\hbar \frac{\partial \Phi_2(t)}{\partial t} = U_2 N_2 \Phi_2 - J_{12} \Phi_1 - J_{23} \Phi_3$ where $j = 1, 3$, $U_j = g \int |\psi_j|^4 dx$, $J_{12} = -\int (\nabla \psi_1 \cdot \nabla \psi_2 + \psi_1 V_{\text{ext}} \psi_2) dx$, $J_{23} = -\int (\nabla \psi_2 \cdot \nabla \psi_3 + \psi_2 V_{\text{ext}} \psi_3) dx$ and N_i , $i = 1, 2, 3$, represent the particle population in wells left, center and right respectively. The stationary states of the non-linear Schrödinger equation are $\Phi_j(t) = \sqrt{N_j} \exp i(\phi_j - \nu t)$. Thus, by assuming $U_i = U_0$ and $J_{ij} = J$ for $i, j = 1, 2, 3$, and substituting $n_i = N_i / N$ we find

$$\varepsilon = -2\sqrt{n_1 n_2} \cos \phi_{21} - 2\sqrt{n_2 n_3} \cos \phi_{23} + \Lambda(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad (\text{A.1})$$

where ε is the dimensionless energy per particle $\varepsilon = \hbar \nu / NJ$, and $\phi_{ij} = \phi_j - \phi_i$ measures the phase difference among the condensates in wells i and j . One can see that ε is a function of n_i and ϕ_{ij} and, thus, we need to explore such a phase space to determine the values that produce a solution ε for a given value of Λ . This can be done if a classical Hamiltonian is associated with the constant energy ε , and then stationarity is imposed on the corresponding Hamilton equations for the conjugate variables (ϕ_{ij}, n_i) . Such stationary solutions correspond to maximum, minimum or saddle points. The stability character of each solution was determined by means of the eigenvalues of the Hessian matrix $\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \right)$, being x_i the phase difference ϕ_{ij} or the population n_i . From the eigenvalues of this matrix we established if a given stationary solution corresponds to

a maximum, minimum or saddle point. We recall that these extrema correspond to having all the eigenvalues negatives, all the eigenvalues positive or eigenvalues with different signs, respectively. In figure A1 we summarize all the stationary states consistent with the Hamilton equations for n_i and ϕ_{ij} . In the same figure we indicate the number of negative eigenvalues of the Hessian matrix associated with each stationary solution to distinguish the stability character of each solution.

We observe from figure 1 that there is a discrepancy in the number of stationary states predicted by each approach. We attribute such lack of compatibility to the essential difference between the two approaches, namely that MF treatment is always an effective equation for one-body properties, while the BH approach considers one- and two-body terms from which effects of m -body properties (with $m < N$) can be tracked down. In particular, the expectation value of the Hamiltonian in the eigenstate basis, the energy spectrum, which is a two-body property. This allows us to stress that within the MF approach, JO and ST regimes can be predicted, while stationary properties involving two or more bodies can be extracted in the BH scheme only. In addition, the inclusion of particle–particle collisions within the BH approach does permit probing any arbitrary m -particle property, either stationary or dynamical.

References

- [1] Bartenstein M, Altmeyer A, Riedl S, Jochim S, Chin C, Hecker Denschlag J and Grimm R 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 203201
- [2] Zwierlein M W, Abo-Shaeer J R, Schirotzek A, Schunck C H and Ketterle W 2005 *Nature* **435** 1047
- [3] Zwierlein M W, Schunck C H, Schirotzek A and Ketterle W 2006 *Nature* **442** 54–58
- [4] Gaebler J P, Stewart J T, Bohn J L and Jin D S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 200403
- [5] Weinmann P 2011 Setting up a high-resolution optical system for trapping and imaging ultracold chromium atoms *Diploma Thesis* University of Stuttgart
- [6] Lahaye T, Pfau T and Santos L 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 170404
- [7] Clément D, Varón A F, Retter J A, Sanchez-Palencia L, Aspect A and Bouyer P 2006 *New J. Phys.* **8** 165
- [8] Lye J E, Fallani L, Modugno M, Wiersma D S, Fort C and Inguscio M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 070401
- [9] Andrews M R, Townsend C G, Miesner H-J, Durfee D S, Kurn D M and Ketterle W 1997 *Science* **275** 637
- [10] Cataliotti F S, Burger S, Fort C, Maddaloni P, Minardi F, Trombettoni A, Smerzi A and Inguscio M 2001 *Science* **293** 843
- [11] Will S, Best T, Schneider U, Hackermüller L, Lühmann D-S and Bloch I 2010 *Nature* **465** 09036
- [12] Bloch I, Hänsch T W and Esslinger T 2000 *Nature* **403** 166
- [13] Greiner M, Mandel M, Hnsch T W and Bloch I 2002 *Nature* **419** 00968
- [14] Hagley E W *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **84** 3112
- [15] Nesi F and Modugno M 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** S101
- [16] Raithel G, Phillips W D and Rolston S L 1997 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3615
- [17] Morsch O, Müller J H, Cimpini D, Cristini M, Blakie P B, Williams C J, Julienn P S and Arimondo E 2003 *Phys. Rev. A* **67** 031603(R)
- [18] Shchesnovich V S and Konotop V V 2007 *Phys. Rev. A* **75** 063628
- [19] Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii L P and Stringari S 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 463
- [20] Zhou Y, Zhai H, Lü R, Xu Z and Chang L 2003 *Phys. Rev. A* **67** 043606
- [21] Graham R, Walls D F, Collett M J, Fliesser M and Wright E M 1998 *Phys. Rev. A* **57** 503
- [22] Sinatra A, Castin Y and Witkowska E 2009 *Phys. Rev. A* **80** 033614
- [23] Albiez M, Fati R, Folling J, Hunsmann S, Cristiani M and Oberthaler M K 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 010402
- [24] Bar-Gill N, Kurizki G, Oberthaler M and Davidson N 2009 *Phys. Rev. A* **80** 053613
- [25] Caballero-Benitez S F, Romero-Rochín V and Paredes R 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 095301
- [26] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W and Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3108
- [27] Caballero-Benitez S F, Romero-Rochín V and Paredes R 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 115301
- [28] Hennig D, Jorgensen M F, Christiansen P L and Clausen C B 1995 *Phys. Rev. E* **51** 2870
- [29] Nemoto K, Holmes C A, Milburn G J and Munro W J 2000 *Phys. Rev. A* **63** 013604
- [30] Franzosi R and Penna V 2001 *Phys. Rev. A* **65** 013601
- [31] Franzosi R and Penna V 2003 *Phys. Rev. E* **67** 046227
- [32] Buonsante P, Franzosi R and Penna V 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 050404
- [33] Mossmann S and Jung C 2006 *Phys. Rev. A* **74** 033601
- [34] Liu B, Fu L B, Yang S P and Liu J 2007 *Phys. Rev. A* **75** 033601
- [35] Graefe E M, Korsch H J and Witthaut D 2006 *Phys. Rev. A* **73** 013617
- [36] Rab M, Cole J H, Parker N G, Greentree A D, Hollenberg L C L and Martin A M 2008 *Phys. Rev. A* **77** 061602(R)
- [37] Nesterenko V O, Novikov A N, de Souza Cruz F F and Lapolli E L 2009 *Laser Phys.* **19** 616
- [38] Thiago F, Viscondi and Furuya K 2011 *J. Phys. A: Math. Theor.* **44** 175301
- [39] Schlagheck P, Malet F, Cremon J C and Reimann S M 2010 *New J. Phys.* **12** 065020
- [40] Stickney J A, Anderson D Z and Zozulya A A 2007 *Phys. Rev. A* **75** 013608
- [41] Wright E, Eilbeck J C, Hays M H, Miller P D and Scott A C 1993 *Physica D* **69** 18
- [42] Lushuai C, Brouzos I, Zöllner S and Schmelcher P 2011 *New J. Phys.* **13** 033032
- [43] Jason P, Johansson M and Kirr K 2012 *Phys. Rev. E* **86** 016214
- [44] Paredes R 2006 *Phys. Rev. A* **73** 033616
- [45] Paredes R and Neri E 2009 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 035301
- [46] Milburn G J 1991 *Phys. Rev. A* **44** 5401
- [47] Joos E and Zeh H D 1985 *Physica B* **59** 223
- [48] Joos E 1986 *Phys. Lett. A* **116** 6
- [49] Zurek W H 1991 *Phys. Today* **44** 36
- [50] Viscondi T, Furuya K and de Oliveira M C 2010 *Eur. Phys. Lett.* **90** 10014
- [51] Chianca C V and Olsen M K 2012 *Opt. Commun.* **285** 825–9
- [52] Somma R, Ortiz G, Barnum H, Knill E and Viola L 2004 *Phys. Rev. A* **70** 042311
- [53] Meyer C D 2000 *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra* (Philadelphia: SIAM) p 279

Energetic cooling below the BEC transition: a quantum kinetic description within the Bogoliubov approximation

This content has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text.

2014 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47 215304

(<http://iopscience.iop.org/0953-4075/47/21/215304>)

View [the table of contents for this issue](#), or go to the [journal homepage](#) for more

Download details:

IP Address: 132.248.209.200

This content was downloaded on 12/05/2016 at 16:12

Please note that [terms and conditions apply](#).

Energetic cooling below the BEC transition: a quantum kinetic description within the Bogoliubov approximation

A Camacho-Guardian, M Mendoza-López, V Romero-Rochín and R Paredes

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

E-mail: rosario@fisica.unam.mx

Received 19 August 2014, revised 18 September 2014

Accepted for publication 29 September 2014

Published 23 October 2014

Abstract

The dynamics of Bose–Einstein condensation in a three-dimensional harmonic trap is studied explicitly including the Bogoliubov approximation for temperatures below the critical one. To model the evolution towards equilibrium at each cooling step, we derive quantum kinetic equations that describe the dynamics of the gas for temperatures above and below the transition temperature. These equations, valid in the Born and Markov approximations, consider the essential role of the chemical potential as the main parameter that signals the transition. The kinetic equation that describes the growth of the condensate below the transition temperature is derived within the Bogoliubov approximation. To illustrate our results we propose an energetic cooling protocol and simulate the whole sequence of the formation of a condensate.

Keywords: Bose–Einstein condensation, quantum kinetic equation, Bogoliubov approximation

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

1. Introduction

The description of the dynamics of the formation of a Bose–Einstein condensate (BEC) remains as an unabated problem [1–14]. Among several issues, we point out mainly the consideration of the role of the interatomic collisions at different strengths and the proper description of the system when the condensate is present. In this work we readdress the kinetics of the formation of a BEC within a weak-coupling and Markov limits [1–5], but taking into account that for temperatures below the critical one T_c , namely, when the chemical potential becomes zero in the dilute limit, the particles in the separate ground and excited states are not conserved. To consider this situation we derive a master equation, valid for those temperatures only, in which Bogoliubov approximation [14–16] is explicitly used. For temperatures above T_c we also derive a master equation that is essentially similar to previous ones [1–5].

In actual experiments, the observation of the BEC transition requires to perform several cooling stages in a thermally

isolated Bose gas, in which a given equilibrium state is perturbed by evaporating atoms in highly excited states, thus reducing its energy and by irreversible collisional processes, the system lowers its temperature. This cooling is repeated until the system attains the critical temperature T_c at which the transition to condensation occurs. By contrast, in this article we propose an energetic cooling protocol, in which the temperature is decreased while maintaining the number of particles as a constant. The temperature at each cooling step is lowered by transferring particles from higher energy levels and distributing them in levels with lower energy. This protocol may represent an alternative route for the experimentalists to achieve the degeneration regime with a much larger number of atoms than usual. Although it is not the purpose of this article to describe how such a protocol should be implemented, we suggest that the transferring to lower energy levels may be achieved by means of impulsive anti-Stokes stimulated Raman scattering [17] with properly tailored ultrashort microwave pulses, similarly to techniques used with light in single-molecule wavepacket interferometry

[18, 19]. In this article we present numerical simulations of the obtained kinetic equations within the proposed energetic cooling protocol.

This work is organized as follows. In section 2 we present the derivation of the kinetic master equations. In section 3 we present numerical results that model the energetic cooling process as several stages are performed in a bosonic gas towards the formation of a condensate. Finally, in section 4 a summary of this work is given.

2. Quantum kinetic equations for the formation of a condensate

2.1. Kinetic theory for temperatures above T_c

The Hamiltonian of the system consists of an unperturbed Hamiltonian H_0 that takes into account an isotropic harmonic confinement of the Bose atoms, perturbed by a weakly interacting part V that models their binary collisions. In a second quantized formalism these are

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{i}} \epsilon_{\vec{i}} a_{\vec{i}}^\dagger a_{\vec{i}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}\vec{k}\vec{l}} \langle \vec{i}\vec{j} | V | \vec{k}\vec{l} \rangle a_{\vec{i}}^\dagger a_{\vec{j}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{l}} \\ &= H_0 + V, \end{aligned} \quad (1)$$

where $\epsilon_{\vec{i}} = \hbar\omega(i_x + i_y + i_z)$ are the single particle eigenenergies in a harmonic potential, with $\vec{i} = (i_x, i_y, i_z)$. $a_{\vec{i}}^\dagger$ and $a_{\vec{i}}$ are the operators that create and destroy particles in the state \vec{i} . We have omitted the ground state energy and as we recall below, this fixes the BEC transition at $\mu = 0$. The degeneracy of each energy is given by $g_i = \frac{1}{2}(i+1)(i+2)$. We shall assume that the ultracold gas is very diluted and consequently only s -wave binary collisions are relevant for the dynamics [20–22]. Thus, the interaction term can be written as

$$\langle \vec{i}\vec{j} | V | \vec{k}\vec{l} \rangle = g \int d^3\vec{x} \varphi_{\vec{i}}(\vec{x}) \varphi_{\vec{j}}(\vec{x}) \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) \varphi_{\vec{l}}(\vec{x}) = g V_{\vec{i}\vec{j}\vec{k}\vec{l}},$$

where $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$, with $a_s > 0$ the s -wave scattering length and $\varphi_{\vec{i}}(\vec{x})$ are the eigenfunctions of the unperturbed Hamiltonian H_0 with eigenvalues $\epsilon_{\vec{i}}$.

Our starting point is the derivation, in the weak coupling limit and the Markov approximation, of an irreversible master equation for the one body reduced density matrix operator [23–27]. By following a standard derivation procedure one arrives to the final form of the equations that satisfy the occupation numbers $n_{\vec{i}}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{\vec{i}}(\tau)}{\partial \tau} &= - \sum_{\vec{i}\vec{j}\vec{k}\vec{l}} \left\{ V_{\vec{i}\vec{j}\vec{k}\vec{l}}^2 \delta_{\epsilon_{\vec{i}}+\epsilon_{\vec{j}},\epsilon_{\vec{k}}+\epsilon_{\vec{l}}} \right. \\ &\quad \times \left[n_{\vec{i}} n_{\vec{k}} (1 + n_{\vec{j}} + n_{\vec{l}}) - n_{\vec{i}} n_{\vec{j}} (1 + n_{\vec{k}} + n_{\vec{l}}) \right] \\ &\quad \left. + 2V_{\vec{i}\vec{j}\vec{l}\vec{i}} V_{\vec{k}\vec{l}\vec{k}\vec{j}} \delta_{\epsilon_{\vec{j}},\epsilon_{\vec{l}}} n_{\vec{i}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{i}} - n_{\vec{j}}) \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

where $\tau = (8a^2 m\omega^2/\hbar)t$ is a dimensionless time. It is of interest to note that the last term in the above equation typically does not appear in previous derivations [1–5]. We

should point out that kinetic equations in the literature are the result of considering ergodic assumptions for the one body reduced density matrix, at the start of the derivations. Nevertheless such a starting point is actually valid in the case of an isotropic and homogeneous system [28]. It is important to emphasize that although this term should contribute in general, it does not when an ergodic approximation is made, as we shall see below.

By a simple substitution one can show that the steady state solution of equation (2), for all single particle states \vec{i} , including the ground state $\vec{i} = (0, 0, 0)$, is the Bose–Einstein distribution

$$n_{\vec{i}} = \frac{1}{\exp[(\epsilon_{\vec{i}} - \mu)/kT] - 1}, \quad (3)$$

where the temperature $\beta = 1/kT$ and the chemical potential μ can be obtained by imposing the associated normalization conditions on the total energy $E = \sum_{\vec{i}} \epsilon_{\vec{i}} n_{\vec{i}}$, and on the total number of particles $N = \sum_{\vec{i}} n_{\vec{i}}$. However, if we consider $\mu = 0$ in the Bose–Einstein distribution (3) and substitute it in on the right-hand side of equation (2), we find that the left-hand side is zero if and only if $T = 0$. This result is inconsistent with the fact that a non-uniform ideal Bose gases can exhibit the Bose–Einstein transition in two and three dimensions. Therefore, taking into account the underlying physics, an alternative kinetic equation for $\mu = 0$ and $T < T_c$ must be derived to properly describe the time evolution and equilibration of the gas.

2.2. Kinetic theory for temperatures below T_c

The most important property of a dilute Bose gas that has experienced the transition to the condensate state is that as a result of having chemical potential equal to zero, the ground state becomes macroscopically populated. As a consequence of this fact the intensive thermodynamic variables, that adjust to the extensive ones, are exclusively determined by the particles occupying the excited states only. Perhaps a most relevant effect when a Bose gas has chemical potential equal to zero, is that the number of particles N is no longer an independent thermodynamic variable. Although in the whole system the number of particles N remains constant, the number of particles in the ground and excited states are not separately conserved since there is no energy cost in adding particles from the excited to the ground state and viceversa. Therefore, if one looks at the isolated fractions of particles in the ground and excited states, a continuous process of creation and annihilation of particles (having $\epsilon_i = 0$) takes place in each one of them.

The binary collisions are the key elements where the non conservation of particles can be taken into account. Since such collisions are the elementary mechanism to reach thermal equilibrium and they involve particles in the ground and excited states, we must have special care in each collision event. Up to now, each pair of particles coming from either the ground state, or the excited states, transform after the collision into a pair of particles that again can occupy the

ground state or the excited states, in such a way that there is no distinction between the fractions of particles in the ground and excited states respectively. Considering the fact that the occupation number in the ground state becomes macroscopic $N_0 \sim N$, we can proceed in a different way treating separately the ground state and the excited states. In particular, we can explicitly assume that below the critical temperature, the fraction of the particles in the excited states participating in the collision process is not conserved. This procedure lead us to derive a new kinetic equation for the excited states. Then, by considering the fact that the *total* number of particles is conserved we can obtain the number of particles in the ground state by subtracting the particles in the excited states from the total number of particles N . To implement this effective non-conservation of particles, we shall consider that the creation and annihilation operators involving the ground state a_0^\dagger and a_0 can be substituted by $a_0^\dagger = a_0 = \sqrt{N_0}$, with N_0 the number of particles in the condensate. This is the Bogoliubov approximation [29], which has already been considered previously in describing equilibrium phase transition of bosonic excitons [30].

To justify our suggestion let us consider one of the terms of the interaction potential, say for example $V = 2 \sum_{\vec{j}, \vec{k}, \vec{l} \neq 0} V_{\vec{j}\vec{0}\vec{k}\vec{l}} a_{\vec{j}}^\dagger a_{\vec{0}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{l}}$, this term represents the annihilation of particles in the states \vec{k} and \vec{l} , and creation of particles in the states \vec{j} and $\vec{0}$. If such a term is substituted by $V = 2\sqrt{N_0} \sum_{\vec{j}, \vec{k}, \vec{l} \neq 0} V_{\vec{j}\vec{k}\vec{l}\vec{0}} a_{\vec{j}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{l}}$, the number of particles in the excited states is explicitly not conserved, although of course, the missing particle belongs to the ground state. After a straightforward algebra is done, we obtain

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{\vec{\eta}}(\tau)}{\partial \tau} = & - \sum_{\vec{i}, \vec{k}, \vec{l} \neq 0} \left\{ V_{\vec{i}\vec{\eta}\vec{k}\vec{l}}^2 \delta_{\epsilon_{\vec{\eta}} + \epsilon_{\vec{i}}, \epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{l}}} \right. \\ & \times \left[n_{\vec{i}} n_{\vec{k}} (1 + n_{\vec{\eta}} + n_{\vec{l}}) - n_{\vec{l}} n_{\vec{\eta}} (1 + n_{\vec{k}} + n_{\vec{i}}) \right] \\ & + 2V_{\vec{i}\vec{\eta}\vec{l}\vec{i}} V_{\vec{k}\vec{l}\vec{k}\vec{\eta}} \delta_{\epsilon_{\vec{\eta}}, \epsilon_{\vec{i}}} n_{\vec{i}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{l}} - n_{\vec{\eta}}) \left. \right\} \\ & + N_0 \sum_{\vec{k}, \vec{l} \neq 0} V_{\vec{\eta}\vec{k}\vec{l}\vec{0}}^2 \\ & \times \left\{ 2\delta_{\epsilon_{\vec{\eta}} + \epsilon_{\vec{i}}, \epsilon_{\vec{k}}} \left[n_{\vec{k}} (1 + n_{\vec{\eta}} + n_{\vec{l}}) - n_{\vec{l}} n_{\vec{\eta}} \right] \right. \\ & + \delta_{\epsilon_{\vec{\eta}}, \epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{l}}} \left[n_{\vec{l}} n_{\vec{k}} - n_{\vec{\eta}} (1 + n_{\vec{k}} + n_{\vec{l}}) \right] \\ & \left. + 2N_0^2 \sum_{\vec{k}} \delta_{\epsilon_{\vec{\eta}}, \epsilon_{\vec{k}}} V_{\vec{\eta}\vec{k}\vec{0}\vec{0}}^2 (n_{\vec{k}} - n_{\vec{\eta}}) \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

with

$$N_0(\tau) = N - \sum_{\vec{\eta} \neq 0} n_{\vec{\eta}}(\tau),$$

being N_0 is the number of particles in the ground state. By substituting

$$n_{\vec{\eta}} = \frac{1}{\exp[\epsilon_{\vec{\eta}}/kT] - 1}, \quad (5)$$

one can show that this is the correct stationary solution of

equation (4) for the excited states, that is, the Bose–Einstein distribution for zero chemical potential.

Master equations using the Bogoliubov approach has already been considered [14]. In that approach the Bose gas is coupled to a thermal reservoir, and the thermalization is mediated by the interactions between the reservoir and the Bose gas and by interparticle interactions. Here we propose a scenario where the condensation takes place into an isolated system, and therefore, the inclusion of a reservoir is not needed.

3. Simulation of the cooling process

In this section we present numerical results that model the cooling process as several cooling stages are performed, both for $T > T_c$ and $T < T_c$, namely, by solving equations (2) and (4) for $\mu < 0$ and $\mu = 0$ respectively. But before doing so, we shall also point out along the way the difficulties posed by a finite-size calculation. We use dimensionless units $\hbar = k_B = \omega = 1$.

3.1. Numerical limitations

The sums over the states on the right hand side in the kinetic equations for $\mu < 0$ and $\mu = 0$ (equations (2) and (4)) extend to infinite, and therefore, an infinite number of coupled equations for the occupation numbers $n_{\vec{\eta}}$ must, in principle, be solved. In a real situation, however, prior to the first cooling stage, the gas has been precooled by some other methods and the atoms in the Bose gas do not occupy very high energy levels, namely, the ratio of their occupation numbers compared to those in the lowest levels is negligible. A simple calculation shows that for $T \approx 10^{-6}$ K and a typical trap frequency $\omega \approx 2\pi(100)$ Hz, the maximum level occupied in the harmonic confinement corresponds to $\mathcal{N} \approx 100$ energy levels. In principle, considering such as the highest occupied level would be a good starting point for studying the dynamics of the condensation, and thus solving a finite number of equations. However, $\mathcal{N} = 100$ is still an unattainable situation. As we discuss below, we shall use $\mathcal{N} = 40$ as the maximum energy level within an ‘ergodic’ approximation.

Two numerical tasks become impracticable as the highest energetic level in the sums of kinetic equations grows. One is the number of coupled kinetic equations that have to be solved and the other is the determination of the collision integrals $V_{\vec{i}\vec{j}\vec{k}\vec{l}}$. Because the degeneracy grows with the energy level, the number of coupled equations to be solved increases exponentially. For instance, for $\mathcal{N} = 100$ energy levels, there are 171 700 states, while for $\mathcal{N} = 40$ one finds 11 480 states, and thus, those are the number of linear coupled equations to solve in each case. On the other hand, since the right hand side of equations (2) and (4) involves an enormous number of sums, to be calculated at each time step, the calculation is even harder. For example, for $\mathcal{N} = 40$, the number of operations per iteration is of the order of 10^{15} . We have estimated the time needed for this in a standard workstation,

yielding of the order of 10^7 seconds. This poses a very stringent restriction in the number of states (and thus, levels) that we can practically include. Therefore, we shall adopt the ‘ergodic assumption’ proposed in [1] to deal with the dynamical description of the interacting Bose gas.

The basic idea of the ergodic assumption is that the number of particles in a state depends only on the energy of the state $\epsilon_{\bar{m}} = m\omega$, just as in thermal equilibrium. We then write $n_{\bar{m}} \equiv n_m$, namely asserting that states with the same energy have the same population. To implement the ergodic hypothesis, we assume that the initial state is one of thermal equilibrium and then assume it remains ergodic throughout. Using this hypothesis we define an ergodic collision kernel [1] as

$$I_{ikml} = \delta_{\epsilon_i + \epsilon_k, \epsilon_m + \epsilon_l} \sum_{\bar{i}, \bar{m}, \bar{k}, \bar{l}} V_{i\bar{m}k\bar{l}}^2 \prod_j \delta_{\epsilon_j, \epsilon_j} \quad (6)$$

with j standing for all values $\{i, m, k, l\}$. This collision kernel must be numerically obtained. Here we have calculated the kernel for $\epsilon_j \leq 40\omega$. The ergodic kinetic equation for $T > T_c$ is now

$$g_m \frac{\partial n_m(\tau)}{\partial \tau} = - \sum_{ikl} I_{ikml}^2 \delta_{\epsilon_m + \epsilon_i, \epsilon_k + \epsilon_l} \left[n_l n_k (1 + n_m + n_i) - n_i n_m (1 + n_k + n_l) \right], \quad (7)$$

while the kinetic equation for $T < T_c$ becomes

$$g_m \frac{\partial n_m(\tau)}{\partial \tau} = - \sum_{ikl} I_{ikml}^2 \delta_{\epsilon_m + \epsilon_i, \epsilon_k + \epsilon_l} \left[n_l n_k (1 + n_m + n_i) - n_i n_m (1 + n_k + n_l) \right] + N_0 \sum_{ki} I_{mki0} \left\{ 2\delta_{\epsilon_m + \epsilon_i, \epsilon_k} \times \left[n_k (1 + n_m + n_i) - n_i n_m \right] + \delta_{\epsilon_m, \epsilon_i + \epsilon_k} \left[n_i n_k - n_l (1 + n_k + n_i) \right] \right\}. \quad (8)$$

$$N_0(\tau) = N - \sum_m n_m(\tau)$$

and we recall that the sums in the former case start with 0, while in the latter they begin with 1. Using the ergodic approximation lead us to reduce significantly the number of coupled equations. To the best of our knowledge, $\mathcal{N} = 40$ levels for the calculation of the ergodic collision integrals $I_{ik\eta l}$ is the highest performed so far.

3.2. Energetic cooling protocol

For our study we propose an energetic cooling protocol. It consists in maintaining fixed the number of particles during the whole cooling process while several reductions of energy lead the system to decrease its temperature. The basic idea of cooling consists in transferring particles from higher energy levels to lower ones. The system, being then out of equilibrium, will evolve to the equilibrium state via collisions as described by the kinetic equations. This process is successively repeated to lower the system temperature at each ‘evaporative energetic step’. Figure 1(a) illustrates a possible sequence of an energetic cooling process. The horizontal

dashed (red) line shows a non-equilibrium process at constant number of particles N that, starting from a temperature $T > T_c$ reaches BEC, by crossing the solid (black) line which represents the number of particles in the excited states N_{exc} , as a function of the critical temperature T_c , namely, at the onset of Bose–Einstein condensation. The latter is given by

$$N_{\text{exc}} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} \Bigg|_{\mu=0}. \quad (9)$$

The numerical simulation is initiated by distributing N particles following the Bose–Einstein statistics in the first 40 levels. In the first energetic cooling step we remove the particles lying, say, in level m , and distribute them uniformly in the level $m - 1$ for $m \leq 40$. The system is allowed to evolve¹ through equation (7), for $\mu < 0$ which corresponds to $T < T_c$, until it reaches the equilibrium state associated to this first cooling stage². This process is successively repeated to follow the transition towards the condensation transition. Once the transition is crossed, the dynamics should follow that of equation (8), corresponding to $\mu = 0$ and $T < T_c$. As we shall discuss in detail, due to the finite number of particles, there is a clear crossover between the solutions of the two ergodic sets of equations, rather than a sharp, discontinuous transition, as expected in the thermodynamic limit.

To make use of the energetic cooling protocol we prepare the initial state considering the maximum energy level allowed by our computational capabilities. To ensure that all the particles participate in the dynamics during each energetic cooling step, it is necessary to select initial appropriate values of μ and T . In figure 1(b) we plot the occupation number as a function of energy level in a harmonic oscillator for three pairs of values of T and μ , indicated in the figure. As it can be seen from this plot, the number of particles below the level $\mathcal{N} = 40$ depends on the values of T and μ . Given a fixed values of T and μ , one can estimate the relative number of particles above $\mathcal{N} = 40$ through

$$\Delta N = \frac{N_{\infty}(T, \mu) - N_{40}(T, \mu)}{N_{\infty}(T, \mu)} \quad (10)$$

with $N_{\mathcal{N}}(T, \mu) = \sum_{m=0}^{\mathcal{N}} g_m \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_m - \mu)} - 1}$ and $N_{\infty}(T, \mu)$ the corresponding value of N for an ‘infinite’ number of states $\mathcal{N} \rightarrow \infty$.

We have selected two pairs of initial values of temperature T and chemical potential μ to illustrate the predictions of the kinetic equations for $\mu < 0$ and $\mu = 0$ (equations (7) and (8)). These are, $(T = 1.5, \mu = -2.1)$ and $(T = 1.0, \mu = -0.25)$, ensuring that less than 6% and 8% of particles respectively will remain above the $\mathcal{N} = 40$ level. The number of particles in each case is $N_{40}(1.5, -2.1) = 100$ and $N_{40}(1.0, -0.25) = 500$. The critical temperatures for

¹ To solve the coupled system we use the Euler method, selecting an appropriate temporal step to ensure the conservation of the total energy and the total number of particles.

² The criterion that we use to identify the situation of equilibrium at each cooling stage, is that in two consecutive time steps the value of each $n_m(\tau)$ does not change in more than 10^{-12} .

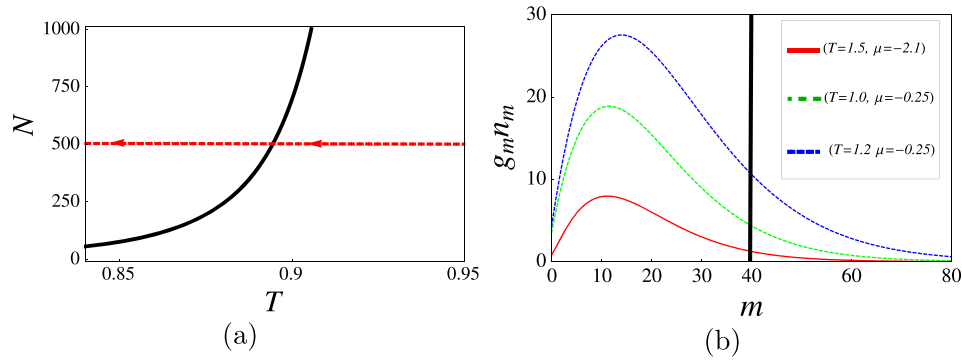


Figure 1. (a) Scheme of an energetic cooling protocol. The solid (back) line indicates the dependence of the number of particles in the excited states N_{exc} as a function of the dimensionless temperature T for $\mu = 0$, while the (red) dashed line indicates the temperature that the whole system of N particles acquires in its cooling process. BEC occurs where the lines cross. In this figure, $N = 500$. (b) Bose–Einstein distributions for different values of the chemical potential μ and temperature T . The vertical line indicates the maximum number of energy levels considered in our numerical simulations.

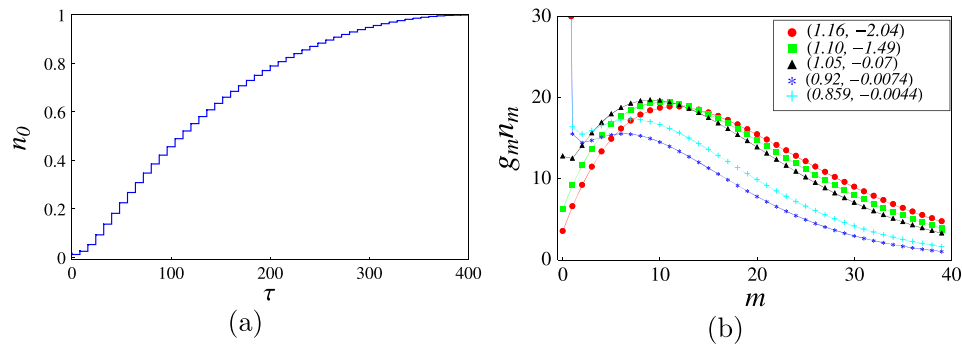


Figure 2. (a) Growth of the normalized number of particles in the ground state $n_0 = N_0/N$, for $N = 100$, as a function of dimensionless time τ along the whole sequence of the energetic cooling procedure, using the kinetic equation (7) for $\mu < 0$ ($T > T_c$). Each ‘step-like’ feature in the curve is the result of one process of lowering the energy and its equilibration. (b) Stationary distributions of the ground and excited states for several energetic cooling steps. Different curves correspond to different values of (T, μ) as indicated in the labels.

$N = 100$ and $N = 500$ are $T_c = 0.801$ and $T_c = 0.854$ respectively.

To analyze the predictions of equations (7) for $N = 100$, namely for the initial state $T = 1.5$, $\mu = -2.1$. In figure 2(a) we plot the growth of the normalized number of particles in the ground state $n_0 = N_0/N$ along the whole cooling protocol as a function of the dimensionless time τ , with a time step of 5×10^{-5} . As it can be seen from figure 2(a), the growth of n_0 as a function of time is not a linear function. At earlier cooling stages there is an efficient cooling. Then, once the system enters into the condensation transition the growth rate of particles in the ground state decreases. The cooling process modeled through the protocol allows us to follow the evolution of the temperature and chemical potential as consecutive energetic cooling stages are carried out. At each energetic cooling stage the gas thermalizes at well defined values of μ and T ; these are obtained by fitting the stationary distributions n_m at each stage to the Bose–Einstein distribution either for $\mu < 0$ or $\mu = 0$.

In figure 2(b) we plot the stationary distributions of the occupation numbers n_m . Different curves correspond to equilibrium values T and μ , at different cooling stages as

indicated in the legend. The curves lying on the points correspond to the best Bose–Einstein distribution fit. As one can observe from this figure, as T decreases and μ approaches zero from below, the number of particles in the condensate becomes the majority with respect to those associated to the excited states. As a matter of fact in figure 2(b) we have omitted the stationary distributions of n_0 associated to $T = 0.92$ and $\mu = -0.0074$ and $T = 0.859$ and $\mu = -0.0044$, since they would appear out of scale. Different curves in figure 2(b) indicate the path towards the onset of degeneracy. Two important facts we stress here, first, that around $T \approx 0.9$, BEC seems to develop; but second, due to finite, actually rather small, number of particles, the chemical potential does not become zero, although it does become very small. That is, it is not possible to observe a sharp transition. This can be further observed in figure 3, where we plot the chemical potential μ as a function of T , for $N = 100$ and $N = 500$ number of particles. From this figure one can observe how for $N = 500$ the transition becomes more apparent and it should tend towards a true sharp transition in the thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ [31]. This behavior may seem to indicate that, since the chemical potential does not become zero unless in

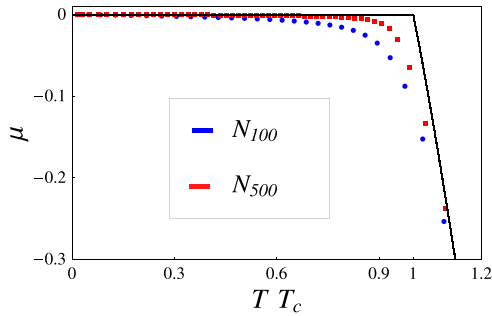


Figure 3. Dimensionless chemical potential μ as a function of T along the whole sequence of energetic cooling, calculated using the kinetic equation (7) for $\mu < 0$ ($T > T_c$). Circles and squares label $N = 100$ and $N = 500$ respectively. The (black) solid line corresponds to the thermodynamic limit. We note that the finite number of particles allows such a solution to reach temperatures below T_c . See text for further discussion.

the thermodynamic limit, the kinetic equations for $\mu < 0$ may suffice to describe the dynamics correctly, as done in [1, 5] for example. It is the purpose of this section to highlight the importance of the kinetic equations for $\mu = 0$.

To enquire the predictions of kinetic equations for $\mu = 0$ and then to contrast them with those associated to the equation for $\mu < 0$ we proceed in an analogous way to that described above. That is, we now solve equation (8) for $\mu = 0$. We illustrate our numerical results for $N = 500$ initiating at $T = 1.0$ ($T_c = 0.854$). Since the chemical potential in this case is zero we obtain the value of T by fitting to the stationary occupation numbers the ideal Bose–Einstein distribution for $\mu = 0$.

In figure 4(a) we plot the time evolution of the condensate n_0 during the whole energetic cooling process. Once more, at the start, the cooling is very efficient, but as $T \rightarrow 0$, it slows down since there are very few particles in the excited states. In figure 4(b), we plot the number distribution as a function of the energy level, for different temperatures. BEC is clearly described for $T < T_c$ by using the corresponding equation (8) tailored for $\mu = 0$. This dynamics is very precise, less sensitive to finite size effects, and can be extended with no problem all the way to $T = 0$. We now compare the solutions both for $\mu < 0$ with $\mu = 0$, in the light of finite size effects and the limited number of levels we can use.

In figures 5(a) and (b) we illustrate in a diagram n versus T/T_c the stationary normalized number of particles in the ground n_0 and excited states n_{exc} for $N = 500$ along the cooling process. Figure 5(a) shows a cooling process starting at a temperature $T > T_c$ and going to a temperature as low as possible, using the kinetic equations for $\mu < 0$, equation (7). Figure 5(b) shows a cooling initiating at $T > T_c$ but using equations (8) valid for $\mu = 0$ only and, again, going towards $T = 0$. The curves in black are the results in the thermodynamic limit, showing the above mentioned sharp transition. Several comments are in order. First of all, the solution for $\mu < 0$, while the BEC transition is rather smooth, simply due to finite size effects, it appears that it can be extended to very low temperatures, near $T = 0$, where it is supposed no to be

quite valid. This robustness is because the chemical potential can become very small, though not quite zero, see figure 3. As we discuss below, the solution for $\mu < 0$ becomes numerically unstable as $T \rightarrow 0$. On the other hand, the kinetic equations for $\mu = 0$ become extremely good in the vicinity of $T = 0$, notwithstanding the small number of particles. This is so, because $\mathcal{N} = 40$ energy levels suffices to describe the part of the gas in the excited states. As expected, this solution becomes less confident as $T \rightarrow T_c$ from below, and similarly to the equations for $\mu < 0$ near absolute zero, the numerical description for $\mu = 0$ becomes unstable as BEC transition is approached. One expects that in the limit of very large number of particles, and large number of levels included in a numerical calculation, the limitations of both descriptions in the regions where are not supposed to be valid, should be more apparent.

Figures 6(a) and (b) show details of calculations near $T = 0$ and $\mu < 0$, equation (7), and for near T_c and $\mu = 0$, equation (8), respectively. The purpose of these figures is to exemplify the numerical instabilities of the corresponding descriptions. Figure 6(a) shows the number of particles in the condensate, with $\mu < 0$, with a very large number of particles, $N = 10^5$, which can be performed due to the very small value of the temperature. One sees, first, that the solution deviates from that of the thermodynamic limit (solid line), then it becomes unstable. The simpler explanation is that, at these temperatures μ must be zero, but the fitted Bose–Einstein distribution given by equation (3) cannot take $\mu = 0$ for a divergence would occur. Although not shown here, the solution for $\mu = 0$ fits smoothly the solid curve all the way down to $T = 0$. On the other hand, figure 6(b) shows the stationary total occupation number in the excited states for $\mu = 0$ and $T < T_c$. Similarly to the previous case, as T_c is approached, a numerical difficulty arises in the form of a double valued solution. Again, this exhibits that this solution requires not only more particles but more equations for higher energy levels. It is satisfactory, nevertheless, to find that, apart from near the vicinity of T_c , the solution for $\mu = 0$, which explicitly takes the Bogoliubov approximation into account, fits extremely well the curves of the thermodynamic limit.

4. Final remarks

We have studied an energetic cooling process that leads a low-interacting Bose gas confined in a harmonic potential to reach Bose–Einstein condensation, using different kinetic equations for temperatures above and below the critical one, T_c . While the equations for $T > T_c$ are similar to previous ones [4, 5, 11], the novelty of our work lies on the fact that, for $T > T_c$, we explicitly take into account the non-conservation of particles in the thermal, non-condensed part of the gas. This is done by implementing Bogoliubov approximation in the dynamics. With these equations we model an energetic cooling process that while removing energy from the system, keeps constant the number of particles, an essential difference from the typical

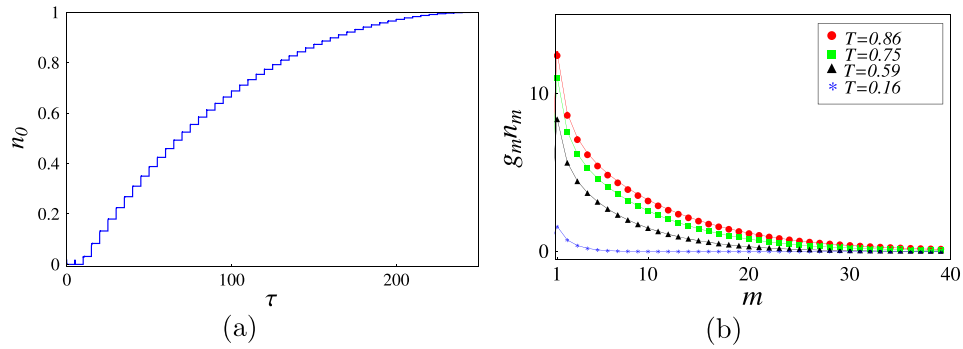


Figure 4. (a) Growth of the normalized number of particles in the ground state $n_0 = N_0/N$, for $N = 500$, as a function of dimensionless time τ along the whole sequence of energetic cooling, using the kinetic equation (8) for $\mu = 0$ ($T < T_c$). (b) Stationary distributions of the excited states for some energetic cooling steps. Different curves correspond to different values of T as indicated in the labels.

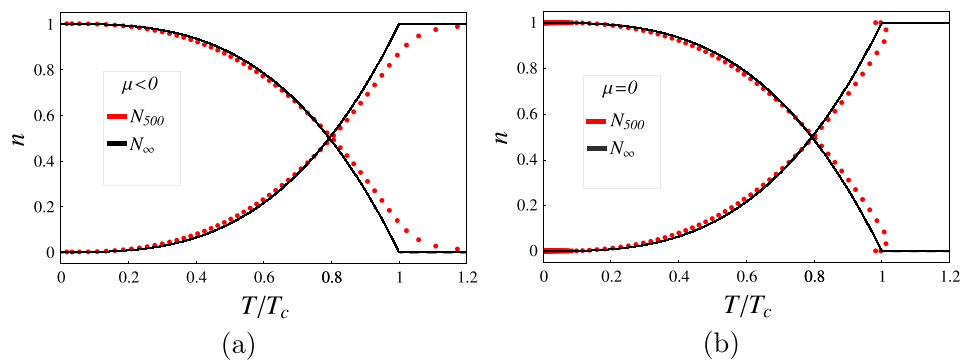


Figure 5. Diagrams of the normalized number of particles n as a function of T along the whole sequence of energetic cooling. The (red) dotted curve that starts at $n = 0$ corresponds to the normalized number of particles in the ground state n_0 , while the (red) dotted one that begins at $n = 1$ corresponds to the particles in the excited states n_{exc} . The (black) solid lines correspond to the thermodynamic limit. Figures (a) and (b) correspond to equations (7) and (8) respectively. In both cases, $N = 500$.

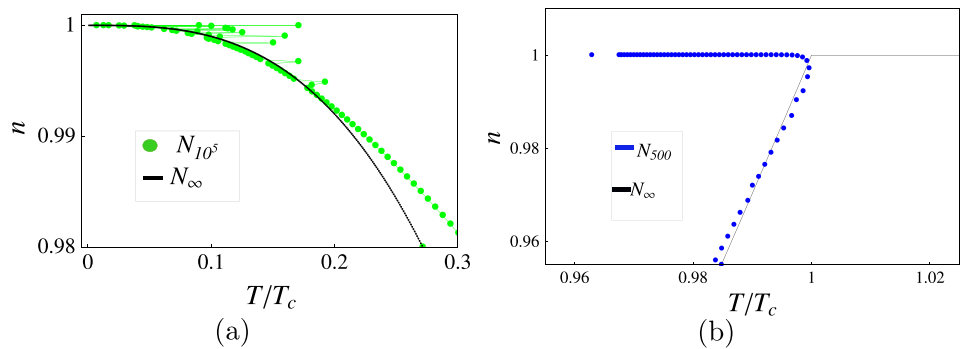


Figure 6. Details of the normalized number of particles n as a function of T along a reduced stage of the energetic cooling. (a) The (green) dotted line is the normalized number of particles in the ground state n_0 , using equation (7) valid for $T > T_c$, with $N = 10^5$; (b) The (blue) dotted line is the normalized number of particles in the excited states n_{exc} , using equation (8), valid for $T < T_c$, with $N = 500$. The (black) solid curve corresponds to the thermodynamic limit. These calculations exemplify the limitations of the equations outside their range of validity, see text for further discussion.

evaporative cooling procedure. In our numerical simulation we were able to handle with up to 40 energy quantum levels of the harmonic oscillator in 3D. To the best of our knowledge this is the highest energy level numerically computed up to now. We solved the system of coupled kinetic equations considering the ergodic assumption. The

cooling sequence allowed us to follow the sequence of the growing of particles in the ground and excited states.

It should be of interest to make some form of comparison between the proposed energetic cooling with the usual evaporative one. While it is difficult to attempt a direct testing between them, because the former is at constant number of

particles and the latter reduces it at each cooling step, one can nevertheless compare typical times needed to reach condensation. In this regard, the characteristic times for the thermalization and evaporation processes have been experimentally determined [22, 32] and numerically verified [11]. For our energetic protocol those times can be estimated in 100–1000 ms for the thermalization process and 1–10 s for the whole energetic protocol process. These times were determined considering a proper time scale in the experiment, namely, the frequency of the harmonic trap. Such quantity is obtained from real experiments within the thermodynamic limit considering typical densities among 10^{12} – 10^{15} atoms cm^{-3} and from the inequality $0.1 < N \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_c} \right)^3 < 10$ [33]. One should recall that the influence of the harmonic environment leads to identify the harmonic density as N/\mathcal{V} and the thermodynamic limit as $N \rightarrow \infty$ and $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ with $N/\mathcal{V} = \text{constant}$ [34]. Our numerical results are in the same order of magnitude with the current experiments. One must insist, however, that in the present case the Bose gas reaches a steady state given by a condensate fraction in the ground state with a thermal cloud of noninteracting particles, thus, further efforts should be pursued to obtain a weakly interacting gas in the steady state.

Acknowledgements

This work was partially funded by grant IN107014 DGAPA (UNAM). ACG and MML acknowledge support from CONACYT.

References

- [1] Holland M, Williams J and Cooper J 1997 *Phys. Rev. A* **55** 3670
- [2] Walser R, Williams J, Cooper J and Holland M 1999 *Phys. Rev. A* **59** 3878
- [3] Walser R, Cooper J and Holland M 2002 *Phys. Rev. A* **63** 013607
- [4] Griffin A, Nikuni T and Zaremba E 2009 *Bose-Condensed Gases at Finite Temperatures* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [5] Gardiner C W, Zoller P, Ballagh R J and Davis M J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 1793
- [6] Jaksch D, Gardiner C W, Gheri K W and Zoller P 1998 *Phys. Rev. A* **58** 1450
- [7] Gardiner C W and Zoller P 1998 *Phys. Rev. A* **58** 536
- [8] Jaksch D, Gardiner C W and Zoller P 1999 *Phys. Rev. A* **56** 575
- [9] Gardiner C W and Zoller P 1997 *Phys. Rev. A* **55** 2902
- [10] Lee M D and Gardiner C W 2000 *Phys. Rev. A* **62** 033606
- [11] Yamashita M, Koashi M and Imoto N 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2243
- [12] Drummond P and Corney J F 1999 *Phys. Rev. A* **60** R2661
- [13] Morandi O, Hervieux P-A and Manfredi G 2013 *Phys. Rev. A* **88** 023618
- [14] Schelle A, Wellens W, Delande D and Buchleitner 2001 *Phys. Rev. A* **83** 013615
- [15] Bijlsma M J, Zaremba E and Stoof H T C 2000 *Phys. Rev. A* **62** 063609
- [16] Fetter A L 2002 *J. Low Temp. Phys.* **129** 263
- [17] Boyd R W 2008 *Nonlinear Optics* (New York: Academic)
- [18] Scherer N, Carlson R, Matro A, Du M, Ruggiero A, Romero-Rochín V, Cina J, Fleming G and Rice S 1991 *J. Chem. Phys.* **95** 1487
- [19] Cola M M and Piovela N 2004 *Phys. Rev. A* **70** 045601
- [20] Weiner J, Bagnato V S, Zilio S and Julienne P S 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 1
- [21] Pethick C J and Smith H 2002 *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [22] Ketterle W and van Druten N J 1996 *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **37** 181
- [23] Romero-Rochín V and Oppenheim I 1988 *J. Stat. Phys.* **53** 307
- [24] Brenig W 1989 *Statistical Theory of Heat: Non-Equilibrium Phenomena* (Berlin: Springer) pp 214–20
- [25] Keiser J 1987 *Statistical Theory of Non-Equilibrium Processes* (Berlin: Springer) pp 161–9
- [26] Kreuzer H J 1981 *Non-Equilibrium Thermodynamics and its Statistical Foundation* (Oxford: Clarendon) pp 296–321
- [27] Benedetto D, Castella F, Esposito R and Pulvirenti M 2007 *Commun. Math. Sci.* **5** 55
- [28] Akhiezer A I and Peletminskii S V 1981 *Methods of Statistical Physics* (Oxford: Pergamon) pp 287–312
- [29] Bogoliubov N N 1947 *J. Phys.* **11** 23
- [30] Bányai L, Gartner P, Schmitt o M and Haug H 2000 *Phys. Rev. B* **61** 8823
- [31] Yang C N and Lee T D 1952 *Phys. Rev.* **87** 404
- [32] Miesner H -J, Stamper-Kurn D M, Andrews M R, Durfee D S, Inouye S and Ketterle W 1998 *Science* **279** 1005
- [33] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E and Cornell E A 1995 *Science* **269** 198
- [34] Romero-Rochín V 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 130601

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

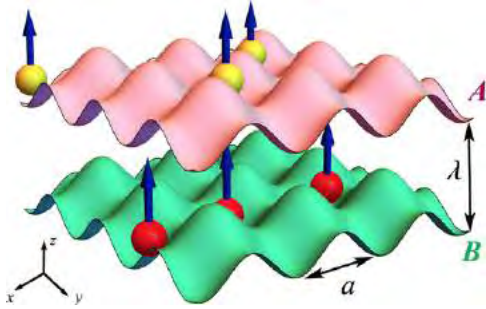


Figure 1 Schematic representation of the dipolar Fermi gas. Polar molecules in the up (down) layer can be mapped into the specie labeled with \uparrow (\downarrow) when the gas is described in a 2D layer.

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 $a = 532nm$, 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 $E_r = \hbar^2 k^2/2m$ (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 $\hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{T}}_D \psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=x,y} (\psi(\mathbf{r} + \delta_i) + \psi(\mathbf{r} - \delta_i))$, where $\delta_i = a\hat{e}_i$, $\hat{\mathbf{T}}$ 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

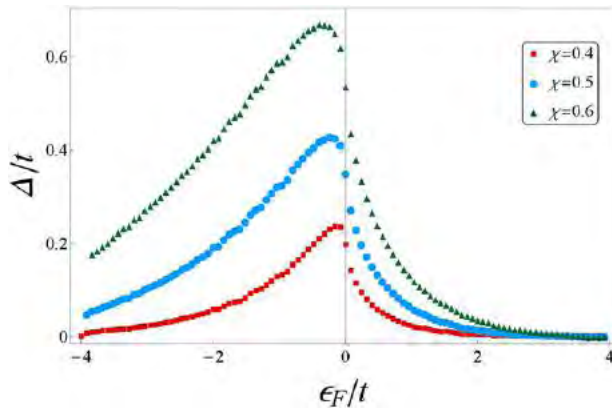


Figure 2 Energy gap Δ as a function of the Fermi energy in a symmetric lattice $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B$.

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

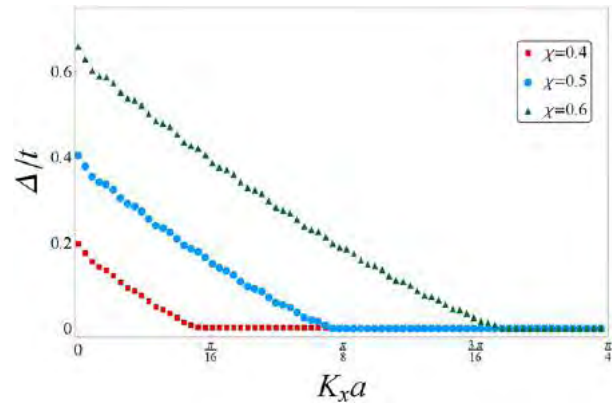


Figure 3 Δ as a function of $K_x a$ for symmetric Fermi energies $\epsilon_F^A = \epsilon_F^B = -0.5t$. We selected $K_y = 0$. From top to bottom $\chi = 0.4, 0.5$ and 0.6 .

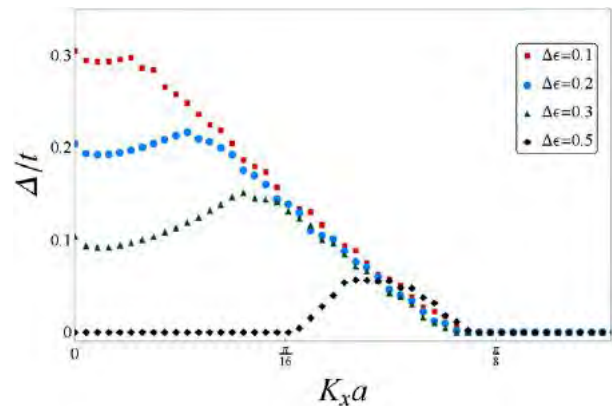


Figure 4 Δ as a function of $K_x a$ for non-symmetric Fermi energies. We selected for the Fermi energy of one layer $\epsilon_F^A = -0.5t$ $K_y = 0$ and $\chi = 0.5$. From top to bottom $\Delta\epsilon = 0.1, 0.2, 0.3$ and 0.5 .

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

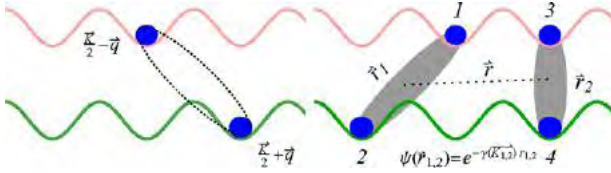


Figure 5 We illustrate in this scheme the possible Cooper pairs (dotted lines) and dimers that can be formed in the bilayer array. On the left Cooper pairs are shown, while on the right shadow ellipses illustrate a couple of bound dimers of molecules. Bound states in real space has an exponentially decay, 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

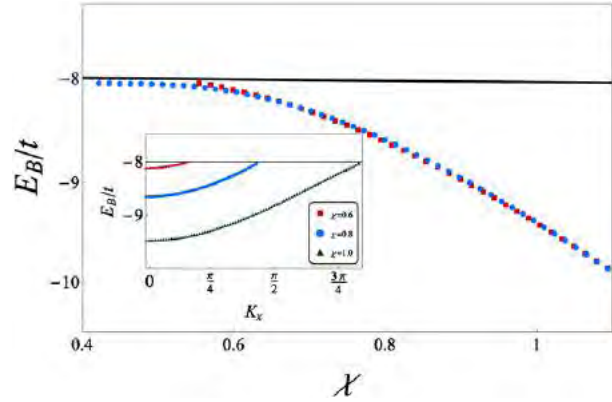


Figure 6 Energy of bound states E_B as a function of χ . We show both, the solution of Eq. (6) in the absence of Fermi surfaces (circles), and the variational energy (squares). In the inset we plot curves of E_B as a function of the center of mass reciprocal vector along x direction for $\chi = 0.6, 0.8, 1.0$. 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,

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

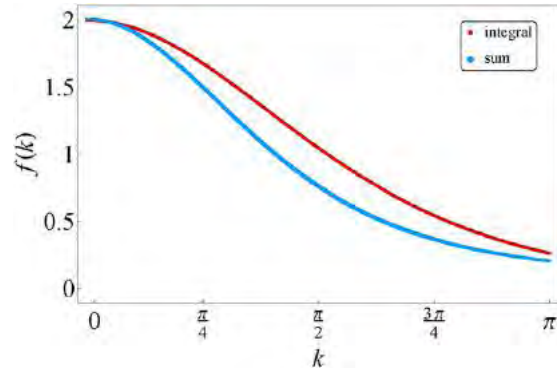


Figure 7 We illustrate the ratio among of the effective interaction potential $V_{eff}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ in Eq. (14) to the dipolar interaction potential between molecules $V_{dip}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$.

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,

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

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 $V_{eff}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = 2 \frac{V(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{\left(\left|\frac{\mathbf{q} - \mathbf{q}'}{4\gamma(\lambda)}\right|^2 + 1\right)^3}$. 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 $f(k) = \frac{2}{\left(\frac{k^2}{4\gamma(\lambda)} + 1\right)^3}$. 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 F.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. Mielson and J. K. Freericks, Phys. Rev. A **83**, 043609 (2011).
- [27] E. G. C. P. van Loon, M. I. Katsnelson, and M. Lemeshko, 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. Trefzeger, 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).

Superfluidity of a dipolar Fermi gas in 2D optical lattices bilayer

A. Camacho-Guardian and R. Paredes*

Received 11 April 2016, revised 9 May 2016, accepted 17 June 2016

Published online 18 July 2016

Ultracold Fermi molecules lying in 2D square optical lattices bilayers with its dipole moment perpendicularly aligned to the layers, having interlayer finite range *s*-wave interactions, are shown to form superfluid phases, both, in the Bardeen, Cooper and Schrieffer (BCS) regime of Cooper pairs, and in the condensate regime of bound dimeric molecules. We demonstrate this result using a functional integral scheme within the Ginzburg-Landau theory. For the deep Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) phase transition, we predict critical temperatures around 5nK and 20nK for $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ and OH molecules, which are within reach of current experiments [J. W. Park, S. Will and M. Zwierlein, Phys. Rev. Lett. 114, 205302 (2015)].

1 Introduction

At the present time, several laboratories have produced quantum degenerate dipolar gases in electronic and vibrational ground states having large electric dipole moments with the aim of quantum simulating novel phases such as the supersolid, 2D superfluid, Wigner crystalline and Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) among others [1–9]. Perhaps one of the best successes within the experimental domain, headed towards those purposes, is the capability of confining atoms/molecules in artificial crystals of light, since they emulate the nearest scenario of electrons in solids at low temperatures where quantum effects dominate. For instance, the BEC-BCS crossover in neutral atoms confined in optical lattices has been proposed as the quantum simulator for describing the transition to the superconducting phase as a function of doping in the high-temperature superconductors [10, 11]. Nowadays experiments with both, ultracold gases confined in optical lattices and condensed matter systems, open the possibility of observing such superfluidity and high T_c superfluidity respectively, in dipolar Fermi molecules placed in crystalline arrays of double bilayers. Besides its proper relevance within the

experimental context, the achievement of such a challenge is intimately related to the understanding of high T_c cuprate superconductors [12–14]. An additional motivation for exploring superfluid phases in 2D crystals is the possibility of creating exotic topological superfluids as those having *p*-wave pairing [15–18].

Although there is an extensive theoretical literature concerning the subject of superfluidity in dipolar degenerate gases in homogeneous environments [19–24], few of them take into account a lattice bilayer confinements [25, 26]. As it is well known, the crossover of dilute homogeneous Fermi gases has significant differences with respect to that in the presence of the optical lattice [11, 27]. Consideration of both aspects, long-range interactions and the crystalline environment, is essential in quantum simulating the phases mentioned in the first paragraph. Here, we address on the study of superfluidity in dipolar Fermi molecules confined in 2D optical lattices. For this purpose we consider a dipolar Fermi gas confined in a bilayer crystalline array in 2D (see Fig. 1) and work within the mean-field perturbative analysis using the integral functional formalism to determine the critical transition temperature. The superfluid transition is analyzed in the Ginzburg-Landau (GL) scheme where the superfluid density is calculated. We found that assisted by the 2D lattice confinement the attractive interactions between molecules in different layers induce interlayer pairing [24, 28, 29] of both types, BCS and bound molecular dimeric states in the condensate regime. Current experiments carried out with molecules of OH and $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ with electric dipole moments as large as 1.6 D [8, 9] allows us to estimate the BCS-BKT transition temperature around 2 nK and 6 nK respectively.

This work is organized as follows. In section 2 we present the model and delineate the derivation of the equation for the critical temperature in terms of the model parameters. Then in section 3 we study the dependence of the critical temperature using meaning

* 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

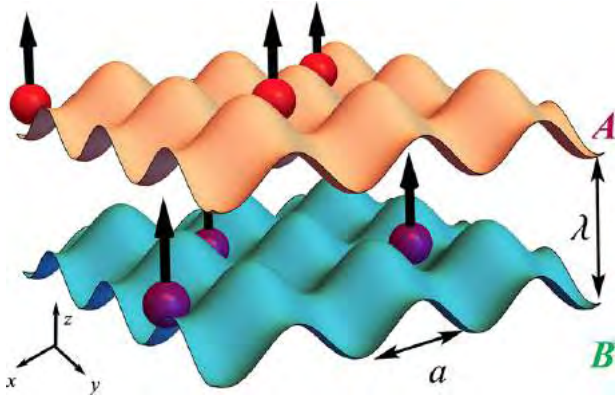


Figure 1 Schematic representation of the dipolar Fermi gas.

parameters within an experimental context. In sections 4 and 5 we work within the Ginzburg-Landau theory to confirm the stability of our approach and investigate the superfluid density. In section 6 we concentrate in the study of the superfluid phase where BCS theory does not apply anymore and thus, dimers of molecules constitute the many body state. Finally in section 7 a summary of this work is given.

2 Model

Our system consists of a gas of dipolar Fermi molecules placed in two parallel optical lattices in 2D. The configuration of the optical lattices in both layers has the same structure, a square lattice with constant lattice of size a . See Fig. 1. In the presence of an electric field perpendicular to the layers, the dipoles align along the same direction and thus the anisotropic dipole interaction becomes independent on the dipole orientation. However, a repulsive interaction between dipoles lying the same layer establishes, while being attractive at short distances for dipoles confined in different layers. Such an attractive inter-layer interaction becomes also repulsive at large distances. We should mention that in principle, inter-molecule interactions must include both, a short-range van der Waals term and a long-range dipole-dipole one. The latter is dominant at large interparticle separations while the former has a zero contribution to the cross section due the Pauli exclusion principle for a single fermionic specie. It is important to stress here that the intra-layer dipole-dipole interactions may lead to instabilities where several phases as stripes, checkerboards or some other density patterns may arise [30–36], however, by properly choosing the model parameters one can assert that those phases are not preponderant over the superfluid one resulting from inter-layer pairing. In partic-

ular, in the weak coupling limit and away from half filling we expect that the superfluid state dominates over any density ordered phase [37, 38]. In this work we shall focus in the analysis of the BCS state. For this purpose we must ensure that the inter-layer interaction is larger than the intra-layer one. The interaction potential between fermions in different and same layers respectively has the form [24]

$$V_{dip}^{AB}(\mathbf{r}) = d^2 \frac{r^2 - 2\lambda^2}{(r^2 + \lambda^2)^{5/2}},$$

$$V_{dip}^{\alpha,\alpha}(\mathbf{r}) = d^2 \frac{1}{r^3}, \quad (1)$$

being r the in-plane separation between fermions, d the dipole moment, λ the interlayer spacing, and $\alpha = A, B$. The physics of the system is completely determined by the dipolar interaction strength $a_d = m_{eff}d^2/\hbar^2$ and the dimensionless parameters $\Lambda = \lambda/a$ and $\chi = a_d/\lambda$, being $m_{eff} = \hbar^2/2t a^2$ the effective mass. For inter-layer spacings of $\Lambda = 0.75$ and 0.5 the magnitude of the attractive interlayer interaction is larger than both, the intra-layer and inter-layer repulsions¹. Thus, for such inter-layer spacings, the intra-layer interaction can be neglected. The Hamiltonian that describes such a system is

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=A,B} \int d^2r \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) H_0(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d^2r d^2r' \hat{\Psi}_A^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_B^\dagger(\mathbf{r}') V_{dip}^{AB}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}_B(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_A(\mathbf{r}), \quad (2)$$

where $H_0(\mathbf{r})$ is the ideal term that includes the kinetic energy and the external potential created by the 2D optical lattice $V_{latt}(\mathbf{r}) = V_0(\sin^2(x\pi/a) + \sin^2(y\pi/a))$. The field operators $\hat{\Psi}_A(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\mathbf{k}}$ and $\hat{\Psi}_B(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \hat{b}_{\mathbf{k}}$ satisfy the usual commutation relations for fermions. The in-plane energy dispersion of the ideal Fermi gas within the tight binding approximation is $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ being t the hopping strength among nearest neighbors. It is worth mentioning that in real experiments, besides the optical lattice confinement, the atoms typically move under the influence of a harmonic confinement. However, since the frequency ω of this potential (due to the magnetic trapping) is so small, the curvature imposed on the optical lattice can be neglected; that is, $\hbar\omega \ll t$. Therefore, the Hamiltonian

¹ For $\Lambda = 0.75$, $|V_{dip}^{AB}(|\mathbf{r}|=0)|/V_{dip}^{\alpha,\alpha}(|\mathbf{r}|=a) \approx 5$, and $|V_{dip}^{AB}(|\mathbf{r}|=0)|/V_{dip}^{A,B}(|\mathbf{r}|=a) \approx 115$, while for $\Lambda = 0.5$, $|V_{dip}^{AB}(|\mathbf{r}|=0)|/V_{dip}^{\alpha,\alpha}(|\mathbf{r}|=a) = 16$ and $|V_{dip}^{AB}(|\mathbf{r}|=0)|/V_{dip}^{A,B}(|\mathbf{r}|=a) = 55$.

of the two component Fermi gas in the momentum representation adopts the form

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'}, \quad (3)$$

where $V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ is the Fourier transform of $V_{dip}^{AB}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ and $\Omega = N_x \times N_y$, being N_x and N_y the number of sites along x and y directions respectively. In this equation we have introduced the chemical potential to account for the conservation of the total molecule number. Several aspects should be stressed here regarding the sensitivity of the dipolar interaction on the lattice confinement. The interaction $V_{dip}^{AB}(\mathbf{k})$ could be nonzero for $\mathbf{k} = 0$ in contrast to the homogeneous case where $V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} = 0) = 0$, for instance, for $\Lambda = 0.75$, $V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} = 0) \approx -2.62\chi$, while for $\Lambda = 0.5$, $V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} = 0) \approx -10.84\chi$. The two-molecule collision problem is also affected by the presence of the lattice confinement, namely, the Cooper pairing and the BEC-BCS crossover indeed capture the effect of confinement provided by the lattice [39].

It is interesting to note that the proposed model can be mapped into a system of fermions in two different hyperfine spin states, confined in a 2D lattice having a peculiar interaction. In other words, fermions moving in up and down layers can be associated to two different hyperfine spin states labeled with \uparrow and \downarrow respectively, having an interaction given by $V_{dip}^{AB}(r)$ Eq. (1).

To study the superfluidity in the model, we use functional integral techniques. The action for the ideal Hamiltonian term is,

$$S_0 = \sum_k \phi^{\dagger}(k) \cdot [i\hbar\omega_n \mathbb{1} - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\sigma_z] \cdot \phi(k), \quad (4)$$

where we use the abbreviations, $k = (\mathbf{k}, \omega_n)$, and $\phi = (\phi_A^*(k), \phi_B(k))^{\dagger}$ with ϕ_{α} Grassmann fermionic numbers, I is the identity in 2D, and the fermionic Matsubara frequencies are $\hbar\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, with $\beta = 1/k_B T$. σ_{α} ($\alpha = x, y, z$) are the Pauli matrices. To write the action associated to the interaction energy term, we introduce the auxiliary Hubbard-Stratonovich transformation in terms of the bosonic field Δ ,

$$\langle \Delta(\mathbf{k}) \rangle = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle \phi_{A,-\mathbf{k}} \phi_{B,\mathbf{k}'} \rangle, \quad (5)$$

that is, the action of such field creates a pair of particles with the same momentum \mathbf{k} in different layers A and B .

In terms of the fields ϕ and Δ the action is

$$S[\phi, \Delta] = \sum_{k,q} \Phi^{\dagger}(k, q) \cdot (i\hbar\omega_n \mathbb{1} - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\sigma_z + \Delta(k, q)\sigma_x) \cdot \Phi(k, q) - \frac{1}{\Omega} \sum_{k,k',q} \Delta(q, k) (V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'))^{-1} \Delta(q, k'), \quad (6)$$

being $\Phi(k, q) = (\phi_{A,k}^*, \phi_{B,q-k})^{\dagger}$. Since this action has a quadratic form in the fields Φ one ends with the following expression for the effective action

$$S_{eff}[\Delta] = \sum_{k,q} \text{Tr} \ln (\mathbb{G}_{\Delta}^{-1}) - \frac{1}{\Omega} \sum_{k,k',q} \Delta(q, k) (V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'))^{-1} \Delta(q, k'), \quad (7)$$

with $\mathbb{G}_{\Delta}^{-1} = (i\hbar\omega_n \mathbb{1} - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\sigma_z + \Delta(k, q)\sigma_x)$. From this equation and within first order perturbation theory, the equation for the critical temperature, that signals the transition to the superfluid state, is

$$\Delta_0(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} V_{dip}^{AB}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\Delta_0(\mathbf{k}') \tanh(\beta\xi_{\mathbf{k}'}/2)}{2\xi_{\mathbf{k}'}} , \quad (8)$$

where $\xi_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_0(\mathbf{k})^2}$. In this work we have restricted to the case $q = 0$ and considered a gap within the s -wave approach, which means $\Delta_0(\mathbf{k} = 0)$. That is, we have assumed that the momentum of the center of mass of the two-body collision term is equal to zero, as in the original BCS scheme.

3 Critical temperature

In principle, within our scheme, interlayer BCS pairs are formed for arbitrary values of the parameters that define the model. However, for sufficiently large values of the effective interaction strength χ , bound pairs of molecules can be formed as in the homogeneous case [24], that is, the two-molecule interlayer potential $V_{dip}^{AB}(\mathbf{r})$ leads to either, scattering of molecules or bound molecular states. Below we discuss the region of the parameters at which bound states can be formed. Here it is important to emphasize that although it is true that the optical lattice apparently causes just a rescaling of the mass by an effective one, the predictions obtained considering the crystalline confinement cannot be obtained from the homogeneous one by replacing the mass by an effective one. This statement, stands for both, long range and short range interaction potentials. This result arises from the

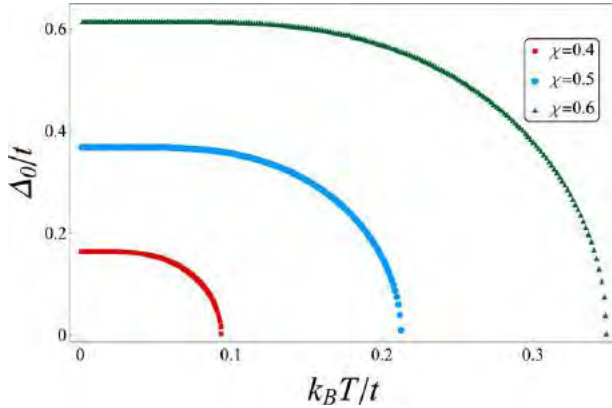


Figure 2 Energy gap vs thermal energy (Eq. 8) for $\Lambda = 0.75$. Calculations were done for square lattices of $N_x = N_y = 140$ and $\mu = 0.825t$.

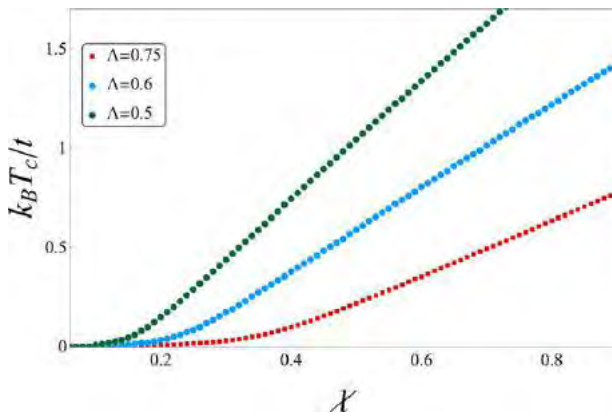


Figure 3 Critical temperature as a function of the dimensionless interaction strength χ for $\Lambda = 0.5, 0.6, 0.75$.

intrinsic difference among the energy dispersion in the homogeneous and lattices confinements.

To determine the critical temperature as a function of the parameters described above, we solve Eq. (8) assuming $\mu = 0.825t$ in the *s*-wave approximation. For all of our numerical calculations we work within the first Brillouin zone ($-\frac{\pi}{a} \leq k_x, k_y \leq \frac{\pi}{a}$) and use lattices of size $N_x = N_y = 140$, which produce the same quantitative results than bigger lattices. In Fig. (2), we can observe the critical temperature at which the superfluid state occurs, within the BCS regime, for different values of the coupling strength χ and fixed $\Lambda = 0.75$. Further, in order to illustrate the dependence of the critical temperature on those parameters, in Fig. 3 we plot the BCS critical temperature T_c versus χ for different values of Λ .

4 Ginzburg-Landau

We now expand the effective action, given by Eq. (7), in terms of the new bosonic field Δ around the phase transition, and relate it to the Ginzburg-Landau Free-Energy. As it is well known this expansion in terms of the order parameter Δ gives correct predictions for continuous transitions only [41].

$$S_{eff}[\Delta, \Delta^*] = \hbar\beta F_L(\Delta). \quad (9)$$

To do this, we write $\mathbb{G}_\Delta^{-1}(k, q) = \mathbb{G}_0^{-1}(k) + \Sigma_\Delta(k, q)$, where $\mathbb{G}_0^{-1}(k) = i\hbar\omega_n \mathbb{1} + \sigma_z(\epsilon_k - \mu)$ and $\Sigma_\Delta(k, q) = \sigma_x \Delta(k, q)$, thus $\mathbb{G}_\Delta^{-1}(k, q) = \mathbb{G}_0^{-1}(k)(\mathbb{1} + \mathbb{G}_0(k)\Sigma_\Delta(k, q))$. From the expansion $\ln \mathbb{G}_\Delta^{-1}(k, q) = \ln \mathbb{G}_0^{-1}(k) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} (\mathbb{G}_0(k)\Sigma_\Delta(k, q))^m$ we verify that odd powers of $\mathbb{G}_0\Sigma$ do not contribute to the trace in $S_{eff}[\Delta]$, while even powers are explicitly given by

$$(\mathbb{G}_0\Sigma_\Delta)^{2m} = \mathbb{1}|\Delta(k)|^{2m} (G_{11}^0 G_{22}^0)^m,$$

being $G_{11}^0 = (-i\hbar\omega_n + (\epsilon_k - \mu))^{-1}$ and $G_{22}^0 = (-i\hbar\omega_n - (\epsilon_k - \mu))^{-1}$. As usual within the GL theory and well justified near the pairing transition temperature (Δ small), we truncate the expansion up to quartic order. This procedure leads us to determine the coefficients of the free energy $F = a(T)\Delta^2 + b(T)\Delta^4$. As expected, the coefficient $a(T)$ bears the same information as that given by the gap in Eq. (8), the coefficient $a(T)$ can be obtained from Eq. (8) by setting $\Delta_0 = 0$, while $b(T)$ conveys the information on the stability of the equilibrium state and is found to be proportional to the density of states, $b(T) \propto \nu/T^3$ being ν the density of states. The explicit expression for $b(T)$ is,

$$b(T) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\beta \frac{\text{sech}^2 \frac{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\beta}{2}}{8(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2} + \frac{1}{4} \frac{\tanh \frac{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\beta}{2}}{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^3} \right). \quad (10)$$

It is important to emphasize that, while the expression for $b(T)$ appears to be independent of the 2D lattice confinement and of the two-molecule interaction potential, their influence is exhibited through the critical temperature T_c , which it has been shown above to, in turn, strongly depend on the dipolar potential, namely on χ and on Λ .

5 Superfluid density

To determine the superfluid density we also work within the perturbative scheme, neglecting quantum fluctuations, and following the functional Ginzburg-Landau free-energy theory for second order phase transitions

[42–45]. That is, we expand the free energy in terms of the order parameter Δ , incorporating a phase $\Delta = \Delta_0 e^{i\Theta \cdot \mathbf{R}_i}$, where $\Theta = (\frac{\Theta_x}{N_x a}, \frac{\Theta_y}{N_y a})$. This procedure allows us to separate the density into the normal and superfluid components. In order to make explicit the dependence on the phase parameter Θ and using the symmetry associated to the conservation of total molecule number, a gauge transformation can be performed on the operators that create and annihilate particles at the lattice sites in both layers: $(\hat{A}_i^\dagger, \hat{A}_i), (\hat{B}_i^\dagger, \hat{B}_i) \rightarrow (\hat{A}_i^\dagger e^{i\Theta \cdot \mathbf{R}_i}, \hat{A}_i e^{-\Theta \cdot \mathbf{R}_i}), (\hat{B}_i^\dagger e^{i\Theta \cdot \mathbf{R}_i}, \hat{B}_i e^{-\Theta \cdot \mathbf{R}_i})$. By performing this transformation in Hamiltonian given by Eq. (11), having written it in its lattice representation², one ends with the following expression for the Hamiltonian (11):

$$\hat{H}_\Theta = \hat{H}_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}) \sum_{\alpha=x,y} \left(\Theta_\alpha \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} + \frac{\Theta_\alpha^2}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha^2} \right) + \hat{H}_I, \quad (11)$$

that is, associated to the phase $\Theta \cdot \mathbf{R}_i$, there appears a contribution to the kinetic energy. Thus, in this scheme, the superfluid density component can be calculated as [45]

$$\rho_{\alpha,\alpha'} = \lim_{\Theta \rightarrow 0} \frac{1}{Nt} \frac{F_\Theta - F_0}{\Theta_\alpha \Theta_{\alpha'}} = \frac{1}{Nt} \frac{\partial^2 F_\Theta}{\partial \Theta_\alpha \partial \Theta_{\alpha'}}, \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (12)$$

being F_0 and F_Θ the free energies of the normal and superfluid phases respectively. The determination of the superfluid density $\rho_{\alpha,\alpha'}$, using Eq. (12), can be straightforwardly accomplished by noting that in the effective action, see Eq. (7), an extra term appears associated to the phase of the gap. Thus, one can write, in an explicit way: $\mathbb{G}_\Delta^{-1}(k) \rightarrow \mathbb{G}_\Theta^{-1}(k)$ and consider perturbations up to second order. That is, keeping quadratic terms of Θ in $\mathbb{G}_\Theta^{-1}(k) = \mathbb{G}_{\Theta=0}^{-1}(k)(1 - \mathbb{G}_{\Theta=0}(k)\Sigma_\Theta(k))$. The final expression for $\rho_{\alpha,\alpha'}$ is

$$\rho_{\alpha,\alpha'} = \frac{1}{\Omega t a^2} \sum_{\mathbf{k}} \left(n(\mathbf{k}) \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha \partial k_{\alpha'}} - Y(\mathbf{k}) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_{\alpha'}} \right), \quad (13)$$

where $n(\mathbf{k})$ is the Fermi momentum distribution and $Y(\mathbf{k})$ is the Yoshida distribution defined as $Y(\mathbf{k}) = \beta \text{sech}^2(\beta \xi_{\mathbf{k}}/2)/4$, with $\xi_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}$. Since the off-diagonal terms of the superfluid tensor are small $\rho = (\rho_{xx} + \rho_{yy})/2$. Figure 4 shows the superfluid density fraction as a function of the temperature for three different values of the interaction strength. We

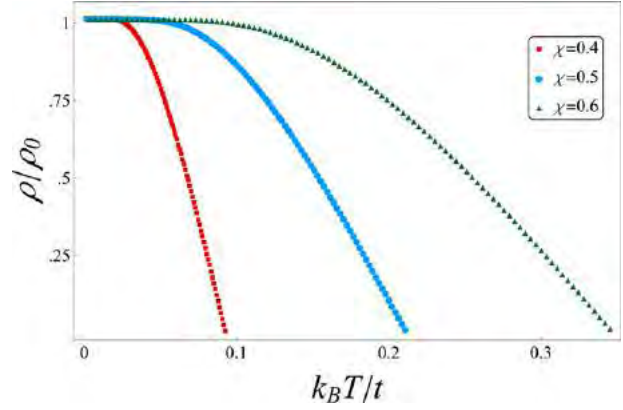


Figure 4 Superfluid density for different values of the dimensionless interaction strength χ and $\Lambda = 0.75$.

normalize the superfluid density with respect to that at $T = 0$ denoted by ρ_0 . As it is well known the superfluid density fraction at zero temperature is different from unity in the lattice and it has a different quantitative and qualitative behavior with respect to the homogeneous situation [45].

6 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless

When the interaction χ is strong enough, the predicted critical temperature becomes an artifact of the approximation since the BCS approach fails. To determine the relationship between the critical temperature and the coupling interaction, the presence of bounded pairs should be included. This procedure is delineated in Ref. [41, 46, 47] and gives rise to a clear identification of the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) transition temperature, as that at which a fraction of bound pairs dissociate. Thus, to estimate the region at which our treatment is valid, we compare it with the mentioned procedure. This yields the following result,

$$k_B T_{BKT} = \frac{\pi}{4} J \quad (14)$$

where $J = \rho t$ [31].

In Fig. 5 we plot the critical temperature as a function of the dimensionless interaction strength χ for both, our BCS scheme and the incorporation of bounded pairs, see Eq. (14). In the strong interaction regime the BKT model within the mean field scheme captures the essential features without considering Gaussian fluctuations. We observe how in the weakly interacting regime the temperature T_{BKT} is close to T_{BCS} , while they separate in the strong interaction region $\chi \approx 0.45$. Beyond

² $H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{A}_i^\dagger \hat{A}_j + \hat{B}_i^\dagger \hat{B}_j + H.c.) + \sum_{ij} V_{ij} \hat{A}_i^\dagger \hat{B}_j^\dagger \hat{B}_j \hat{A}_i - \mu \sum_i (\hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i + \hat{B}_i^\dagger \hat{B}_i)$, being \hat{A}_i^\dagger and \hat{B}_i^\dagger the creation operators in layers \hat{A} and \hat{B} respectively.

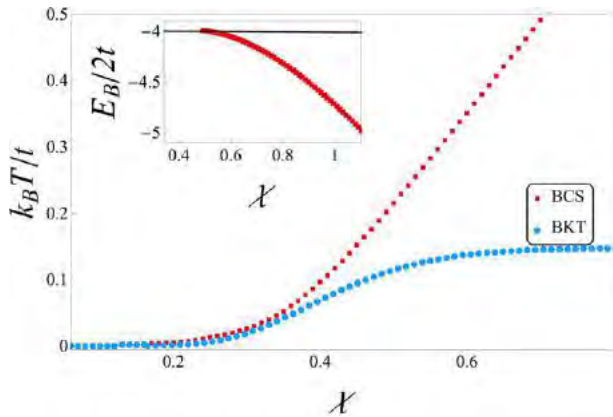


Figure 5 BCS critical temperature T_c and the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless T_{BKT} transition temperature as a function of the interaction strength χ , for $\Lambda = 0.75$. The inset correspond to the binding energy of the two-molecule system in the presence of the lattice.

this value, the critical temperature T_{BKT} corresponds to a phase in which dimerization dominates [48]. The inset of Fig. 5 shows the pair binding energy using a variational wave function for the two-molecule problem, $\phi(r, \gamma) = A(\gamma)e^{-\gamma r}$ with γ a variational parameter, within the presence of the 2D lattices.

7 Final remarks

Studies of 2D superfluid phases in fermionic species have been reported in earlier literature taking into account both, Fermi molecules with dipolar interactions confined in 2D layered homogeneous geometries [24, 28, 29] and Fermi species confined in 2D square optical lattices bilayer subjected to contact interactions [25, 26]. In addition, consideration of dipolar Fermi species confined in single and bilayer optical lattices with arbitrary orientations has been reported [18, 30–32]. There is also literature dealing with the study of Cooper pairing and Bound states of Fermi species in 2D lattices bilayer at $T = 0$ [48]. The present work provides an insight into the understanding of the superfluid phases at finite temperature including both the 2D lattice confinement and the long range interlayer dipolar interactions. It is also important to remark the role played by the geometry of the 2D optical lattice which provides an additional tool, within both, theory and experiments to investigate the superfluid phases. Analysis of the formation of other kind of instabilities; density ordered phases and supersolid phases to complement the present study is in progress. Current investigations within the condensed

matter field, carried out with couples of graphene monolayers [13, 14], claim for the possibility of observing high T_c superfluidity. The experimental capability of realizing such geometries in ultracold gases [49] open the opportunity of emulating these fascinating quantum phases. It is crucial to emphasize that the dispersion relation determines the properties of the superfluid phase.

Because of the progress gained in confining ultracold dipolar Fermi molecules, the model here proposed can be realized in an atomic physics experiment for molecular gases of OH and $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ [8, 9] with large electric dipole moments ($d = 1.6$ D). For observing both the BCS as well as the transition to BKT regimes, the 2D laser that forms the optical lattice requires to have a ratio between recoil energy E_r and optical depth V_0 around $V_0/E_r \sim 4$, and a wavelength lattice of 532nm, yielding a lattice spacing of $a = 266$ nm. Furthermore, temperatures of the order of 2 nK and 6 nK for the BCS - BKT transition can be reached by adjusting the interlayer spacing λ between 200 – 300 nm, while having temperatures around 5-20 nK associated to the deep BKT regime. The present model here investigated for studying the BEC-BCS crossover in dipolar molecules confined in optical lattices represents a good prospect as being a quantum simulator for describing high T_c superconductivity with long range interactions.

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, Superfluidity.

References

- [1] M. Baranov, *Physics Reports* **464**, 71 (2008).
- [2] M. Baranov, M. Dalmonte, G. Pupillo, and P. Zoller, *Chem. Rev.* **112**, 5012 (2012).
- [3] L. D. Carr, D. DeMille, R. V. Krems, and J. Ye, *New J. Phys.* **11**, 055049 (2009).
- [4] T. Lahaye, T. Koch, B. Frölich, M. Fattori, J. Metz, A. Griesmaier, S. Giovanazzi, and T. Pfau, *Nature* **448**, 672 (2007).
- [5] R. V. Krems, W. C. Stwalley, and B. Friedrich, *Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications* (CRC Press, 2009) p142.
- [6] C. Trefzger, C. Menotti, B. Capogrosso-Sansone, and M. Lewenstein, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 193001 (2011).
- [7] M. Lu, N. Q. Burdick, and B. K. Lev, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 215301 (2012).

- [8] B. K. Stuhl, M. T. Hummon, M. Yeo, G. Quéméner, J. L. Bohn, and J. Ye, *Nature* **492**, 396 (2012).
- [9] J. W. Park, S. Will, and M. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 205302 (2015).
- [10] Q. Chen, J. Stajic, S. Tan, and K. Levin, *Phys. Rep.* **412**, 1 (2005).
- [11] W. Zwerger, *The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas* (Springer-Verlag, 2012), p79-89.
- [12] A. J. Leggett, *Nat. Phys.* **2**, 134 (2006).
- [13] A. Perali, D. Neilson, and A. R. Hamilton, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 146803 (2013).
- [14] D. Neilson, A. Perali, and A. R. Hamilton, *Phys. Rev. B* **89**(R), 060502 (2014).
- [15] B. Wang, Z. Zheng, H. Pu, X. Zou, and G. Guo, *Phys. Rev. A* **93**, 031602(R) (2016).
- [16] B. Liu, X. Li, B. Wi, and W. V. Liu, *Nat. Commun.* **6**, 5064 (2014).
- [17] A. Bühler, N. Lang, C. V. Kraus, G. Möller, S. D. Huber, and H. P. Büchler, *Nat. Commun.* **5**, 5064 (2014).
- [18] G. M. Bruun, C. Hainzl, and M. Laux, arXiv:1512.01849 (2015).
- [19] Q. Li, E. H. Hwang, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **82**, 235126 (2010).
- [20] M. A. Baranov, A. Micheli, S. Ronen, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* **83**, 043602 (2011).
- [21] F. M. Marchetti and M. M. Parish, *Phys. Rev. B* **87**, 045110 (2013).
- [22] H. P. Büchler, E. Demler, M. Lukin, A. Micheli, N. Prokof'ev, G. Pupillo, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 060404 (2007).
- [23] S. Moroni and M. Boninsegni, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 240407 (2014).
- [24] A. Pikovski, M. Klawunn, G. V. Shlyapnikov, and L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 215302 (2010).
- [25] T. Vanhala, J. Baarsma, M. Heikkinen, M. Troyer, A. Harju, and P. Törmä, *Phys. Rev. B* **91**, 144510 (2015).
- [26] Y. Prasad, A. Medhi, and V. B. Shenoy, *Phys. Rev. A* **89**, 043605 (2014).
- [27] G. Pistolesi and Ph. Nozières, *Phys. Rev. B* **66**, 054501 (2002).
- [28] A. C. Potter, E. Berg, D.-W. Wang, B. I. Halperin, and E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 220406 (2010).
- [29] N. T. Zinner, B. Wunsch, D. Pekker, and D.-W. Wang, *Phys. Rev. A* **85**, 013603 (2012).
- [30] A.-L. Gadsbølle and G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **85**, 021604(R) (2012).
- [31] A.-L. Gadsbølle and G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **86**, 033623 (2012).
- [32] G. M. Bruun and E. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 245301 (2008).
- [33] K. Mielsonson and J. K. Freericks, *Phys. Rev. A* **83**, 043609 (2011).
- [34] E. G. C. P. van Loon, M. I. Katsnelson, and M. Leshchko, *Phys. Rev. B* **92**, 081106(R) (2015).
- [35] T.-S. Zeng and L. Yin, *Phys. Rev. B* **89**, 174511 (2014).
- [36] Z. Wu, J. K. Block, and G. M. Bruun, *Phys. Rev. B* **91**, 224504 (2015).
- [37] A. F. Ho, A. Cazalilla, and T. Giamarchi, *Phys. Rev. A* **79**, 033620 (2009).
- [38] M. Keller, W. Metzner, and U. Schollwöck, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4612 (2001).
- [39] J.-P. Martikainen, *Phys. Rev. A* **78**, 035602 (2008).
- [40] K. R. A. Hazzard et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 195302 (2014).
- [41] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press, 2006), p243–300.
- [42] R. Roth and K. Burnett, *Phys. Rev. A* **67**, 031602(R) (2003).
- [43] J.-P. Martikainen and H. T. C. Stoof, *Phys. Rev. A* **69**, 053617 (2004).
- [44] B. Liu and L. Yin, *Phys. Rev. A* **86** 031603(R) (2012) .
- [45] T. Paananen, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42**, 165304 (2009).
- [46] C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria and J. R. Engelbrecht, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3202 (1993).
- [47] J. V. José, 40 years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless theory (World Scientific, 2013) p297–319.
- [48] A. Camacho-Guardian, G. Domínguez-Castro, and R. Paredes, *Ann. Phys.* doi: 10.1002/andp.201500342 (2016).
- [49] T. Uehlinger, G. Jotzu, M. Messer, D. Greif, W. Hofstetter, U. Bissbort, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 185307 (2013).

Supersolid phases of dipolar fermions in a two-dimensional-lattice bilayer array

A. Camacho-Guardian and R. Paredes*

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

(Received 1 August 2016; published 21 October 2016)

Supersolid phases as a result of a coexistence of superfluid and density ordered checkerboard phases are predicted to appear in ultracold Fermi molecules confined in a bilayer array of two-dimensional square optical lattices. We demonstrate the existence of these phases within the inhomogeneous mean-field approach. In particular, we show that tuning the interlayer separation distance at a fixed value of the chemical potential produces different fractions of superfluid, density ordered, and supersolid phases.

DOI: [10.1103/PhysRevA.94.043638](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.043638)

I. INTRODUCTION

Several phases of matter appear in the quantum degenerate regime only, namely, superconductivity, superfluidity (SF), and supersolid (SS) phases. While the two formers have been successfully explained, the observation of the supersolid phase remains still elusive [1]. New efforts both experimentally [2,3] and theoretically [4,5] suggest that this exotic state of matter might be much more nontrivial than that initially thought [6]. On the other hand, not at necessarily low temperatures, but also manifesting many-body quantum statistical behavior, the high- T_c superconductivity phenomenon still continues as an open question in the context of condensed matter. Experiments with ultracold neutral gases are at the present time the closest candidates to quantum simulate, and thus address the description of such not quite yet understood quantum phases [7–12].

Recent experimental studies have shown how quantum phases such as SF, SS, Mott insulator, and charge-density wave, emerge from competing short- and long-range interactions among ultracold Bose atoms confined in an optical lattice coupled to a high finesse optical cavity [13]. Those phases arise as a result of exploiting the matter-light coupling since in such a case interactions can be tuned on demand. There is, however, an alternative way of handling either the range or direction of interactions in ultracold neutral gases, which is by confining dipolar atoms or molecules in optical lattices. As it has been shown from the theoretical perspective, the combination of both the long-range anisotropic character of dipolar interactions and the controllable lattice structure where the atoms/molecules lie make the many-body physics become very rich [14–18].

In this work we consider a model proposed previously [19–21] to demonstrate that ordered density wave (DW), SS, and SF phases can be accessed by changing the external fields that set the system. In Fig. 1 we show a scheme of the quantum simulator that can be created in the laboratory to explore the referred phases. The model system is composed of dipolar Fermi molecules lying in a bilayer array of square lattices in two dimensions. Although such a configuration has not been realized yet, the current experimental panorama of ultracold dipolar gases, in particular the potential capacity of loading long-lived Fermi molecules of NaK, KRb, and NaLi [22,23] in optical lattices as well as the recently produced rovibrational

ground state in molecules of NaK, is promising in setting the array here considered.

Previous mean-field analysis on dipolar fermions placed onto a single-layer square lattice, with arbitrary orientation and considering dipoles with fixed orientation, has predicted the melting among SF and DW phases [24–27] and a variety of DW phases [28], respectively. Also, an extended model including a mixture of Fermi molecules with contact interactions, loaded in a bilayer array, predicted density ordered phases as well as superfluids phases [19,29–32]. The possibility of supersolid phases in these dipolar Fermi gases has also been studied [25,26,33]. On the other side SF, Mott insulating, DW, and SS phases of He have been investigated within a mean-field context too [34–36]. In the present study we consider dipolar Fermi molecules situated in a double array of parallel optical lattices having dipole orientation perpendicular to the lattice in the presence of a harmonic trap, to demonstrate that in addition to SF and DW patterns there is a region of coexistence in the phase diagram where SS phases emerge. Working within the Bogoliubov-de Gennes (BdG) approach we show that depending upon carefully controlled parameters these phases can be accessed under current experimental conditions.

The paper is organized as follows. In Sec. II we introduce the model considered in our study and describe the theoretical approach employed. In Sec. III we illustrate the coexistence and spatial overlap among superfluid and DW phases for several values of the temperature. We summarize our findings in the phase diagram at finite and zero temperature. Finally, we present our conclusions in Sec. IV.

II. MODEL

We consider Fermi molecules of dipole moment d and mass m lying in two parallel square lattices of lattice constant a separated by a distance λ , and a harmonic trap with frequency ω (see Fig. 1). In the presence of an electric field perpendicular to the layers, the dipoles align along the same direction. Fermions in the same layer repel each other always; however, dipoles in different layers attract each other at short range, while also repelling each other at large distances. Thus, interaction between fermions in the same and in different layers is given, respectively, by

$$\begin{aligned} V^{\alpha,\alpha}(\vec{r}) &= d^2 \frac{1}{r^3}, \\ V^{\alpha,\beta}(\vec{r}) &= d^2 \frac{r^2 - 2\lambda^2}{(r^2 + \lambda^2)^{5/2}}, \end{aligned} \quad (1)$$

*Corresponding author: rosario@fisica.unam.mx

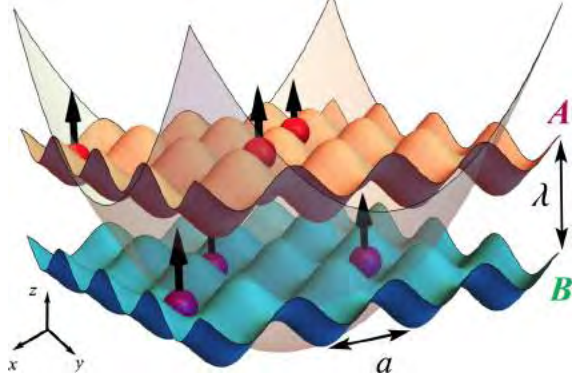


FIG. 1. Schematic representation of the dipolar Fermi gas. The molecules affected by a harmonic trap potential lie in the lattice sites in up and down layers.

where r is the in-plane distance between two fermions. Greek indices label the layer where the molecule is placed. Thus, superscripts α, α (α, β) indicate that interaction occurs between fermions in same (different) layers. For clarity, we denote the intralayer interaction by $V^{\alpha, \alpha}(\vec{r}) = V(\vec{r})$, and the interlayer interaction by $V^{\alpha, \beta}(\vec{r}) = U(\vec{r})$. The system is described by the Hubbard model with the Hamiltonian given by $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{U}$, with

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\alpha=A,B} \sum_{\vec{k}} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu_{\alpha}) \hat{n}_{\vec{k}}^{\alpha} + \sum_{\alpha=A,B} \sum_{\vec{i}} \frac{m\omega^2}{2} r^2(\vec{i}) \hat{n}_{\vec{i}}^{\alpha}, \\ \hat{V} &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\alpha=A,B} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} V(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}, \alpha} \hat{c}_{\vec{k}', -\vec{q}, \alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}', \alpha}, \\ \hat{U} &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} U(\vec{k} - \vec{k}') \hat{c}_{\vec{q}/2+\vec{k}, A}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{q}/2-\vec{k}, B}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{q}/2-\vec{k}', B} \hat{c}_{\vec{q}/2+\vec{k}', A} \end{aligned} \quad (2)$$

where $\hat{c}_{\vec{k}, \alpha}^{\dagger}, \hat{c}_{\vec{k}, \alpha}$ are the standard creation and annihilation operators and $\hat{n}_{\vec{k}, \alpha} = \hat{c}_{\vec{k}, \alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}, \alpha}$ are the number operator. $\epsilon_{\vec{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ is the in-plane energy dispersion of the ideal Fermi gas within the tight-binding approximation, t being the hopping among nearest neighbors. $V(\vec{q})$ and $U(\vec{k} - \vec{k}')$ are the Fourier transforms of $V(\vec{r} - \vec{r}')$ and $U(\vec{r})$, respectively, and Ω is the number of sites. The terms containing the harmonic confinement are written in the Fock basis of sites, where the vector position in the lattice is denoted by $\vec{r}(i) = a(i_x, i_y)$, and ω is the frequency of the harmonic trap that confines the molecules. In what follows, all the energies will be scaled with respect to t . We also introduce two relevant physical quantities: the dipolar interaction strength $a_d = m_{\text{eff}} d^2 / \hbar^2$, with $m_{\text{eff}} = \hbar^2 / 2ta^2$ the effective mass, and the dimensionless parameters $\Lambda = \lambda/a$ and $\chi = a_d/a$.

The proposed model can be mapped into a system of fermions in two different hyperfine spin states \uparrow, \downarrow ($A \rightarrow \uparrow, B \rightarrow \downarrow$) confined in a two-dimensional lattice. The terms V and U describe repulsive and attractive interactions among fermions in the same and different hyperfine states, respectively. We should stress that U is an interaction that is attractive at short distances while becoming repulsive at long distances. Thus, by controlling the separation between the layers λ , the proposed model represents a promising candidate to study the quantum phases from competing short- and long-range interactions as well as attractive versus repulsive interactions. The inclusion of the harmonic potential plays also a crucial role since, as it is well known, the global thermodynamics of the phase transition is qualitatively different from that of the homogeneous case [37]. A remarkable signature of this fact is that the magnitude of the coherence length can be as large as the typical confinement distance.

To investigate the physics of the model described above, we use mean-field theory including the usual BCS pairing terms and the Hartree contributions [38]. We expect this approximation to be reasonably accurate in the weakly interacting

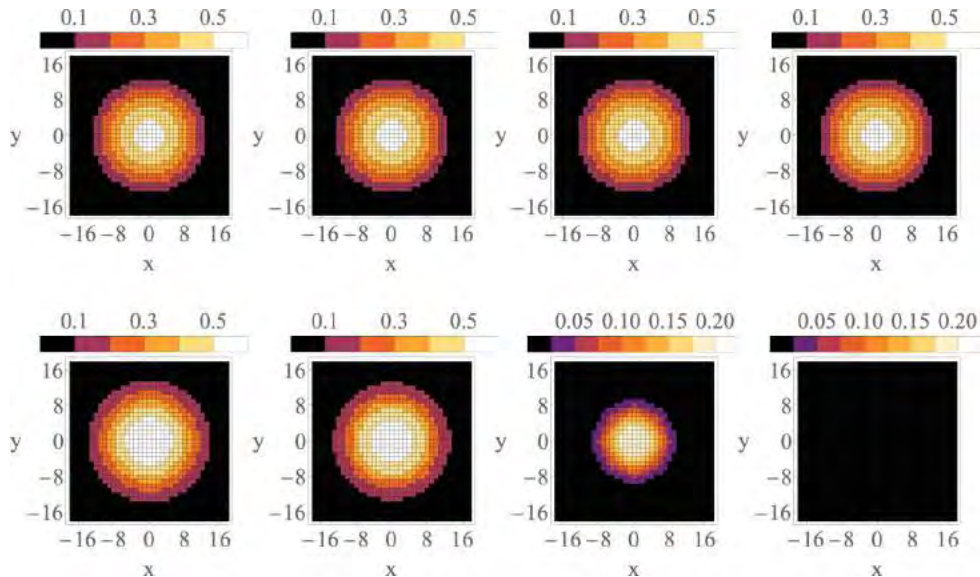


FIG. 2. Density order profile (top) and superfluid order parameter (bottom) as a function of the temperature. From left to right $k_B T/t = 0.0, 0.1, 0.25$ and 0.45 . For $\Lambda = 0.80$ and $\chi = 0.3$

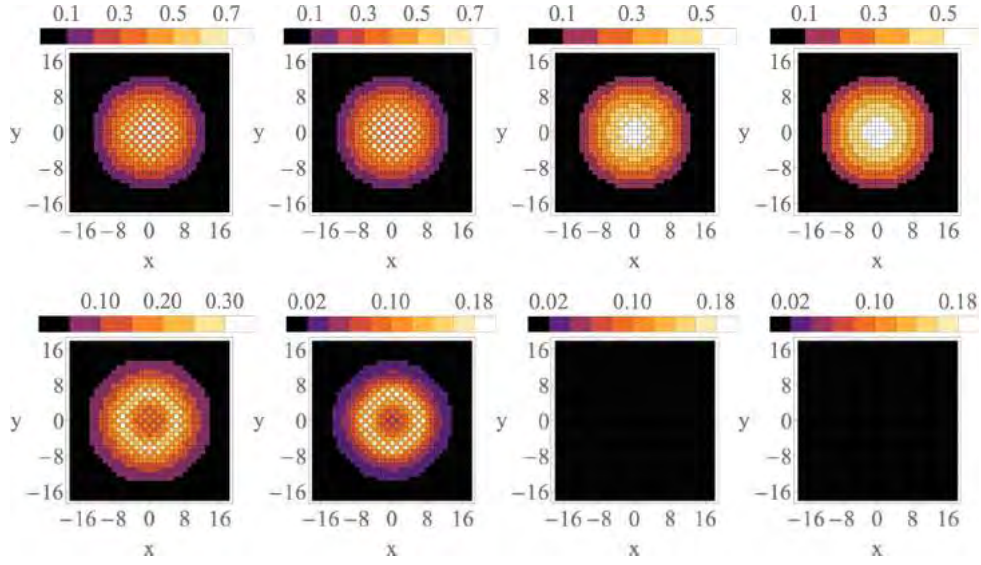


FIG. 3. Density order profile (top) and superfluid order parameter (bottom) as a function of the temperature. From left to right $k_B T/t = 0.0, 0.10, 0.25$, and 0.45 . For $\Lambda = 0.85$ and $\chi = 0.3$.

regime. The mean-field Hamiltonian is self-consistently diagonalized by solving the BdG obtained from the Bogoliubov transformation for the local quasiparticle amplitudes. Such a procedure allows us to capture the essence of the BCS pairing and the density order phase in an inhomogeneous environment [25,26,39]. This mean-field approach is commonly used for studying competing magnetic and superconducting phases in the context of high T_c superconductivity [16,40] and in the context of ultracold fermions [41]. It also has been recently employed for describing strongly correlated systems, like effective p -wave interaction and topological superfluids in quantum gases in lower-dimensional systems (one and two dimensions) [11]. The Bogoliubov-de Gennes equations to be solved are

$$\sum_i \begin{pmatrix} H_{ij,\alpha}^0 & \Delta_{i,j} \\ \Delta_{i,j} & -H_{ij,\bar{\alpha}}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{j,\alpha}^n \\ v_{j,\bar{\alpha}}^n \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_{j,\alpha}^n \\ v_{j,\bar{\alpha}}^n \end{pmatrix}, \quad (3)$$

where the matrix elements $H_{ij,\alpha}^0$ incorporate the terms of the single-particle operators of Eq. (2) and the intersite interaction on the Hartree level that is expected to dominate [38]. This term is given explicitly by $H_{ij,\alpha}^0 =$

$-t\delta_{(i,j)} + (\sum_{l \neq i} V_{li} \langle n_{l,\alpha} \rangle + \epsilon_i - \mu)\delta_{i,j}$, $t\delta_{(i,j)}$ being the tunneling among nearest neighbors with $\delta_{(i,j)}$ the Kronecker delta for nearest neighbors. The effect of the harmonic confinement is included through $\epsilon_i = \frac{m\omega^2}{2} r^2(i)$. The superfluid parameter is incorporated self-consistently by substituting $\Delta_{i,j} = U_{i,j} \langle c_{i,A} c_{j,B} \rangle$, being the eigenvalues E_n associated to the excitation energy for the n th quasiparticle. Those eigenvalues are self-consistently obtained through the usual relations $n_{i,A} = \sum_n |u_{i,A}|^2 f(E_n)$ and $n_{i,B} = \sum_n |v_{i,B}|^2 [1 - f(E_n)]$ with $(u_{i,\alpha}^n, v_{i,\bar{\alpha}}^n)$ the local Bogoliubov quasiparticle amplitudes, $f(E_n)$ being the Fermi distribution and $n_{i,\alpha}$ the expectation value of $\hat{n}_{i,\alpha}$. For simplicity we shall assume that both layers are equally populated.

To include the effects of the harmonic trap, in addition to the usual order parameters that globally describe the system, we introduce local order parameters. The global density order parameter is given by $\rho_{\vec{Q},\alpha} = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{Q},\alpha}^\dagger c_{\vec{k},\alpha}$, where the vector \vec{Q} identifies either a checkerboard pattern $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ or a stripe density order $\vec{Q} = (\pi/a, 0)$, or $(0, \pi/a)$. The local-density order parameter is given by $\phi_i = \sum_{j_i} (-1)^{j_i} n_{j_i}$, where the index j_i denotes that the sum

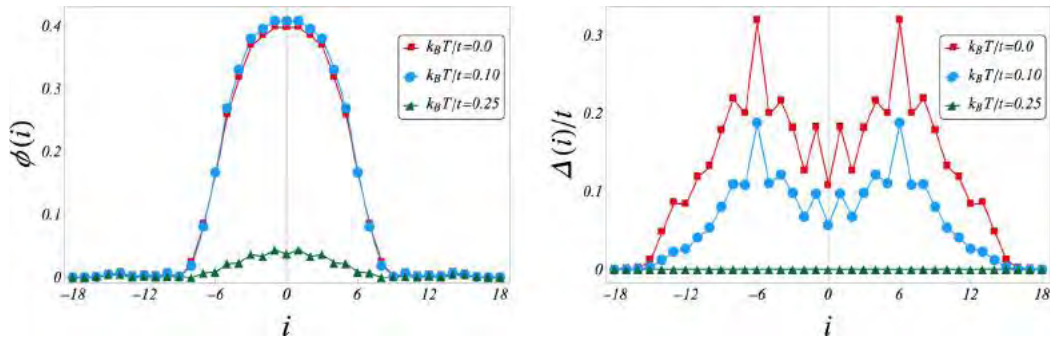


FIG. 4. Local order parameters. We plot a cross section of the local density $\phi(x, 0)$ and the local gap $\Delta(x, 0)$ through the center of the trap for $k_B T/t = 0.0, 0.10$, and 0.25 . For $\Lambda = 0.85$ and $\chi = 0.3$.

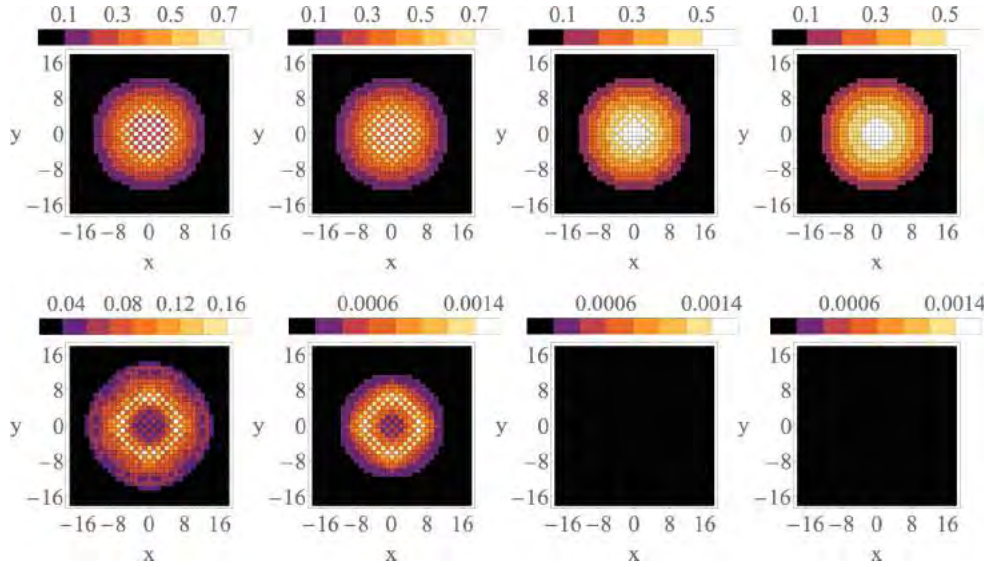


FIG. 5. Density order profile (top) and superfluid order parameter (bottom) as a function of the temperature. From left to right $k_B T/t = 0.0, 0.10, 0.25$, and 0.45 . For $\Lambda = 0.90$ and $\chi = 0.3$.

runs over the first- and second-nearest neighbors. This local order parameter describes a checkerboard density pattern in a 3×3 sublattice centered at site i . The superfluid local order parameter is given by $\Delta_i = \sum_{j_i} \Delta_{i,j}$, being the average superfluid behavior studied through $\Delta = \sum_i \Delta_i / N_A$.

III. SUPERSOLID: COEXISTENCE OF SUPERFLUID AND DENSITY ORDERED PHASES

To determine the density profile and the behavior of the gap across the lattice, we solve BdG equations for lattices of size $\Omega = 2 \times 37 \times 37$, maintaining fixed the value of chemical potential $\mu/t = 1.5$ [42]. This restriction causes the total number of fermions to be increased with temperature, that is, at zero temperature the number of fermions is $N_A + N_B = 320$ while for $k_B T/t = 0.5$ this value is increased to 335. We also keep fixed the values of the interaction strength and the harmonic frequency at $\chi = 0.3$ and $\frac{1}{2}m(\omega a)^2/t = 0.025$, respectively.

To illustrate the competition among different phases we have selected the cases $\Lambda = 0.8, 0.85, 0.9$, and 1.0 . We plot the density profile and the gap parameter profile for several

values of the temperature. In particular, we chose $k_B T/t = 0.0, 0.10, 0.25$, and 0.45 .

First we start considering $\Lambda = 0.8$. From Fig. 2 we observe a homogeneous distribution at the center of the trap at zero temperature for both density and gap profiles. However, at finite temperature, the distribution of the density profile remains homogeneous at the center of the trap, while the gap structure shows a decreasing behavior as temperature is increased until they vanish at a temperature of $k_B T/t = 0.28$. Previous studies [20,21] reported a BCS superfluid phase in the weakly interacting regime while formation of dimers occurs in the strong interaction regime, leading those dimers to a Bose superfluid. In the present work we focus on the BCS superfluid to DW-supersolid phase transition. Therefore, the values of the parameters are restricted to those in which the weakly interacting regime is ensured.

When the interlayer spacing is increased, the competition between attractive and repulsive dipole interactions becomes evident. As plotted in Fig. 3, for $\Lambda = 0.85$ at low temperatures, there is a large region in the center of the trap having a superfluid order parameter coexisting with a checkerboard density order. This is the signature of a supersolid phase.

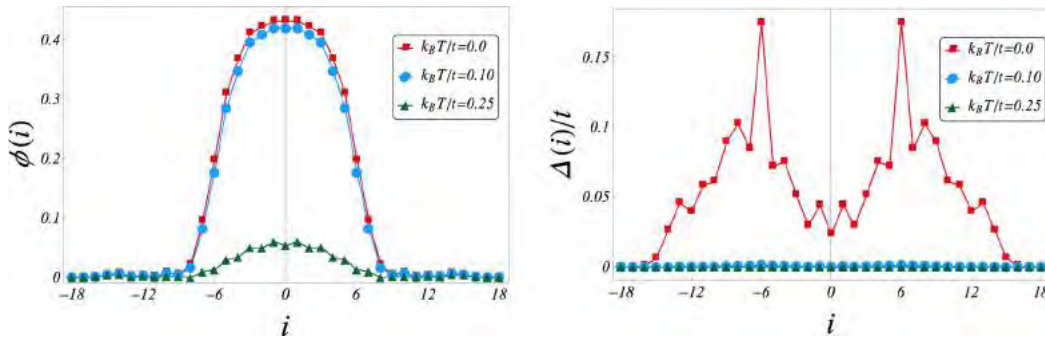


FIG. 6. Local order parameters. We plot a cross section of the local density $\phi(x,0)$ and the local gap $\Delta(x,0)$ through the center for $k_B T/t = 0.0, 0.10$, and 0.25 . For $\Lambda = 0.90$ and $\chi = 0.3$.

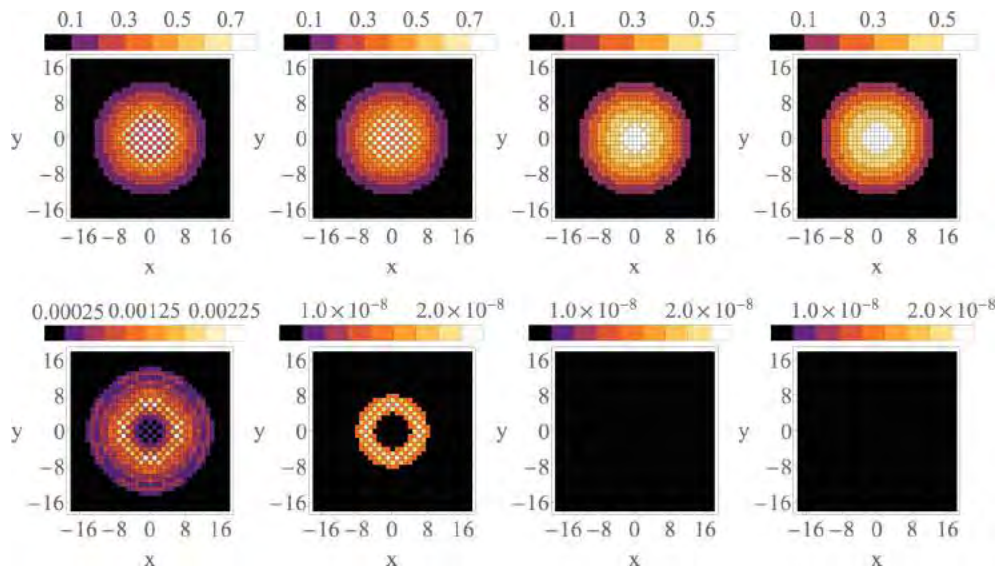


FIG. 7. Density order profile (top) and superfluid order parameter (bottom) as a function of the temperature. From left to right $k_B T/t = 0.0, 0.10, 0.25$, and 0.45 . For $\Lambda = 1.0$ and $\chi = 0.3$.

When the temperature is increased, the radius of the superfluid order parameter shrinks and completely vanishes at a critical temperature of $k_B T/t = 0.13$, while the checkerboard phase melts at a temperature of $k_B T/t = 0.26$. That is, the supersolid phase exists, in this system, for certain temperatures, as further shown below in the corresponding phase diagram. Cross sections of the local order parameters are shown in Fig. 4, where the presence of a supersolid phase at the center of the trap can be appreciated, as the spatial overlap of both superfluid and DW.

For $\Lambda = 0.9$ the repulsive intralayer interaction starts to dominate at the center of the trap. From Fig. 5 one can see that there is a wide region at the center of the trap exhibiting a checkerboard DW pattern. Such patterns persist below temperatures of $k_B T/t = 0.26$. We also observe that the superfluid order parameter appears to surround the checkerboard pattern and that such a superfluid disk completely vanishes when the temperature reaches a value of $k_B T/t = 0.06$. The cross sections shown in Fig. 6 exhibit a small region where both phases spatially overlap. Other studies [43,44] with different systems in the presence of a harmonic trap have shown coexistence of phases without spatial overlapping, for instance,

in the extended Bose-Hubbard model the Mott insulator and superfluid phases tend to form rings and disks. In two dimensions those studies agree quantitatively with quantum Monte Carlo calculations and more sophisticated methods.

Finally, when the interlayer spacing is large enough, the intralayer repulsive interaction dominates over the interlayer attraction and the superfluid order parameter almost vanishes. This behavior is found for $\Lambda = 1.0$, where pairing is inhibited. For larger values of Λ no pairs can be formed but a DW checkerboard pattern still persists at the center of the trap (see Fig. 7). This value of Λ signals the limit from which each layer can be studied separately. The single layer model has been studied previously considering arbitrary dipole moment orientations [25,26]. We found that our predictions are in good agreement with those results, that is, at a given critical temperature that depends on the interaction strength, checkerboard phases for perpendicular orientation of the dipole moment emerge.

In Fig. 8 we plot the two global order parameters Δ and ρ as a function of the temperature for values of Λ in the region of coexistence. As can be appreciated from this figure, Bogoliubov-de Gennes diagonalization predicts

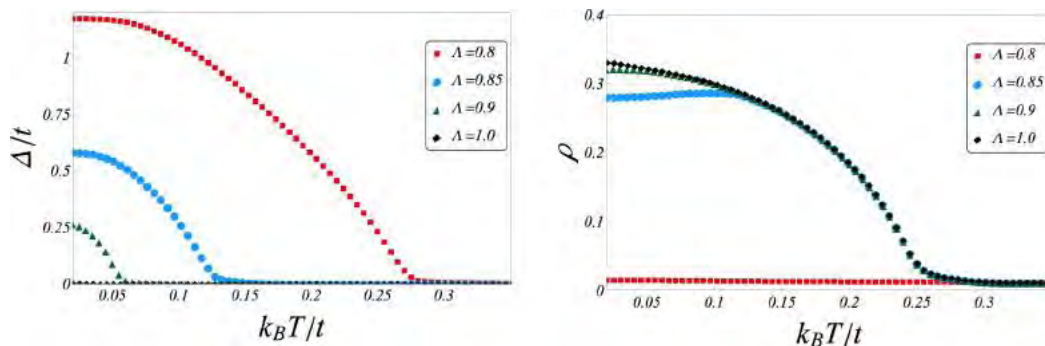


FIG. 8. Order parameters obtained from BdG diagonalization. A second-order continuous phase transition is shown.

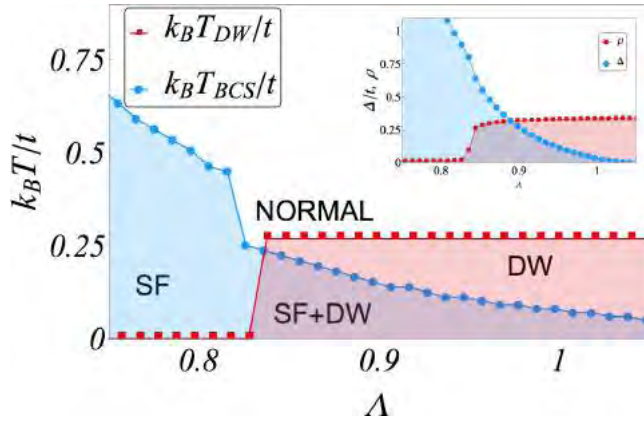


FIG. 9. Phase diagram for lattices of size $2 \times 37 \times 37$, as a function of the dimensionless interlayer separation $\Lambda = \lambda/a$. The interaction strength is $\chi = 0.3$.

continuous phase transitions for the considered model. One can observe that, for a given value of Λ , the critical temperature at which the superfluid phase emerges coincides with that at which the derivative of the DW order parameter shows a discontinuity. Numerical calculations performed for lattices of larger size ($\Omega = 2 \times 57 \times 57$) lead us to observe how the discontinuity of the derivative in ρ and Δ at the critical temperature becomes more evident as a function of Ω . Namely, the global order parameters Δ and ρ change more abruptly at the critical temperature as the lattice size is increased. It is also important to stress that the referred discontinuity in the derivative becomes less evident when the interlayer spacing is increased.

In Fig. 9 we present the phase diagram of this model, obtained from Bogoliubov-de Gennes equations for finite temperatures. In the inset we show the phase diagram at zero temperature. The region of coexistence between superfluid and DW phases in both diagrams is the supersolid phase of our system. As expected, in the attractive interaction regime the superfluid phase destroys any density order pattern. When the interlayer spacing λ becomes comparable with the lattice constant a , the superfluid phase and DW start to compete. For $\Lambda < 0.83$ there is no formation of density order pattern, while the critical temperature of the BCS superfluid phase decreases monotonously. Close to $\Lambda \approx 0.83$ a density order pattern is formed, then the critical temperature of this phase jumps quickly to a constant value. For values of Λ larger than 0.83 the critical temperature of the DW phase becomes almost independent of the interlayer spacing. On the other hand, the superfluid parameter Δ suddenly decreases at $\Lambda \approx 0.83$ and then again starts to decrease monotonously. In contrast with

the predictions obtained for the single layer system where the critical temperatures may be calculated using the value of the parameters at the center of the trap, this may not be completely true for the system here studied due the possible formation of disks and rings.

The maximum value of the critical temperature for the supersolid phase predicted by our model, considering the parameters of the current experimental systems, is $k_B T/t \approx 0.23$. Although such temperature is one order of magnitude smaller than those measured recently in experiments with fermionic KRb [23] and NaK [22], current efforts in controlling and lowering the temperature of molecules are promising to reach such critical temperatures in the near future.

IV. CONCLUSIONS

We have studied the thermodynamic phases that exhibited dipolar Fermi molecules placed at the sites of a bilayer array of square optical lattices in two dimensions in the presence of a harmonic confinement. Due to the nature of the dipolar interaction, where attractive and repulsive interactions are present, several phases are shown to form. While attractive interaction between molecules in different layers leads to predict superfluid phases, density order phases like checkerboard patterns result from the repulsive interaction. The competition between these phases gives rise to the formation of supersolid phases where both SF and DW phases coexist and spatially overlap. An exhaustive exploration of the space of parameters is summarized in the phase diagrams at zero and finite temperatures (see Fig. 9). Our predictions allowed us to identify clearly the influence of the harmonic potential in the occurrence of the transitions with respect to thermodynamics in the homogeneous case reported in previous literature. The system here studied in combination with the capability of trapping Fermi molecules in optical lattices as well as the recently reported production of rovibrational and hyperfine ground states of $^{23}\text{Na}^{40}\text{K}$ molecules constitutes a promising candidate to study the competition between BEC and BCS superfluid phases in coexistence with an ordered structure and thus offering the opportunity to quantum simulate a supersolid phase in ultracold experiments.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially funded by Dirección General de Asuntos del Personal Académico under Grants No. IN107014 DGAPA (UNAM), No. IN111516 DGAPA (UNAM) and Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología under Grants No. 255573 (CONACYT), and No. LN-232652 (CONACYT). A.C.G. acknowledges a scholarship from CONACYT.

- [1] S. Balibar, *Nature (London)* **464**, 176 (2010).
- [2] E. Kim and M. H. W. Chan, *Nature (London)* **427**, 225 (2004); H. Choi, S. Kwon, D. Y. Kim, and E. Kim, *Nat. Phys.* **6**, 424 (2010).
- [3] M. W. Ray and R. B. Hallock, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 235301 (2008).
- [4] N. Prokof'ev, *Adv. Phys.* **56**, 381 (2007).

- [5] M. Mendoza-López and V. Romero-Rochín, *Rev. Mex. Fis.* **62**, 586 (2016).
- [6] M. Boninsegni and N. V. Prokof'ev, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 759 (2012).
- [7] W. Hofstetter, J. I. Cirac, P. Zoller, E. Demler, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 220407 (2002).

- [8] C.-K. Chan, C. Wu, W.-C. Lee, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. A* **81**, 023602 (2010).
- [9] B. Liu, X. Li, B. Wu, and W. V. Liu, *Nat. Comm.* **5**, 5064 (2014).
- [10] A. Bühler, N. Lang, C. V. Kraus, G. Möller, S.D. Huber, and H. P. Büchler, *Nat. Comm.* **5**, 4504 (2014).
- [11] B. Wang, Z. Zheng, H. Pu, X. Zou, and Guangcan Guo, *Phys. Rev. A* **93**, 031602(R) (2016).
- [12] Y. Fujihara, A. Koga, and N. Kawakami, *Phys. Rev. A* **81**, 063627 (2010).
- [13] R. Landig, L. Hruby, N. Dogra, M. Landini, R. Mottl, T. Donner, and T. Esslinger, *Nature (London)* **532**, 476 (2016).
- [14] M. A. Baranov, *Phys. Rep.* **464**, 71 (2008).
- [15] T. Lahaye, T. Koch, B. Frölich, M. Fattori, J. Metz, A. Griesmaier, S. Giovanazzi, and T. Pfau, *Nature (London)* **448**, 672 (2007); T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, and T. Pfau, *Rep. Prog. Phys.* **72**, 126401 (2009).
- [16] Y. Chen, Z. D. Wang, F. C. Zhang, and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **79**, 054512 (2009).
- [17] N. T. Zinner, B. Wunsch, D. Pekker, and D.-W. Wang, *Phys. Rev. A* **85**, 013603 (2012).
- [18] A. K. Fedorov, S. I. Matveenko, V. I. Yudson, and G. V. Shlyapnikov, *Sci. Rep.* **6**, 27448 (2016).
- [19] T. I. Vanhala, J. E. Baarsma, M. O. J. Heikkinen, M. Troyer, A. Harju, and P. Törmä, *Phys. Rev. B* **91**, 144510 (2015).
- [20] A. Camacho-Guardian and R. Paredes, *Ann. Phys. (Berlin)* doi:10.1002/andp.201600101.
- [21] F. Ancilotto, *Phys. Rev. A* **93**, 053627 (2016).
- [22] J. W. Park, S. A. Will, and M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 205302 (2015).
- [23] K. K. Ni, S. Ospelkaus, M. H. G. de Miranda, A. Pe'er, B. Neyenhuis, J. J. Zirbel, S. Kotochigova, P. S. Julienne, D. D. Jin, and J. Ye, *Science* **322**, 231 (2008).
- [24] N. T. Zinner and G. M. Bruun, *Eur. Phys. J. D* **65**, 133 (2011).
- [25] Anne-Louise Gadsbolle and G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **85**, 021604(R) (2012).
- [26] Anne-Louise Gadsbolle and G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **86**, 033623 (2012).
- [27] S. G. Bhongale, L. Mathey, S.-W. Tsai, C. W. Clark, and E. Zhao, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 145301 (2012).
- [28] K. Mielsonson and J. K. Freericks, *Phys. Rev. A* **83**, 043609 (2011).
- [29] Y. Prasad, A. Medhi, and V. B. Shenoy, *Phys. Rev. A* **89**, 043605 (2014).
- [30] M. A. Baranov, A. Micheli, S. Ronen, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* **83**, 043602 (2011).
- [31] A. Pikovski, M. Klawunn, G. V. Shlyapnikov, and L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 215302 (2010).
- [32] A. C. Potter, E. Berg, D.-W. Wang, B. I. Halperin, and E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 220406 (2010).
- [33] L. He and W. Hofstetter, *Phys. Rev. A* **83**, 053629 (2011).
- [34] P. Nozières, *J. Low Temp. Phys.* **156**, 9 (2009).
- [35] J. Ye, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 125302 (2006).
- [36] S. Rica, *Phys. Rev. B* **84**, 184535 (2011).
- [37] I. Reyes-Ayala, F. J. Poveda-Cuevas, J. A. Seman, and V. Romero-Rochín, *arXiv:1607.02389v2* (2016).
- [38] E. Müller-Hartmann, *Z. Phys. B* **74**, 507 (1989).
- [39] Self-consistent Bogoliubov-de Gennes diagonalization was iterated until convergence criteria was reached. The convergence criteria was reached when $\max(|\Delta_{ij}^{(m+1)} - \Delta_{ij}^{(m)}|/|\Delta_{ij}^{(i)}|, |n_i^{(m+1)} - n_i^{(m)}|/|n_i^{(i+1)}|) < 10^{-5}$ using the Frobenius norm for the matrices norm.
- [40] Y. Chen, Z. D. Wang, J.-X. Zhu, and C. S. Ting, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 217001 (2002).
- [41] B. M. Andersen and G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **76**, 041602(R) (2007).
- [42] The chemical potential remains as a global thermodynamic quantity, even within the local-density approximation. V. Romero-Rochín, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 130601 (2005).
- [43] J. M. Kurdestany, R. V. Pai, and R. Pandit, *Ann. Phys. (Berlin)* **524**, 234 (2012).
- [44] R. V. Pai, J. M. Kurdestany, K. Sheshadri, and R. Pandit, *Phys. Rev. B* **85**, 214524 (2012).

Bibliografía

- [1] H. Kamerlingh Onnes, *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden*, **124c** (1911).
- [2] P. Kapitsa, *Nature* **141**, 74,(1938).
- [3] J. F. Allen y A. D. Misener, *Nature* **141**, 75 (1938).
- [4] A. Abrikosov, *Sov. Phys. JETP* (1957)
- [5] N. Bogoliubov, *J. Phys. USSR* **11**, 23 (1947).
- [6] V. L. Ginzburg y L. D. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950)
- [7] L. P Gorkov, *Sov. Phys. JETP*, (1959)
- [8] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47** , 331 (1975)
- [9] F. London y H. London, *Proc. R. Soc. Lond. A* **149**, 71 (1935).
- [10] L. Cooper, *Phys. Rev* **104**, 1189 (1956).
- [11] J. Bardeen, L. N. Cooper, y J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108** 1175 (1957).
- [12] W. Meissner y R. Ochsenfeld, *Naturwissenschaften* **21 (44)**, 787 (1933)
- [13] R. J. Donnelly, *Quantized Vortices in Helium II*, Cambridge University Press, (1991).
- [14] L. Andronikashvili, *J. Phys. USSR* **10**, 201 (1946).
- [15] E. Kim y M. H. W. Chan, *Nature* **427**, 225 (2004), H. Choi, S. Kwon, D. Y. Kim, y E. Kim, *Nat. Phys.* **6**, 424 (2010).
- [16] M. W. Ray and R.B. Hallock, *Phys. Rev. Lett.* **100** 235301 (2008).
- [17] S. Balibar, *Nature* **464**, 176 (2010).
- [18] J. G. Bednorz y K. A. Müllerm, *Zeitschrift für Physik B.* **64 (2)**, 189 (1986).
- [19] S. N Bose, *Zeitschrift für Physik* **26** 178 (1924).
- [20] A. Einstein, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften* **1**, 3 (1925) .

- [21] M. Anderson , J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman, y E. Cornell, *Science* **269**, 5221 (1995).
- [22] B. De Marco y D. Jin , *Science* **285** , 5434 (1999).
- [23] H. Feshbach, *Ann Phys. (New York)* **5**, 357(1958).
- [24] S. Pethick, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge. (2002)
- [25] M. C. Tsatsos, et al., *Phys Rep.* **622**, 1 (2016).
- [26] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, y W. Ketterle, *Science* **292**. 5516 (2001).
- [27] D. M. Eagles, *Phys. Rev.* **186**, 456 (1969).
- [28] A. J. Leggett, *J. Phys. (Paris)* **42**, C7 (1980).
- [29] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, y J. Dalibard, *Nature* **441**, 1118 (2006).
- [30] R. Landig, L. Hruby, N. Dogra, M. Landini, R. Mottl, T. Donner, y T. Esslinger, *Nature* **532**, 476 (2016).
- [31] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, K. Sengstock, A. Sanpera, G. V. Shlyapnikov, y M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5198 (1999).
- [32] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, A. Aspect, *Nature* **453** , 891 (2008).
- [33] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, y M. Inguscio, *Nature* **453** 895, (2008).
- [34] M. Schreiber, S. S. Hodgman, P. Bordia, H. P. Lüschen, M. H. Fischer, R. Vosk, E. Altman, U. Schneider, y I. Bloch, *Science* **349** , 842 (2015).
- [35] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch, I. Bloch, *Nature* **415** (2002), 39.
- [36] K. Baumann , C. Guerlin , F. Brennecke , T. Esslinger, *Nature* **464**, 1301 (2010).
- [37] G. Jotzu, M. Messer , R. Desbuquois, M. Lebrat , T. Uehlinger, D. Greif , T. Esslinger, *Nature* **515**, 237(2014).
- [38] T. Uehlinger et al., *Phys. Rev. Lett.* **111** 185307 (2013).
- [39] M. W. Ray , E. Ruokokoski , S. Kandel, M. Möttönen, y D. S. Hall , *Nature* **505**, 657, (2014).
- [40] R. Landig, L. Hruby, N. Dogra, M. Landini, R. Mottl, T. Donner, and T. Esslinger, *Nature* **532**, 476 (2016).

- [41] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley (1995).
- [42] T. Lahaye, T. Koch, B. Frohlich, M. Fattori, J. Metz, A. Griesmaier, S. Giovanazzi, y T. Pfau, *Nature* **448** , 672 (2007).
- [43] M. Lu , N. Burdick, S. Youn, y B. Lev. *Phys Rev. Lett.* **107** (2011).
- [44] K. Aikawa ,A. Frisch, M. Mark M, S. Baier, A. Rietzler, R. Grimm, y, F Ferlaino *Phy. Rev. Lett.* **108** (2012).
- [45] A. Frisch, M. Mark, K. Aikawa, S. Baier, R. Grimm, A. Petrov, S. Kotochigova, G. Quémener, M. Lepers, O. Dulieu, y F. Ferlaino, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 203201 (2015).
- [46] M. Lu , N. Burdick, y B. Lev, *Phys. Rev. Lett*, **108** 215301 (2012).
- [47] R. Pires et al., *Phys. Rev. A.* **90**, 012710 (2014).
- [48] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, S. Grimm, J. L. Bohn, D. S. Jin, G. M. Bruun, y F. Ferlaino , *Phys.Rev.Lett.*, **113**, 263201 (2014).
- [49] J. W. Park, S. A. Will y M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 205302 (2015).
- [50] G. Quéméner, y P. Julienne , *Chem. Rev.* **112**, 4949 (2012).
- [51] M. H. G. de Miranda, et al., *Nat. Phys.* **7**, 502 (2011).
- [52] L. D. Carr , D. DeMille, R. V. Krems, y J. Ye, *New J. Phys.* **11**, 055049 (2009).
- [53] R. V. Krems, W. C. Stwalley, y B. Friedrich, *Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications* (CRC Press) p142. (2009)
- [54] M. Baranov, *Physics Reports* **464** , 71 (2008).
- [55] M. Baranov, A. Micheli, S. Ronen, P. Zoller *Phys. Rev. A* **83** , 043602 (2007).
- [56] Q. Chen , J. Stajic , S. Tan , y K. Levin , *Physics Reports* **412** , 1 (2005).
- [57] M. A. Baranov, *Phys. Rep.* **464**, 71 (2008).
- [58] C. Trefzger, C. Menotti, B. Capogrosso-Sansone, y M. Lewenstein, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 193001 (2011).
- [59] M. Lu, N. Q. Burdick, y B. K. Lev , *Phys. Rev. Lett.* **108**, 215301 (2012).
- [60] B. K. Stuhl, M. T. Hummon, M. Yeo ,G. Quéméner, J. L Bohn, y J. Ye, *Nature* **492**, 396 (2012).
- [61] T. Lahaye , C. Menotti , L Santos , M. Lewenstein, y T. Pfau , *Reports on Progress in Physics* **72** , 126401 (2009).
- [62] S. Ospelkaus, *Science* **327** 853 (2010).

- [63] K. -K. Ni, S. Ospelkaus, D. Wang, G. Quéméner, B. Neyenhuis, M. de Miranda, J. Bohn, J. Ye, y D. Jin, *Nature* **464**, 1324 (2010).
- [64] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, I. L. Kurbakov, y Y. E. Lozovik, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 060405 (2007).
- [65] C. Trefzger, C. Menotti, y M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **103** 035304 (2009).
- [66] K. Góral, L. Santos y M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett* **88**, 170406 (2002).
- [67] D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002).
- [68] S. Yelin, K. Kirby, y R. Cote, *Phys. Rev. A* **74**, 050301 (2006).
- [69] A. Gorshkov, et al. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 115301 (2011).
- [70] K. Hazzard, S. Manmana, M. Foss-Feig, y A. Rey, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 075301 (2013).
- [71] A. J. Leggett, *Nature Physics* **2** 134 (2006).
- [72] W. Hofstetter, J. I. Cirac, P. Zoller, E. Demler and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 220407 (2002).
- [73] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press), p243-300 (2006).
- [74] V. B. Popov, *Functional integral and collective excitations* Cambridge University Press (1989).
- [75] P. Fulde, y R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964).
- [76] A. I. Larkin, y Y. N. Ovchinnikov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47**, 1136.(1964)
- [77] M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).
- [78] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **276**, 238 (1963).
- [79] J. Hubbard, *Proc. R. soc. London Ser. A* **277**, 237 (1964).
- [80] J. Kanamori, *Prog. Theor. Phys.* **30 (3)**, 27 (1963).
- [81] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [82] Th. Maier, M. Jarrell, Th. Pruschke, y J. Keller *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1524 (2000)
- [83] E. Cocchi, L. A. Miller, J. H. Drewes, M. Koschorreck, D. Pertot, F. Brennecke, y M. Köhl, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 175301 (2016).
- [84] A. F. Ho, A. Cazalilla, y T. Giamarchi, *Phys. Rev. A* **79**, 033620 (2009).
- [85] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer.

- [86] N. D. Mermin, y Wagner H, *Phys. Rev. Lett* **17** 1133 (1966).
- [87] V. L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **32**, 493 (1971).
- [88] J. M. Kosterlitz y D. J. Thouless, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **6**, 1181 (1973).
- [89] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.***69**, 2863 (1992).
- [90] A. Georges, Kotliar, W. Krauth, y M. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68** (1), 13 (1996).
- [91] L. K. Wagner, y D. M. Ceperley, *Rep Prog Phys.* **79**(9), 09450 (2016).
- [92] P. Nozières, S. Schmitt-Rink, *J. Low. Temp. Phys.* **59**, 195 (1985).
- [93] Q. Chen, J. Stajic, S. Tan y K. Levin, *Phys. Rep.* **412**, 1 (2005).
- [94] W. Zwerger, *The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas* (Springer-Verlag), p79-89 (2012).
- [95] C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria, y J. R. Engelbrecht, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3202 (1993).
- [96] E. Burovski, N. Prokofèv, N. Svistunov, B. Troyer, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 160402 (2006).
- [97] D. S. Petrov, C. Salomon, y G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 0900404 (2004).
- [98] M. Randeria y E. Taylor, *Annu. Rev. Condens. Matter. Phys.* **5**, 209 (2014).
- [99] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Güter, y T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 80403, (2005).
- [100] T. Paananen, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42**, 165304 (2009).
- [101] J. -P. Martikainen, *Phys. Rev. A* **78**, 035602 (2008).
- [102] R. Roth y K. Burnett, *Phys. Rev. A* **67**, 031602 (R) (2003).
- [103] Y. Fujihara, A. Koga, y N. Kawakami, *Phys. Rev. A*, **81**, 063627 (2010).
- [104] Y. Prasad, A. Medhi, y V. B. Shenoy, *Phys. Rev. A* **89**, 043605 (2014).
- [105] A. Camacho-Guardian y R. Paredes, *Ann. Phys. (Berlin)* **528** (11-12), 778 (2016).
- [106] A. K. Fedorov, S. I. Matveenko, V. I. Yudson, y G. V. Shlyapnikov, *Sci. Rep.* **6**, 27448 (2016).
- [107] K. Mielsonson y J. K. Freericks, *Phys. Rev. A* **83** 043609 (2011).

- [108] A. Gadsbølle y G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **86** 033623 (2012).
- [109] A. Gadsbølle y G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **(R)** **85** 021604 (2012).
- [110] E. G. C. P. van Loon, M. I. Katsnelson, y M. Lemeshko, *Phys. Rev. B* **92**, 081106(R) (2015).
- [111] T. I. Vanhala, J. E. Baarsma, M. O. J. Heikkinen, M. Troyer, A. Harju, y P. Törmä, *Phys. Rev. B* **91**, 144510 (2015).
- [112] K. R. A. Hazzard et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 195302 (2014).
- [113] G. M. Bruun y E. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 245301(2008).
- [114] M. Keller, W. Metzner, y U. Schollwöck, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4612 (2001).
- [115] L. He y W. Hofstetter, *Phys. Rev. A* **83**, 053629 (2011).
- [116] A. Camacho-Guardian y R. Paredes, *Phys. Rev. A* **94**, 043638 (2016).
- [117] F. Ancilotto, *Phys. Rev. A* **93**, 053627 (2016).
- [118] O. Boada, A. Celi, J. I. Latorre, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 133001 (2012).
- [119] A. Celi, P. Massignan, J. Ruseckas, N. Goldman, I. B. Spielman, G. Juzeliunas, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 043001 (2014).
- [120] L. F. Livi, G. Cappellini, M. Diem, L. Franchi, C. Clivati, M. Frittelli, F. Levi, D. Calonico, J. Catani, M. Inguscio, L. Fallani, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 220401 (2016).
- [121] C.-K. Chan, C. Wu, W.-C. Lee, y S. Das Sarma, *Phys. Rev. A* **81**, 023602 (2010).
- [122] B. Liu, X. Li, B. Wu, y W. V. Liu, *Nat. Comm.* **5**, 5064 (2014).
- [123] B. Wang, Z. Zheng, H. Pu, X. Zou, y Guangcan Guo, *Phys. Rev. A* **93**, 031602(R) (2016).
- [124] B. Liu y L. Yin, *Phys. Rev. A* **86** 031603(R) (2012) .
- [125] A. Bühler, N. Lang, C. V. Kraus, G. Möller, S. D. Huber, y H. P. Büchler, *Nat. Commun.* **5**, 5064 (2014).
- [126] G. M. Bruun, C. Hainzl y M. Laux, *arXiv:1512.01849* (2015).
- [127] P. Nozières, *J. Low Temp. Phys.* **156**, 9 (2009).
- [128] J. Ye, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 125302 (2006).
- [129] S. Rica, *Phys. Rev. B* **84**, 184535 (2011)..

- [130] M. Mendoza-López y V. Romero-Rochín, *Rev. Mex. Fis.* **62(6)**, 586 (2016)
- [131] M. Boninsegni y N. V. Prokof'ev, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 759 (2012).
- [132] J. Li, J. Lee, W. Huang, S. Burchesky, B. Shteynas, F. C. Top, A. O. Jamison, W. Ketterle, arXiv:1610.08194
- [133] M. Valiente y D. Petrosyan, *J. Phys. B.* **41**, 161002 (2008).
- [134] M. Wouters y G. Orso, *Phys. Rev. A* **73**, 012707 (2006).
- [135] M. Valiente, *Phys. Rev. A* **81**, 042102 (2010).
- [136] A. G. Volosniev, N. T. Zinner, D. V. Fedorov, A. S. Jensen , y B. Wunsch, *J. Phys. B* **44**, 125301 (2011).
- [137] N. T. Zinner, J. R. Armstrong, A. G. Volosniev, D. V. Fedorov, y A. S. Jensen, *Few Body Syst.* **53**, 369 (2012).
- [138] A. C. Potter, E. Berg, D. -W. Wang, B. I. Halperin y E. Demler, *Phys. Rev. A* **105**, 220406 (2010).
- [139] A. Camacho-Guardian, G. A. Domínguez-Castro, R Paredes, *Ann. Phys. (Berlin)* **528** (7-8), 580 (2016).
- [140] Z. Wu, J. K. Block, y G. M. Bruun, *Phys. Rev. B* **91**, 224504 (2015).
- [141] M. A. Baranov, A. Micheli, S. Ronen, y P. Zoller, *Phys. Rev. A* **83**, 043602 (2011).
- [142] A. Pikovski, Klawunn ,G. Shlyapnikov, y L. Santos, *Phy. Rev. Lett.* **105**, 215302 (2010).
- [143] A. C. Potter, E. Berg E, D. -W. Wang, B. I. Halperin, y E. Demler, *Phys.Rev. Lett.* **105**, 220406 (2010).
- [144] N. T. Zinner, B. Wunsch, D. Pekker, y D. -W. Wang, *Phys. Rev. A* **85**, 013603 (2012).
- [145] H. P. Büchler, E. Demler, M. Lukin, A. Micheli, N.Prokof'ev, G. Pupillo ,y P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 060404 (2007).
- [146] S. Moroni y M. Boninsegni, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 240407 (2014).
- [147] J. V. José, *40 years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless theory* (World Scientific.) p297-319 (2013).
- [148] M. M. Parish y F.M. Marchetti, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 145304 (2012).
- [149] N. T. Zinner y G. M. Bruun, *Eur. Phys. J. D* **65**, 133 (2011).

- [150] S. G. Bhongale, L. Mathey, S. -W. Tsai, C. W. Clark, y E. Zhao, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 145301 (2012).
- [151] Q. Li, E. H. Hwang, y S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **82**, 235126 (2010).
- [152] E. Müller-Hartmann, *Z. Phys. B* **74**, 507 (1989).
- [153] Criterio de Convergencia se alcanza cuando $\max(|\Delta_{ij}^{(m+1)} - \Delta_{ij}^{(m)}|/|\Delta_{ij}^{(i)}|, |n_i^{(m+1)} - n_i^{(m)}|/|n_i^{(i+1)}|) < 10^{-5}$ en la norma de Frobenious.
- [154] Y. Chen, Z. D. Wang, F. C. Zhang, y C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **79**, 054512 (2009).
- [155] Y. Chen, Z. D. Wang, J.-X. Zhu, y C. S. Ting, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 217001 (2002).
- [156] B. M. Andersen y G. M. Bruun, *Phys. Rev. A* **76**, 041602(R) (2007).
- [157] V. Romero-Rochín, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 130601 (2005).
- [158] J. M. Kurdestany, R. V. Pai, y R. Pandit, *Ann. Phys. (Berlin)* **524**, 234 (2012).
- [159] R. V. Pai, J. M. Kurdestany, K. Sheshadri, y R. Pandit, *Phys. Rev. B* **85**, 214524 (2012).
- [160] I. B Mekhov y H. Ritsch, *Phys. Rev. A*, **80**, 013604 (2009).
- [161] C. Maschler, I. B. Mekhov, y H. Ritsch, *Eur. Phys. J D* **46(3)**, 545 (2008).
- [162] I. B. Mekhov, C. Maschler, y H. Ritsch, *Nature Physics* **3(5)**, 319 (2007).
- [163] I. B. Mekhov y H. Ritsch, *Phys. Rev. Lett.* **102** 020403 (2009).
- [164] I. B Mekhov. y H. Ritsch, *Laser Phys.* **20** 694 (2010).
- [165] I. B. Mekhov y H. Ritsch, *Laser Phys.* **21** 1486 (2011). I
- [166] I. B Mekhov y H. Helmut Ritsch, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 102001 (2012).
- [167] I. B. Mekhov, C. Maschler and H. Ritsch, *Phys. Rev. A* **76(5)**, 053618 (2007).
- [168] J. Gelhausen, M. Buchhold, A. Rosch, P. Strack, *SciPost Phys.* **1**, 004 (2016)
- [169] J. -S. Pan, X. -J. Liu, W. Zhang, W. Yi, y G. -C. Guo, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 045303 (2015).
- [170] A. Sheikhan, F. Brennecke, y C. Kollath, *Phys. Rev. A* **93**, 043609 (2016).
- [171] X. -W- Luo, Y. -N. Zhang, X. Zhou, G. -C. Guo, y Z. -W. Zhou, *Phys. Rev. A* **94**, 053809 (2016).

- [172] A. Sheikhan, F. Brennecke, y C. Kollath, *Phys. Rev. A* **94**, 061603(R) (2016)
- [173] F. Mivehvar, H. Ritsch, y F. Piazza, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 073602 (2017).
- [174] C. Kollath, A. Sheikhan, S. Wolff, y F. Brennecke, *Phys. Rev. Lett* **116**, 060401 (2016).
- [175] K. E. Ballantine, B. L. Lev, y J. Keeling, *Phys. Rev. Lett* **118**, 045302 (2017).
- [176] G. Morigi, J. Eschner, C. Cormick, Y. Lin, D. Leibfried, y D. J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 200502 (2015).
- [177] X. Guo, Z. Ren, G. Guo, y J. Peng, *Phys. Rev. A* **86**, 053605 (2012).
- [178] S. F. Caballero-Benitez, G. Mazzucchi, y Igor B. Mekhov, *Phys. Rev. A* **93**, 063632 (2016).
- [179] G. Mazzucchi, W. Kozlowski, S. F. Caballero-Benitez, T. J. Elliott, y I. B. Mekhov, *Phys. Rev. A* **93**, 023632 (2016).
- [180] S. F. Caballero-Benitez y I. B. Mekhov, *Phys. Rev. Lett.* **115(24)**, 243604 (2015).
- [181] S. F. Caballero-Benitez y I. B. Mekhov, *Phys. Rev. Lett.* **115** 243604 (2015).
- [182] S. F. Caballero-Benitez y I. B. Mekhov, *New J. Phys.* **17** 123023 (2015).
- [183] S. F. Caballero-Benitez, G. Mazzucchi , and I. B. Mekhov, *Phys. Rev. A* **93** 063632 (2016).
- [184] S. F. Caballero-Benitez, I. B. Mekhov, *New J. Phys.* **18**, 113010 (2016).
- [185] T. J. Elliott, W. Kozlowski, S. F. Caballero-Benitez, y I. B. Mekhov *Phys. Rev. Lett.* **114** 113604 (2015).
- [186] G. Mazzucchi, *PhD Thesis, Conditional Many-Body Dynamics and Quantum Control of Ultracold Fermions and Bosons in Optical Lattices Coupled to Quantized Light*, Oxford (2016).
- [187] C. N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).
- [188] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2144 (1989).
- [189] M. Pernici, *Europhys. Lett.* **12**, 75 (1990)
- [190] R. M. Fye, *Phys. Rev. B*, **46**, 1113 (1993)
- [191] H. Frahm and V. E Korepin, *Phys. Rev B* **42** 10553 (1990).
- [192] C. Yang, A. N. Kocharian, y Y. L. Chiang, *J. Phys. B* **12**, 7433 (2000).
- [193] A. Schadschneider, *Phys. Rev. B* **51**, 10386 (1995).

- [194] F. Marsiglio, *Phys Rev. B* **55**, 575 (1997).
- [195] L. Amico and A. Mastellone, *Phys. Rev B* **73**, 214513 (2006).
- [196] F. H. L. Essler, V. E. Korepin, y K. Schoutens, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2960 (1992).
- [197] F. H. L. Essler, V. E. Korepin, y K. Schoutens, *Phys. Rev. Lett.* **70** 73 (1993).
- [198] A. Tanaka, *J. Phys. A* **49** (2016) 415001 (2016).
- [199] M.Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), y U. Sen *Advances In Physics* **56** , 2 (2007).
- [200] R. Jördens, N. Strohmaier, K. Günter, H. Moritz, y T. Esslinger, *Nature* **455**, 204 (2008).
- [201] U. Schneider, L. Hackermüller, S. Will, T. Best, I. Bloch, T. A. Costi, R. W. Helmes, D. Rasch, y A. Rosch, *Science* **322**, 1520, (2008).
- [202] N. Strohmaier, Y. Takasu, K. Günter, R. Jördens, M. Köhl, H. Moritz, y T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 220601 (2007).
- [203] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, y T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 080403 (2005).
- [204] S. Ospelkaus, C. Ospelkaus, O. Wille, M. Succo, P. Ernst, K. Sengstock, y K. Bongs, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 180403 (2006).
- [205] T. Esslinger ,*Annual Review of Condensed Matter Physics* **1**, 129 (2010).
- [206] M. W. Zwierlein, A. Schirotzek, C. H. Schunck, y W. Ketterle, *Science* **311**, 5760 (2006).
- [207] R. Landig, L. Hruby, N. Dogra, M. Landini, R. Mottl, T. Donner, y T.Esslinger, *Nature* **532**, 476 (2015).