



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Sistemas espinoriales ultrafríos en redes ópticas
clásicas y cuánticas

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Física

PRESENTA:

Karen Lozano Méndez

TUTOR:

Dr. Santiago Francisco Caballero Benítez

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2019





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Hoja de Datos del jurado

1. Datos del alumno

Lozano
Méndez
Karen
55 45 60 01 03
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
414009073

2. Datos del tutor

Dr.
Santiago Francisco
Caballero
Benítez

3. Datos del sinodal 1

Dr.
José Ignacio
Jiménez
Mier y Terán

4. Datos del sinodal 2

Dr.
Jorge Gustavo
Hirsch
Ganievich

5. Datos del sinodal 3

Dra.
Rosario
Paredes
Gutiérrez

6. Datos del sinodal 4

Dr.
Víctor Manuel
Velázquez
Aguilar

7. Datos del trabajo escrito

Sistemas espinoriales ultrafríos en redes ópticas clásicas y cuánticas
54 p.
2019

Índice general

1. Introducción	1
2. Marco teórico	4
2.1. Modelo de Bose-Hubbard	4
2.1.1. Redes ópticas	4
2.1.2. Dispersión de átomos ultrafríos	5
2.1.3. Hamiltoniano de Bose-Hubbard	7
2.2. Modelo de Bose-Hubbard con Espín	9
2.2.1. Límite atómico	12
2.3. Modelo de Bose-Hubbard en una cavidad	13
2.3.1. Límite atómico	14
2.4. Transiciones de fase cuánticas	15
3. Herramientas de análisis	16
3.1. Aproximación de Bogoliubov	16
3.2. Aproximación de Desacoplamiento	20
3.3. Teoría de perturbaciones de segundo orden	21
3.4. Diagonalización Exacta	24
3.4.1. Generación de la base	25
3.4.2. Construcción de la matriz Hamiltoniana	26
3.4.3. Cantidades observables	28
3.5. Sistemas espinoriales	29
4. Resultados	30
4.1. Redes ópticas clásicas	30
4.1.1. Caso antiferromagnético	30
4.1.2. Caso ferromagnético	32
4.2. Redes ópticas cuánticas	34
4.2.1. Caso antiferromagnético	34
4.2.2. Caso ferromagnético	37
5. Conclusiones	40
A. Algunos desarrollos	42
A.1. Aproximación de Bogoliubov	42
A.1.1. Desarrollo 1	42
A.1.2. Fluctuaciones de orden 1	43
A.1.3. Determinación del Hamiltoniano Efectivo	44
A.1.4. Condición de los coeficientes	46

A.1.5. Relación de dispersión	46
---	----

Agradecimientos

En primer lugar, quisiera agradecer a mis padres, Rigel Méndez Aldama y Fidel Lozano López, porque de no ser por su esfuerzo y apoyo incondicional, no estaría llegando tan lejos. A mi hermano José Luis, quien siempre ha creído en mí. A mi abuelita Zenaida, por sentar las bases donde hemos crecido. Gracias por todo su amor y dedicación.

Agradezco especialmente al Dr. Santiago Caballero por sus ideas, paciencia y guía a través de este proyecto, además de su apoyo y consejos para mis planes académicos. A Alex Cásares, gracias por sus contribuciones al proyecto de investigación.

Agradezco al jurado que revisó este trabajo: el Dr. José Ignacio Jiménez Mier y Terán, el Dr. Jorge Gustavo Hirsch Ganievich, la Dra. Rosario Paredes Gutiérrez y el Dr. Víctor Manuel Velázquez Aguilar, por sus comentarios y observaciones.

A los compañeros que conocí en la facultad y que se convirtieron en mis amigos, gracias por la ayuda en clases y por haber hecho la carrera más llevadera y divertida: Frank, Santiago, Fany, Hodek, Benito, Jonathan A. y Erik. Particularmente a Chuy Torres, Artemio Padilla y Roberto Velázquez, por las aventuras que vivimos; a Moisés Jiménez, por su sinceridad y confianza; y a Edrick Solís, por todo su apoyo.

Quiero mencionar también a quienes siempre están conmigo, sin importar la situación. A mi mejor amigo Lalo y a mis amigos de toda la vida: Gaby, Adrián, Axa, Poncho y Andrea, gracias por todos los recuerdos y experiencias compartidas, que forman parte de lo que hoy soy.

Agradezco también el apoyo financiero de la DGAPA-UNAM como parte del proyecto PA-PIIT IN09619 y el proyecto CONACYT A1-S-30934 para la realización de esta tesis.

Finalmente, agradezco a la UNAM, por poner a mi alcance todas las herramientas y excelentes oportunidades en mi desarrollo personal y formación como física.

A José Luis Lozano Méndez,

Capítulo 1

Introducción

En el campo de la física cuántica de muchos cuerpos existe una larga lista de descubrimientos fundamentales que incluyen el estudio de nuevos estados de la materia, la observación de transiciones de fase jamás antes vistas y el descubrimiento de efectos macroscópicos que surgen desde la naturaleza cuántica de los átomos y determinan un comportamiento colectivo de los sistemas que puede observarse a simple vista. Un ejemplo de ello es la superfluidez en ^4He líquido a temperaturas menores a 2.17K, descubierta en 1938 por P. Kapitza, J. F. Allen y A. D. Misener [1] [2], donde el líquido puede fluir sin resistencia, es decir tiene viscosidad nula, y además presenta vórtices cuantizados. En ese tiempo encontrar una teoría que pudiera describir acertadamente este fenómeno cuántico colectivo fue una tarea difícil. Ya que se trata de un líquido, los átomos interactúan fuertemente y determinar el estado interno del helio es bastante complicado.

Sin embargo, el problema teórico de un gas de bosones enfriado a temperatura cero fue resuelto antes del descubrimiento del helio superfluido. En los primeros años de la década de 1920 Satyendra Bose introdujo una manera diferente de contar microestados en física estadística y derivó la ley de Planck para el espectro de energías de la radiación de cuerpo negro [3]. Albert Einstein extendió sus ideas en 1924 resultando en la distribución de Bose-Einstein, que describe la estadística de partículas idénticas con espín entero, ahora llamados bosones. Los bosones incluyen, por ejemplo, a los fotones y a los átomos de ^4He . Éstos pueden compartir un mismo estado cuántico en un sistema. Einstein propuso que si se enfriaban átomos bosónicos a una temperatura muy baja, una fracción macroscópica de ellos se condensaría en el estado cuántico más bajo accesible, resultando en un nuevo estado de la materia llamado condensado de Bose-Einstein o BEC por sus siglas en inglés. [4]. La temperatura crítica bajo la cual ocurre la condensación es [5]

$$T_c = \frac{2\pi}{\zeta(3/2)^{2/3}} \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{mk_B}, \quad (1.1)$$

donde n es la densidad de partículas, m la masa de cada bosón, \hbar la constante reducida de Planck, k_B la constante de Boltzmann y ζ la función zeta de Riemann; $\zeta(3/2) \approx 2.6124$.

En 1995 el primer condensado de Bose-Einstein fue realizado experimentalmente por los grupos de Eric Cornell y Carl Wieman [6] en un gas de átomos de ^{87}Rb enfriados a 170 nK. Poco después, Wolfgang Ketterle realizó un BEC en un gas de átomos de Na [7]. Por sus logros, Cornell, Wieman y Ketterle recibieron el Premio Nobel de Física en 2001. Estos primeros experimentos fundaron el campo de los átomos ultrafríos y marcaron el inicio de una era con nuevas posibilidades para el control de sistemas de muchos cuerpos y el estudio de los efectos cuánticos macroscópicos.

Actualmente existen varias direcciones en el estudio de los gases atómicos ultrafríos, en particular en este trabajo nos concentraremos en aquella asociada a la posibilidad de crear una onda estacionaria de luz usando haces de láser propagándose en direcciones opuestas, creando un

potencial periódico conocido como red óptica [8]. Las redes ópticas son muy interesantes por varias razones. Una de ellas es que pueden usarse para simular redes análogas a un cristal, lo que permite explorar aspectos de física de estado sólido en un ambiente altamente controlable con átomos ultrafríos. También pueden usarse para crear gases atómicos de dos o tres dimensiones. Estos gases presentan correlaciones fuertes y es interesante estudiar las diferencias entre una, dos y tres dimensiones.

Fueron Jaksch *et. al.* quienes propusieron en su artículo teórico de 1998 [9] la dinámica de un gas diluido de bosones ultrafríos confinados en una red óptica. El movimiento cuantizado de tales átomos está afectado por el potencial del sitio donde se encuentran y el tunelaje entre sitios vecinos, la gran ventaja es que los parámetros del sistema se encuentran completamente controlados por la configuración y parámetros de los láseres. La dinámica está descrita por el modelo de Bose-Hubbard [10], que predice una transición de fase a temperatura cero de superfluido (SF) a aislante de Mott (MI) dependiendo de la relación entre la interacción por sitio U y la probabilidad de tunelaje t . En una red óptica esta relación puede cambiarse variando la intensidad del láser: al aumentar la profundidad del potencial óptico la función de onda atómica se localiza más fuertemente y la interacción por sitio aumenta, al mismo tiempo la probabilidad de tunelaje se reduce. En la fase MI el número de ocupación por sitio es entero $n = 1, 2, \dots$, correspondiente a un llenado conmensurado de la red, y por lo tanto representa un *cristal óptico* con distanciamiento entre los átomos determinados por la onda estacionaria proporcionada por los láseres.

Para mantener el gas de átomos experimentalmente se utilizan trampas magnéticas [11] [12]. El desdoblamiento Zeeman de los niveles energéticos atómicos debido al campo magnético externo conduce a un potencial efectivo que sólo puede confinar átomos con estado hiperfino único. Esto significa que los átomos con momento angular total $\vec{F} = \vec{I} + \vec{L} + \vec{S}$ donde \vec{I} es el espín nuclear, \vec{L} es el momento angular orbital y \vec{S} es el momento angular de espín, están atrapados en un estado hiperfino congelado $|F, m_F\rangle$ [13]. Sin embargo, la invención de trampas puramente ópticas permitieron la realización de experimentos donde el espín es un grado de libertad adicional en el sistema. Sin campo magnético externo, cada estado base tiene $2F + 1$ proyecciones de espín, correspondientes al número cuántico magnético m_F . Además las interacciones entre partículas pueden depender del estado hiperfino completo. Usando átomos alcalinos como ^{23}Na y ^{87}Rb , que tienen espín nuclear $I = 3/2$ y un sólo electrón en el orbital s , pueden tenerse átomos en el estado $F = 1$, los cuales son el objeto de estudio en esta tesis.

Experimentos recientes [14], [15] buscan agregar a los sistemas nuevos tipos de interacción y potenciales externos. Un enfoque nuevo es el de las cavidades ópticas, que actúan como un potencial de largo alcance efectivo que actúa en todos los átomos del gas, porque cada átomo altera las propiedades de la luz y a su vez, la luz altera los estados atómicos.

En esta tesis se presentan algunos métodos de análisis para el Modelo de Bose-Hubbard sin espín tanto analíticos como numéricos. Después se extiende el estudio hacia el Modelo de Bose Hubbard para partículas de espín-1 y para sistemas dentro de una cavidad óptica. El objetivo es observar la transición de fase SF-MI en el caso ferromagnético y antiferromagnético y observar sus propiedades utilizando el método numérico de diagonalización exacta.

El trabajo se divide en cinco capítulos y un apéndice. El primer capítulo corresponde a la introducción que plantea el marco donde se inserta el problema, en el segundo capítulo se presentan las bases teóricas del problema que son la derivación del Modelo de Bose Hubbard sin espín a partir de las redes ópticas, su extensión para bosones de espín-1 y para sistemas en cavidades ópticas. En el capítulo tres se desarrollan dos métodos analíticos siguiendo la bibliografía [16] para analizar las transiciones de fase entre Superfluido y Aislante de Mott del Modelo de Bose Hubbard sin espín : la aproximación de Bogoliubov, que no predice ninguna transición como se esperaría, por lo que se recurre a la aproximación de Desacoplamiento y la teoría de perturbacio-

nes. Posteriormente se presenta el método de diagonalización exacta desde la generación de la base del espacio de Hilbert, la construcción de la matriz correspondiente a los Hamiltonianos, y las cantidades que pueden analizarse. Se extiende el uso de la aproximación de desacoplamiento y de la diagonalización exacta a sistemas de partículas bosónicas con espín 1. En el cuarto capítulo se presentan los resultados numéricos de la diagonalización exacta en sistemas espinoriales en redes ópticas clásicas y cuánticas en dos dimensiones, para el cual se calcularon los números de ocupación promedio por sitio y las fluctuaciones del número de ocupación. Los casos analizados son el ferromagnético y antiferromagnético, que dependen de los acoplamientos efectivos en el sistema.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Modelo de Bose-Hubbard

Comenzaremos por presentar los fundamentos teóricos y experimentales de los modelos de Bose-Hubbard que predicen transiciones de fase cuánticas. Se parte de las redes ópticas y el potencial periódico que forman, continuando con la dispersión de átomos en estas trampas y la derivación del modelo para bosones sin espín. Después se definen los modelos extendidos para partículas con espín-1 en redes ópticas y en cavidades de alta reflectancia.

2.1.1. Redes ópticas

Se le conoce como red óptica a una o más ondas estacionarias formadas por haces de luz láser que se propagan en direcciones contrarias. Estas ondas crean un potencial periódico donde se pueden atrapar átomos. Cada uno de ellos puede confinarse en un sitio individual de la red por lo tanto la interacción entre ellos puede controlarse [16].

Entonces, las redes ópticas pueden pensarse como un cristal artificial de luz. Por ejemplo, si dos láseres con la misma longitud de onda λ_x se propagan a lo largo del eje x de manera opuesta, éstos producirán una onda estacionaria y el patrón de interferencia resultante $I(x)$ tendrá periodicidad $\lambda_x/2$. El confinamiento de átomos neutros es posible gracias al cambio de energía inducido por la radiación en los niveles energéticos internos del átomo [17]. Para un electrón de un átomo en presencia de un campo eléctrico oscilante $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ de un láser el momento dipolar inducido es

$$\mathbf{d} = \alpha(\omega_L)\mathbf{E}, \quad (2.1)$$

donde ω_L es la frecuencia del láser, $\alpha(\omega_L)$ es la polarizabilidad atómica, es decir la respuesta del átomo al campo eléctrico aplicado. En el caso de un láser monocromático el campo es $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 2E_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_L t)$. La interacción entre un átomo neutro de dimensiones espaciales mucho menores a la longitud de onda de la luz se describe a través del Hamiltoniano [8]

$$\hat{H}_{int}(t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (2.2)$$

La corrección de la energía del estado base del átomo puede calcularse con teoría de perturbaciones y se encuentra que la primera contribución distinta de cero es [17]

$$\Delta E(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\alpha(\omega_L)\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t, \quad (2.3)$$

donde el promedio se hace sobre un periodo de oscilación del campo eléctrico. La polarizabilidad depende en general de la frecuencia y de las energías de los estados excitados no resonantes

del átomo. Para aquel estado que está más cerca de la resonancia que los otros, cuya energía es $E_e = \hbar\omega_e$, la polarizabilidad se vuelve inversamente proporcional a la frecuencia de desintonía $\Delta = \omega_L - (\omega_e - \omega_g)$ con ω_e la frecuencia de excitación y ω_g la frecuencia del estado base. En ese caso el cambio de energía es proporcional a la intensidad del haz del láser $I(\mathbf{r})$:

$$\Delta E(\mathbf{r}, t) \propto \frac{I(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}, \quad (2.4)$$

que puede interpretarse como un potencial efectivo $V_{\text{opt}}(\mathbf{r}) = \Delta E(\mathbf{r})$, debido al cual el átomo siente una fuerza

$$F_{\text{dipole}} = -\nabla V_{\text{opt}}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Esta fuerza atrae al átomo hacia las regiones de alta intensidad para $\Delta < 0$ o lo aleja para $\Delta > 0$. Por ejemplo, el caso más simple de una red unidimensional está dado por la superposición de dos láseres propagándose en direcciones opuestas. Suponiendo que la polarización de los láseres es lineal y que se propagan en dirección z , el campo eléctrico es

$$\begin{aligned} E_z(x, t) &= 2E_0 \cos(k_x x - \omega_L t) + 2E_0 \cos(-k_x x - \omega_L t) \\ &= 4E_0 \cos(k_x x) \cos(\omega_L t). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Entonces $\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t = 2E_0 \cos^2(k_x x)$ y por lo tanto el potencial óptico periódico es

$$V_{\text{opt}}(x) = V_{0,x} \cos^2(k_x x), \quad (2.7)$$

con V_0 la profundidad del potencial de la red que es proporcional a la intensidad de los láseres y $k_x = 2\pi/\lambda_x$, siendo λ_x la longitud de onda de la onda estacionaria formada. Es decir, se tiene un arreglo periódico de los mínimos de energía separados una distancia $a = \lambda_x$.

Así pueden formarse potenciales de dos dimensiones si se tienen dos pares de láseres que se propaguen en direcciones contrarias y del mismo modo, si se tienen tres pares el potencial formado es 3D, como se puede ver en la Figura 2.1.

2.1.2. Dispersión de átomos ultrafríos

Para describir las interacciones de dos cuerpos de átomos neutros se parte del modelo propuesto en [19] y tomado de [20], donde la atracción de van der Waals para largas distancias de interacción atómica se corta en r_c , que es de orden atómico. Esto resulta en un potencial con simetría esférica

$$V(r) = \begin{cases} -C_6/r^6 & \text{si } r > r_c \\ \infty & \text{si } r \leq r_c, \end{cases} \quad (2.8)$$

el cual no es una descripción realista para la interacción a corto alcance de átomos pero funciona para la dispersión a bajas energías. Notamos que el coeficiente de van der Waals C_6 , que no tiene unidades, fija el comportamiento asintótico y también define la longitud característica $a_c = (2M_r C_6 / \hbar^2)^{1/4}$, a la cual la energía cinética del movimiento relativo entre dos átomos de masa reducida M_r iguala a su energía de interacción. Para átomos alcalinos, esta longitud es generalmente del orden de nanómetros, lo cual es mucho más largo que la escala atómica r_c ya que estos átomos tienen un parámetro C_6 grande debido a su fuerte polarizabilidad. El pozo atractivo del potencial (2.8) permite entonces muchos estados ligados, por ejemplo para ^{87}Rb el número de estados es del orden de 100. De hecho, este número N_b está dado por la fase WKB

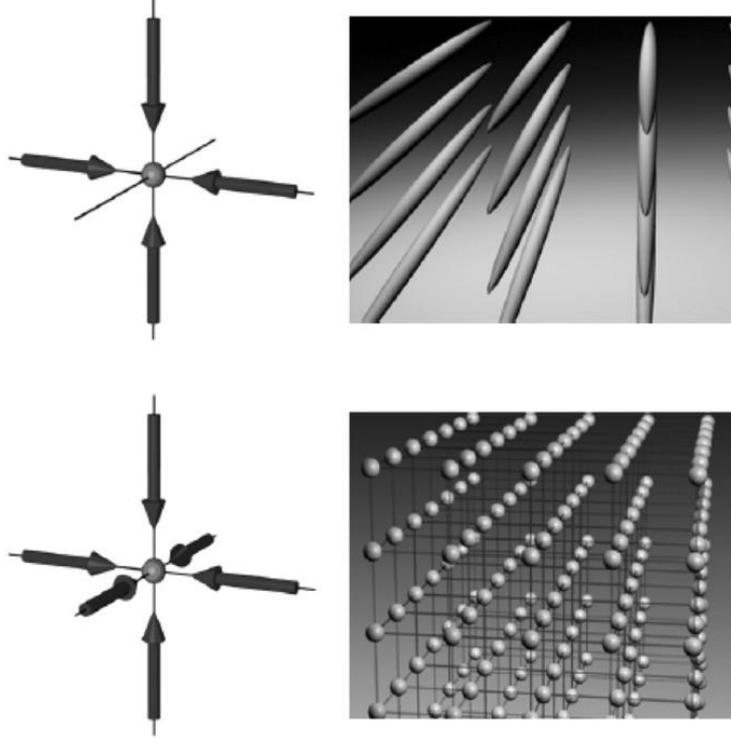


Figura 2.1: Potenciales ópticos. (a) Red cuadrada bidimensional; (b) Red cúbica tridimensional. Imagen tomada de Bloch [18].

para energía cero $\Phi = a_c^2/2r_c^2 \gg 1$ a través de la expresión $N_b = [\Phi/\pi + 1/8]$. Por otro lado, las propiedades de la dispersión dependen de la longitud a_c . Consideremos la dispersión en estados con momento angular $l = 0, 1, 2, \dots$ (para bosones idénticos sólo están permitidos los valores de l pares). El potencial efectivo para estados con $l \neq 0$ contiene una barrera centrífuga dada por el término $-l(l+1)/r^2$ que actúa como una fuerza repulsiva. Esta energía tiene una temperatura equivalente, que para l pequeño, es alrededor de 1mK. Para gases con temperatura debajo de los mK las colisiones de momento angular más bajo son predominantes, es decir de la onda- s . Esto define el régimen de átomos ultrafríos.

Consideremos un gas diluido de partículas neutras bosónicas a temperatura T debajo de la temperatura de degeneración. En un gas diluido la separación es del orden de 10^2 nm, lo cual es un orden de magnitud mayor que las longitudes asociadas a la interacción átomo-átomo. Es por eso que las interacciones de dos cuerpos dominan y las de tres o más cuerpos son muy improbables. Tomando en cuenta sólo dispersión elástica y a temperaturas lo suficientemente bajas, es decir $T \rightarrow 0$, las interacciones entre partículas están completamente determinadas por la dispersión de onda- s donde la longitud de dispersión está dada por

$$a_s = \bar{a} [1 - \tan(\Phi) - 3\pi/8], \quad (2.9)$$

donde Φ es la fase WKB y $\bar{a} = 0.478a_c$.

El pseudopotencial [20]

$$V(\mathbf{x}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{2M_r} \delta(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial r}(r\dots), \quad (2.10)$$

es útil para describir gases ultrafríos donde la longitud de dispersión se determina experimentalmente. La fuerza de las interacciones descritas por este potencial está dada por

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{2M_r}. \quad (2.11)$$

2.1.3. Hamiltoniano de Bose-Hubbard

Un gas de N partículas es descrito cuánticamente por la función de onda $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ a través de la ecuación de Schrödinger. Un condensado de Bose-Einstein es un gas de bosones que están en el mismo estado cuántico y por lo tanto puede ser descrito por la misma onda. La dinámica del condensado puede ser descrita a través de la ecuación de Gross-Pitaevskii [21]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) + g |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi_0(\mathbf{r}, t), \quad (2.12)$$

donde $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ es la función de onda del condensado, también llamado parámetro de orden, y g está dado por la expresión (2.11). $V(\mathbf{r}, t)$ es un potencial externo y el parámetro de orden está normalizado al número total de partículas, es decir $N = \int d^3r |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2$. La ecuación (2.12) es útil en el régimen donde hay coherencia completa. Modificando las condiciones en los experimentos es posible ir a regímenes donde las interacciones entre átomos son fuertes, existen rotaciones o potenciales de atrapamiento especiales. En estos casos la validez de la ecuación se limita.

En el formalismo de segunda cuantización un sistema de muchos cuerpos se describe utilizando los operadores de creación y aniquilación para bosones, $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ y $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ respectivamente, a través del Hamiltoniano

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) - \mu \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (2.13)$$

donde μ controla el número total de partículas ya que se trabaja en el conjunto gran canónico. Se hacen también las suposiciones de que el efecto del confinamiento armónico es constante en cada sitio de la red. Los operadores satisfacen las relaciones de conmutación para bosones

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] &= \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] &= [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Podemos escribir a los operadores de campo en la base de funciones de onda para una sola partícula $\{\Phi_n(\mathbf{r}_n)\}$, n un conjunto completo de números cuánticos. Entonces

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_n \Phi_n(\mathbf{r}) \hat{a}_n \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_n \Phi_n^*(\mathbf{r}) \hat{a}_n^\dagger, \end{aligned} \quad (2.15)$$

donde \hat{a}_n^\dagger y \hat{a}_n crean y aniquilan, respectivamente una partícula en el modo n

$$\begin{aligned} \hat{a}_n |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \hat{a}_n^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

y satisfacen también las relaciones de conmutación

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_n^\dagger] = 1. \quad (2.17)$$

El espectro de una partícula en un potencial periódico está caracterizado por bandas de energías permitidas y brechas de energía. Matemáticamente las funciones de onda de las partículas se describen usando funciones de Bloch $\Phi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ para el índice α de cada banda y el cuasi-momento $\hbar\mathbf{k}$. Las funciones de Bloch son periódicas y tienen el factor de fase $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ por lo que se extienden en toda la red. En el caso donde se busca describir a las partículas en sitios discretos se tiene como alternativa a las funciones de Wannier definidas como la transformada de Fourier de las funciones de Bloch

$$w_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Phi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

Las funciones de Wannier $w_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, donde \mathbf{R}_i es un vector de la red apuntando al sitio i , forman un conjunto completo ortonormal así que podemos reescribir los operadores (2.16) como

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha\mathbf{k}} \Phi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\alpha\mathbf{k}} = \sum_{\alpha,i} w_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{a}_{\alpha,i} \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha\mathbf{k}} \Phi_{\alpha\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{a}_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger = \sum_{\alpha,i} w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{a}_{\alpha,i}^\dagger. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Las funciones $w_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ se encuentran localizadas y centradas alrededor del sitio de la red \mathbf{R}_i . A bajas temperaturas las partículas no tienen suficiente energía para que haya una transición entre la primera banda de Bloch y el resto, por lo que el sistema se encuentra confinado en ella y consecuentemente puede omitirse el índice α en (2.19).

Sea $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = V_{\text{opt}}(\mathbf{r}) + V_{\text{ho}}(\mathbf{r})$, donde el primer término es la profundidad de la red óptica y el segundo contiene a las frecuencias de la trampa armónica. Si sustituye (2.19) en (2.13) se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int d^3r \left(\sum_i w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{a}_i^\dagger \right) & \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \left(\sum_k w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) \hat{a}_k^\dagger \right) \left(\sum_l w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \hat{a}_l \right) - \mu \right] * \\ & \left(\sum_j w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{a}_j \right). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Definiremos a las cantidades t_{ij} , U_{ijkl} y μ_{ij} al desarrollar los productos en (2.20). Para el término de energía cinética se tiene

$$\begin{aligned} & - \int d^3r \left(\sum_i w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{a}_i^\dagger \right) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{opt}}(\mathbf{r}) \right] \left(\sum_j w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{a}_j \right) \\ & = - \sum_{i,j} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \end{aligned}$$

mientras que en el término de la energía del potencial de interacción obtenemos

$$\int d^3r \frac{g}{2} \left(\sum_i w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{a}_i^\dagger \right) \left(\sum_k w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) \hat{a}_k^\dagger \right) \left(\sum_l w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \hat{a}_l \right) \left(\sum_j w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{a}_j \right) \\ = \sum_{i,k,l,j} U_{iklj} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j,$$

y para el término del potencial químico

$$\int d^3r \left(\sum_i w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{a}_i^\dagger \right) [\mu - V_{\text{ho}}(\mathbf{r})] \left(\sum_j w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{a}_j \right) \\ = \sum_{i,j} \mu_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j.$$

Por consiguiente, el Hamiltoniano (2.13) se convierte en

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_{i,k,l,j} U_{iklj} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j - \sum_{i,j} \mu_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (2.21)$$

En el término cinético las contribuciones dominantes vienen de los sitios vecinos más próximos $t_{\langle i,j \rangle}$ y de los elementos diagonales t_{ii} , pero estos se dejan de lado ya que su contribución por sitio es constante. Haciendo además la suposición de que el tunelaje es isotrópico entonces $t_{\langle i,j \rangle} = t$. Ya que las funciones de Wannier están bien localizadas, la contribución relevante de la repulsión en cada sitio es $U_{iiii} = U_0$. La repulsión entre vecinos más cercanos también es despreciable y para el potencial químico sólo se considera $\mu = \mu_{ii}$, que es la energía necesaria para agregar o quitar una partícula al sistema.

Tomando en cuenta todas las consideraciones mencionadas podemos reescribir al Hamiltoniano de Bose-Hubbard de la forma [10]

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \quad (2.22)$$

donde la primera suma se realiza sobre los vecinos más cercanos y $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$ es el número de ocupación en el sitio i . corresponden respectivamente a los operadores de creación y destrucción en el sitio i de la red. El parámetro t da la probabilidad para un átomo de cambiar de sitio a uno vecino por efecto túnel.

2.2. Modelo de Bose-Hubbard con Espín

La realización experimental de trampas ópticas en tres dimensiones que estudian las predicciones del modelo de Bose-Hubbard sin espín y el desarrollo tecnológico para el atrapamiento de átomos por medios puramente ópticos dan pie a que el interés por avanzar hacia el estudio de magnetismo cuántico en gases diluidos crezca. Los átomos alcalinos como ^{23}Na , ^{39}K y ^{87}Rb tienen espín hiperfino $F = 1$. En las trampas magnéticas convencionales, estos espines se encuentran *congelados* así que los átomos pueden ser tratados como bosones sin espín, sin embargo, en trampas puramente ópticas, los espines están libres y los condensados que se forman a bajas temperaturas tienen una naturaleza espinorial.

El estudio teórico de las propiedades de dichos sistemas parte de un Hamiltoniano efectivo a

bajas energías. No obstante, para observar las transiciones de fase se debe recurrir al modelo de Bose-Hubbard de espín-1, que se define como [22]

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,j}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}) + \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (2.23)$$

donde $\langle i, j \rangle, \sigma$ denota la suma sobre los vecinos más cercanos. $\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger, \hat{b}_{\sigma,i}$ son los operadores de creación y de aniquilación de un bosón en la banda de Bloch más baja localizado en el sitio i y en el estado $\sigma = m_F$, dado por el estado hiperfino del átomo F , $|F = 1, m_F = -1, 0, 1\rangle$. Además $\hat{n}_{\sigma,i} = \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}$. Por otro lado tenemos al operador de espín total en el sitio i

$$\hat{S}_i = \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \mathbf{F}_{\sigma, \sigma'} \hat{b}_{\sigma',i}, \quad (2.24)$$

en donde $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$ son las matrices de espín-1:

$$F_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad F_y = \frac{1}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad F_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Los operadores de creación y aniquilación tienen ahora una naturaleza espinorial y se definen como

$$\hat{b}_{\sigma i}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i}^\dagger \\ \hat{b}_{0i}^\dagger \\ \hat{b}_{-1i}^\dagger \end{pmatrix} \quad \hat{b}_{\sigma i} = \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i} \\ \hat{b}_{0i} \\ \hat{b}_{-1i} \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

por lo que las componentes del operador de espín \hat{S}_i resultan

$$\begin{aligned} \hat{S}_{ix} &= \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i}^\dagger & \hat{b}_{0i}^\dagger & \hat{b}_{-1i}^\dagger \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i} \\ \hat{b}_{0i} \\ \hat{b}_{-1i} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i}^\dagger & \hat{b}_{0i}^\dagger & \hat{b}_{-1i}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{0i} \\ \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{-1i} \\ \hat{b}_{0i} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right), \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_{iy} &= \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i}^\dagger & \hat{b}_{0i}^\dagger & \hat{b}_{-1i}^\dagger \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i} \\ \hat{b}_{0i} \\ \hat{b}_{-1i} \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\hat{b}_{1i}^\dagger & -\hat{b}_{0i}^\dagger & -\hat{b}_{-1i}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{0i} \\ -\hat{b}_{1i} + \hat{b}_{-1i} \\ -\hat{b}_{0i} \end{pmatrix} \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right), \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_{iz} &= \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i}^\dagger & \hat{b}_{0i}^\dagger & \hat{b}_{-1i}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i} \\ \hat{b}_{0i} \\ \hat{b}_{-1i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i}^\dagger & \hat{b}_{0i}^\dagger & \hat{b}_{-1i}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{1i} \\ 0 \\ -\hat{b}_{-1i} \end{pmatrix} \\ &= \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} = \hat{n}_{1i} - \hat{n}_{-1i}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Además la contribución de lo que se puede llamar el *momento local magnético* está dada por $\hat{S}_i^2 = \hat{S}_{ix}^2 + \hat{S}_{iy}^2 + \hat{S}_{iz}^2$ donde cada término es explícitamente:

$$\begin{aligned}\hat{S}_{ix}^2 &= \frac{1}{2} \left(\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right) \left(\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \right. \\ &\quad + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \\ &\quad \left. + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_{iy}^2 &= -\frac{1}{2} \left(-\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right) \left(-\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right) \\ &= -\frac{1}{2} \left(\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} - \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} - \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} - \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \right. \\ &\quad + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} - \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} - \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} - \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \\ &\quad \left. + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_{iz}^2 &= \left(\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \right) \left(\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \right) \\ &= \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} - \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \\ &= \hat{n}_{1i}^2 - 2\hat{n}_{1i}\hat{n}_{-1i} + \hat{n}_{-1i}^2.\end{aligned}$$

Al realizar la suma notamos que se eliminan los términos dentro de \hat{S}_{iy}^2 cuyo signo es distinto a aquellos en \hat{S}_{ix}^2 ,

$$\begin{aligned}\hat{S}_{ix}^2 + \hat{S}_{iy}^2 &= \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} + \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i} \\ &\quad + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{0i} + \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{-1i}\end{aligned}$$

Aplicando las reglas de conmutación $[\hat{b}_{i\alpha}, \hat{b}_{j\beta}^\dagger] = \delta_{i,j} \delta_{\alpha,\beta}$ y sustituyendo por operadores de número obtenemos:

$$\begin{aligned}\hat{S}_{ix}^2 + \hat{S}_{iy}^2 + \hat{S}_{iz}^2 &= \hat{n}_{1i}(1 + \hat{n}_{0i}) + 2\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i} + \hat{n}_{0i}(1 + \hat{n}_{1i}) + 2\hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{-1i} + \hat{n}_{0i}(1 + \hat{n}_{-1i}) \\ &\quad + \hat{n}_{-1i}(1 + \hat{n}_{0i}) + \hat{n}_{1i}^2 - 2\hat{n}_{1i}\hat{n}_{-1i} + \hat{n}_{-1i}^2 \\ &= \hat{n}_{1i} + \hat{n}_{1i}\hat{n}_{0i} + \hat{n}_{0i} + \hat{n}_{0i}\hat{n}_{1i} + \hat{n}_{0i} + \hat{n}_{0i}\hat{n}_{-1i} + \hat{n}_{-1i} + \hat{n}_{-1i}\hat{n}_{0i} \\ &\quad + \hat{n}_{1i}^2 - 2\hat{n}_{1i}\hat{n}_{-1i} + \hat{n}_{-1i}^2 + 2\hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{-1i} + 2\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i}\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\hat{S}_i^2 = \hat{n}_{1i} + 2\hat{n}_{0i} + \hat{n}_{-1i} + 2\hat{n}_{1i}\hat{n}_{0i} + 2\hat{n}_{-1i}\hat{n}_{0i} + \hat{n}_{1i}^2 - 2\hat{n}_{1i}\hat{n}_{-1i} + \hat{n}_{-1i}^2 + 2\hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{0i}^\dagger \hat{b}_{1i} \hat{b}_{-1i} + 2\hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{0i} \hat{b}_{0i} \quad (2.30)$$

Desarrollando ahora explícitamente el término del potencial óptico en (2.23) se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) &= \hat{n}_i^2 - \hat{n}_i = \left(\sum_{\sigma} \hat{n}_{\sigma i} \right)^2 - \sum_{\sigma} \hat{n}_{\sigma i} = (\hat{n}_{-1i} + \hat{n}_{0i} + \hat{n}_{1i})^2 - \hat{n}_{-1i} - \hat{n}_{0i} - \hat{n}_{1i} \\ &= \hat{n}_{-1i}^2 + \hat{n}_{0i}^2 + \hat{n}_{1i}^2 + 2\hat{n}_{-1i}\hat{n}_{0i} + 2\hat{n}_{-1i}\hat{n}_{1i} + 2\hat{n}_{0i}\hat{n}_{1i} - \hat{n}_{-1i} - \hat{n}_{0i} - \hat{n}_{1i}.\end{aligned}$$

2.2.1. Límite atómico

El Hamiltoniano de Bose-Hubbard tiene una representación matricial que ejemplificaremos a continuación para el límite atómico, que es aquél donde no hay tunelaje entre los sitios, es decir $t = 0$ en (2.23). Al no tener el término cinético el Hamiltoniano es de sitio y podemos deshacernos del subíndice i . La expresión se reduce a

$$\hat{H} = \frac{U_0}{2} \hat{n}(\hat{n} - 1) + \frac{U_2}{2} (\hat{\mathbf{S}}^2 - 2\hat{n}) - \mu \hat{n}. \quad (2.31)$$

Calcularemos los elementos de matriz para la base ordenada de proyección de espín y $n = 2$ partículas.

$$|m_{-\sigma} = 1, m_0 = 0, m_{\sigma} = 1\rangle$$

La base es

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |2\ 0\ 0\rangle \\ |\psi_2\rangle &= |1\ 1\ 0\rangle \\ |\psi_3\rangle &= |1\ 0\ 1\rangle \\ |\psi_4\rangle &= |0\ 2\ 0\rangle \\ |\psi_5\rangle &= |0\ 1\ 1\rangle \\ |\psi_6\rangle &= |0\ 0\ 2\rangle. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Para el primer término del Hamiltoniano tenemos que los elementos de matriz diferentes de cero se encuentran sólo en la diagonal y tienen valor $(n(n-1)) = 2$. Entonces

$$\langle \psi_m | \frac{U_0}{2} \hat{n}(\hat{n} - 1) | \psi_l \rangle = \frac{U_0}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Ahora para $\hat{\mathbf{S}}^2$

$$\langle \psi_m | \hat{\mathbf{S}}^2 | \psi_l \rangle = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix},$$

entonces

$$\langle \psi_m | \frac{U_2}{2} (\hat{\mathbf{S}}^2 - 2\hat{n}) | \psi_l \rangle = \frac{U_2}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\langle \psi_m | -\mu \hat{n} | \psi_l \rangle = -\mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto la representación matricial para $n = 2$ en el caso $t = 0$ es

$$\begin{pmatrix} U_0 + U_2 - 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_0 + U_2 - 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_0 - U_2 - 2\mu & U_2(\sqrt{2}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_2(\sqrt{2}) & U_0 - 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U_0 + U_2 - 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_0 + U_2 - 2\mu \end{pmatrix}.$$

Del mismo modo obtenemos la matriz para $n = 1$ donde la base es

$$|\psi_1\rangle = |1\ 0\ 0\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = |0\ 1\ 0\rangle$$

$$|\psi_3\rangle = |0\ 0\ 1\rangle$$

En este caso el término con la energía U_0 es la matriz cero ya que $n(n-1) = 0$. Además tenemos para \hat{S}^2

$$\langle \psi_m | \hat{S}^2 | \psi_l \rangle = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\langle \psi_m | \frac{U_2}{2} (\hat{S}^2 - 2\hat{n}) | \psi_l \rangle = \frac{U_2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La matriz completa para $n = 1$ es

$$\begin{pmatrix} -\mu & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 0 \\ 0 & 0 & -\mu \end{pmatrix}$$

Para $n = 0$ la matriz es trivialmente 0. Juntando los resultados anteriores tenemos la matriz por bloques del Hamiltoniano 2.31.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U_0 + U_2 - 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_0 + U_2 - 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_0 - U_2 - 2\mu & U_2(\sqrt{2}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_2(\sqrt{2}) & U_0 - 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_0 + U_2 - 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_0 + U_2 - 2\mu \end{pmatrix}$$

2.3. Modelo de Bose-Hubbard en una cavidad

Partiendo de los modelos propuestos por S. Caballero-Benítez *et al* en [23] y [24], proponemos un modelo de Bose Hubbard efectivo que describe las transiciones de fase de átomos bosónicos ultrafríos con espín-1 en una cavidad de alta reflectancia:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,j}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}) + \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{g_x}{N_s} \left(\sum_i \hat{S}_{xi} \right)^2. \quad (2.33)$$

2.3.1. Límite atómico

En el límite atómico donde no hay tunelaje de las partículas entre los sitios es más sencillo analizar analíticamente al estado base y su energía.

A través de la rotación de operadores de espín [25] $\hat{H} = U_y^\dagger \mathcal{H} U_y$, con $U_y = e^{\frac{3\pi i}{2}} S_y$, podemos analizar un modelo efectivo en la proyección S_z , en vez de usar S_x . Hacemos esto ya que facilita el análisis del estado base al ser S_z un operador diagonal. El Hamiltoniano se cambia entonces a

$$\mathcal{H} = \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{g_z}{N_s} \left(\sum_i \hat{S}_{zi} \right)^2, \quad (2.34)$$

donde el operador \hat{S}_{zi} está dado por

$$\hat{S}_{zi} = \hat{b}_{1i}^\dagger \hat{b}_{1i} - \hat{b}_{-1i}^\dagger \hat{b}_{-1i} = \hat{n}_{1i} - \hat{n}_{-1i}. \quad (2.35)$$

Un estado de la base para N partículas y N_s sitios se denota como

$$|\psi_j\rangle = |n_{+1,1} n_{0,1} n_{-1,1} n_{+1,2} n_{0,2} n_{-1,2} \dots n_{+1,N_s} n_{0,N_s} n_{-1,N_s}\rangle$$

donde $n_{\sigma,i}$ corresponde al número de partículas con proyección de espín $\sigma = \pm 1$ ó 0 en el sitio i . Aplicando el operador de número al cuadrado a un elemento de la base se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_i (\hat{n}_i)^2 |\psi_j\rangle &= \sum_i (\hat{n}_{+1,i} + \hat{n}_{0,i} + \hat{n}_{-1,i})^2 |\psi_j\rangle \\ &= \sum_i \left((\hat{n}_{+1,i})^2 + (\hat{n}_{0,i})^2 + (\hat{n}_{-1,i})^2 + 2\hat{n}_{+1,i}\hat{n}_{0,i} + 2\hat{n}_{+1,i}\hat{n}_{-1,i} + 2\hat{n}_{-1,i}\hat{n}_{0,i} \right) |\psi_j\rangle \end{aligned}$$

Al aplicar el segundo término del Hamiltoniano correspondiente al estado $|\psi_j\rangle$ se tiene que

$$\begin{aligned} \left(\sum_i \hat{S}_{zi} \right)^2 |\psi_j\rangle &= \left(\sum_i \hat{n}_{1,i} - \sum_i \hat{n}_{-1,i} \right)^2 |\psi_j\rangle \\ &= \left(\left(\sum_i \hat{n}_{1,i} \right)^2 - 2 \sum_i \hat{n}_{1,i} \sum_i \hat{n}_{-1,i} + \left(\sum_i \hat{n}_{-1,i} \right)^2 \right) |\psi_j\rangle \end{aligned}$$

Para el caso donde no existe tunelaje la representación matricial del Hamiltoniano es diagonal así que es fácil obtener el espectro de energías y el estado base.

Definiendo al escalar α como:

$$\alpha = \begin{cases} \left\lfloor \frac{N}{N_s} \right\rfloor + 1 & \text{si } N \neq N_s \\ \frac{N}{N_s} & \text{si } N = N_s \end{cases} \quad (2.36)$$

Se tienen dos funciones dependientes del número de partículas y del número de sitios que bastan para obtener el valor de la energía del estado base dependiendo del signo de g_z , para un potencial U_0 positivo.

$$f_1(N, N_s) = \frac{U_0}{2} \left(\alpha^2 (N - (\alpha - 1)N_s) + (\alpha - 1)^2 (\alpha N_s - N) \right) \quad (2.37)$$

$$f_2(N, N_s) = g_z \frac{N^2}{N_s} \quad (2.38)$$

La energía del estado base es:

$$E_0 = \begin{cases} f_1(N, N_s) & \text{si } g_z \geq 0 \\ f_1(N, N_s) + f_2(N, N_s) & \text{si } g_z < 0 \end{cases} \quad (2.39)$$

2.4. Transiciones de fase cuánticas

Si en un sistema a temperatura cero ocurren transiciones de fase debido a la variación de algún parámetro que no sea la temperatura, por ejemplo el potencial químico μ o la repulsión por sitio U_0 , entonces éstas son producidas por fluctuaciones cuánticas. De ahí el nombre *transiciones de fase cuánticas*.

Un condensado de Bose-Einstein en una red óptica a temperatura cero experimenta una transición de fase cuántica dependiendo de la proporción entre t y U_0 , conocida como la transición superfluido-aislante de Mott. Se dice que el gas está en el estado de aislante de Mott cuando existe un número de partículas conmensurado con los sitios de la red y $t \ll U_0$ y la fuerte interacción repulsiva entre ellas hace que sea energéticamente difícil para una partícula el moverse de un sitio a otro. Esto genera una penalización de energía para crear una excitación, y el sistema es incompresible. En el caso contrario, cuando $t \gg U_0$ las interacciones son despreciables y los átomos pueden moverse libremente sobre la red, minimizando su energía. El gas se condensa en el estado con mínimo momento de la banda de Bloch más baja y se vuelve superfluido.

Si el número de partículas no es conmensurado con el número de sitios, al agregar una partícula, ésta recibirá sólo una pequeña penalización cuando se mueva, pues su energía de interacción será la misma en cada sitio y no podrá ocupar ningún sitio libre. Por esto, el gas tendrá en promedio un número no entero de bosones en cada sitio y estará en estado superfluido.

Haciendo aproximaciones de campo medio al Hamiltoniano de Bose Hubbard puede describirse analíticamente la transición a temperatura cero del superfluido al aislante de Mott. El diagrama de fase correspondiente se muestra en la Figura 2.2[20]. Se muestran los lóbulos para la densidad de partículas entera $\langle \hat{n} \rangle = 1, 2, 3$ en las líneas rayadas en la punta de los lóbulos para un punto crítico de J/U (J corresponde a la probabilidad de tunelaje t de la ecuación (2.22)).

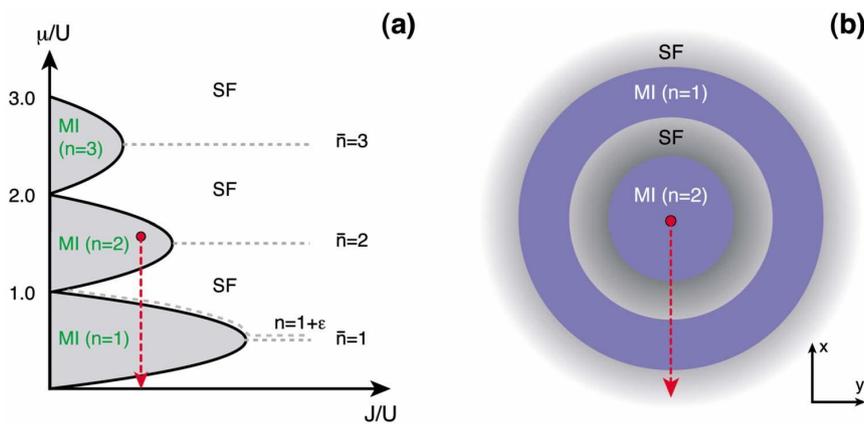


Figura 2.2: Diagrama de fase de temperatura cero para el Modelo de Bose Hubbard sin espín obtenido por teoría de campo medio (aproximación de desacoplamiento). (a) Los lóbulos corresponden a la fase de Aislante de Mott (MI), y el exterior es la fase superfluida (SF). (b) Estructura de "pastel de bodas" para las regiones SF-MI en una trampa armónica. Tomado de Bloch *et. al.* [20]

Capítulo 3

Herramientas de análisis

En este capítulo se discutirán herramientas teóricas y técnicas numéricas usadas para tratar sistemas de muchos cuerpos, en particular el modelo de Bose-Hubbard para partículas sin espín. Comenzaremos con el límite de interacción débil a través del enfoque de Bogoliubov, y después. También se discute la herramienta numérica de diagonalización exacta la cual se utilizó para resolver el modelo extendido de Bose-Hubbard para partículas de espín 1.

El punto de partida es el Hamiltoniano de Bose-Hubbard en el conjunto gran canónico, cuya expresión es 2.22. El potencial químico μ es fijo y determina el número promedio de bosones. La dificultad para resolver el Hamiltoniano proviene del término de tunelaje que acopla operadores bosónicos de diferentes sitios. Existen varios métodos para describir la física contenida en el modelo para diferentes regímenes de t/U [8].

3.1. Aproximación de Bogoliubov

Seguiremos el trabajo de van Oosten *et al* [16] para resolver el modelo de Bose-Hubbard y estudiar sus transiciones de fase cuánticas usando la aproximación de Bogoliubov.

En una red de dimensión d , espaciamiento a y N_s sitios tenemos que las interacciones entre átomos son despreciables cuando $t/U \rightarrow \infty$. El método consiste en transformar el Hamiltoniano al espacio de momentos, haciendo uso de los operadores de creación y aniquilación, $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$ y $\hat{a}_{\mathbf{k}}$, respectivamente. Entonces, para la coordenada r_i del sitio i en la red

$$\begin{aligned}\hat{b}_i &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \\ \hat{b}_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i},\end{aligned}\tag{3.1}$$

donde el vector de onda \mathbf{k} está discretizado sobre la primera zona de Brillouin. El número de partículas está dado por

$$N = \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}.\tag{3.2}$$

Demostración: Utilizando que $\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} = N_s \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ y sustituyendo en la primera igualdad de la ecuación (3.2) tenemos

$$\begin{aligned}
N &= \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \hat{a}_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} N_s \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Sustituyendo las relaciones (3.1) en el Hamiltoniano de Bose Hubbard (2.22) tal como se muestra en el apéndice, sección A.1.1, obtenemos la expresión

$$H = -t \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \sum_{m=1}^d 2 \cos k_m a + \frac{1}{2} \frac{U_0}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \hat{a}_{\mathbf{k}'''} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}', \mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} - \mu \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}, \tag{3.4}$$

donde se define

$$\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} = 2t \sum_{m=1}^d \cos(k_m a), \tag{3.5}$$

y por lo tanto

$$H = \sum_{\mathbf{k}} (-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \frac{U_0}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \hat{a}_{\mathbf{k}'''} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}', \mathbf{k}''+\mathbf{k}'''}. \tag{3.6}$$

En un gas condensado de Bose puede suponerse que el número de átomos condensados N_0 es mucho más grande que uno, entonces $N_0 = \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle = \langle \hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger - 1 \rangle \approx \langle \hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger \rangle$ y tomamos $N_0 = \langle \hat{a}_0 \rangle \langle \hat{a}_0^\dagger \rangle$, donde $\langle \hat{a}_0 \rangle$ y $\langle \hat{a}_0^\dagger \rangle$ son complejos conjugados. Escogiendo los valores esperados como reales se puede concluir que $\sqrt{N_0} = \langle \hat{a}_0^\dagger \rangle = \langle \hat{a}_0 \rangle$.

El método de Bogoliubov es una aproximación de campo medio que consiste en reemplazar a los operadores de creación y destrucción con su promedio más una fluctuación tal que,

$$\begin{aligned}
\hat{a}_0^\dagger &\rightarrow \sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger \\
\hat{a}_0 &\rightarrow \sqrt{N_0} + \hat{a}_0.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Además se minimiza la energía del gas con respecto al número de átomos condensados N_0 . Tomando los términos lineales se obtiene el Hamiltoniano con fluctuaciones de orden 1, que es: (ver desarrollo en el apéndice sección A.1.2)

$$H^{(1)} = (-\bar{\epsilon}_0 - \mu + \frac{U_0}{N_s} N_0) \sqrt{N_0} (\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0) \tag{3.8}$$

En el mínimo, la parte del Hamiltoniano que es lineal en fluctuaciones debe ser cero para todo \hat{a}_0^\dagger y \hat{a}_0 entonces,

$$-\bar{\epsilon}_0 - \mu + \frac{U_0}{N_s} N_0 = 0,$$

$$\mu = -(2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j a)) + U_0 n_0,$$

donde la densidad del condensado es $n_0 = \frac{N_0}{N_s}$. Además para momentos muy pequeños $k_j \rightarrow 0$ y $\sum_{j=1}^d \cos(0) = d$. Se concluye entonces que para la aproximación de menor orden:

$$\mu = U_0 n_0 - 2dt = U_0 n_0 - zt, \quad (3.9)$$

con $z = 2d$ el número de vecinos. El potencial químico es la energía necesaria para añadir una partícula al sistema, por lo que añadir una partícula incrementa la energía debido a la interacción con las n_0 partículas en cada sitios, y reduce lo correspondiente al posible tunelaje a uno de los z sitios vecinos.

El paso siguiente es determinar el Hamiltoniano efectivo H^{eff} , que contiene las fluctuaciones de orden cero y dos. Después de hacer álgebra, se obtiene (ver Apéndice, sección A.1.3):

$$H^{\text{eff}} = (-zt - \mu + \frac{1}{2}U_0 n_0)N_0 + \sum_{\mathbf{k}} (-\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}U_0 n_0 \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + 4\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger). \quad (3.10)$$

Esta expresión puede simplificarse utilizando el conmutador (2.17), sustituyendo (3.9) y escribiendo $\varepsilon_{\mathbf{k}} = zt - \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$, lo que finalmente resulta en:

$$H^{\text{eff}} = -\frac{1}{2}U_0 n_0 N_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{a}_{-\mathbf{k}}) \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 & U_0 n_0 \\ U_0 n_0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Para diagonalizar el término cuadrático en (3.11) se requiere de una transformación de Bogoliubov dada por:

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \\ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \equiv \mathbf{B} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

donde es necesario que los operadores sigan cumpliendo la relación de conmutación $[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger] = [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger] = 1$, por lo que se requiere que los coeficientes de la matriz \mathbf{B} obedezcan (ver Apéndice, sección A.1.4):

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (3.13)$$

Sustituyendo la ecuación (3.12) en (3.11) y si exigimos que el Hamiltoniano se reduzca a la forma diagonal

$$H^{\text{eff}} = -\frac{1}{2}U_0 n_0 N_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\hbar\omega_{\mathbf{k}} - (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0)] + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}, \quad (3.14)$$

debe cumplirse entonces que $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ sean soluciones de las siguientes ecuaciones,

$$[(u_{\mathbf{k}})^2 + (v_{\mathbf{k}})^2]U_0 n_0 - 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) = 0, \quad (3.15)$$

$$(|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2)(\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) - (u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*)U_0 n_0 = \hbar\omega_{\mathbf{k}}. \quad (3.16)$$

Utilizando la condición de normalización en (3.13) podemos encontrar la solución (ver Apéndice, sección A.1.5)

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + 2U_0 n_0)}. \quad (3.17)$$

La forma explícita de los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ es:

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = |u_{\mathbf{k}}|^2 - 1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1 \right) \quad (3.18)$$

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0}{\hbar \omega_{\mathbf{k}}} \right) + \frac{1}{2} \quad (3.19)$$

A partir de obtener el valor esperado de los operadores con el Hamiltoniano efectivo podemos calcular la densidad total, dada por:

$$n = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_{H^{\text{eff}}} \quad (3.20)$$

Para un gas condensado de Bose, la densidad consiste de dos partes: la primera es la densidad asociada a la ocupación macroscópica del estado base de una partícula (es decir, el condensado). La segunda parte es la densidad asociada a la ocupación de los estados excitados de una partícula (parte no condensada). En este caso, la primera parte corresponde al parámetro n_0 y la densidad de la parte no condensada se determina haciendo el promedio sobre las fluctuaciones cuadráticas, y es una función de n_0 . De la transformación de los operadores mostrada en la ecuación (3.12) se tiene

$$\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & -v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \\ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

de manera que la transformación inversa de los operadores es

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger &= -v_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Aprovechando la paridad de los operadores y de los coeficientes puede calcularse el valor esperado de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle &= \langle (-v_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger) (u_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger) \rangle \\ &= \langle -v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \\ &= \langle -v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \\ &= \langle v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} (\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + 1) + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle (|v_{\mathbf{k}}|^2 + |u_{\mathbf{k}}|^2) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + |v_{\mathbf{k}}|^2 \rangle \\ &= (|v_{\mathbf{k}}|^2 + |u_{\mathbf{k}}|^2) \langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle + |v_{\mathbf{k}}|^2, \end{aligned}$$

por lo tanto la densidad total es

$$n = n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[(|v_{\mathbf{k}}|^2 + |u_{\mathbf{k}}|^2) \langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle + |v_{\mathbf{k}}|^2 \right]. \quad (3.23)$$

La suma de los coeficientes la conocemos a partir de las ecuaciones (3.18) y (3.19) y además sustituimos $\langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle$ por la distribución de Bose evaluada en $\hbar \omega_{\mathbf{k}}$, es decir por $\frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\mathbf{k}}} - 1}$. Se encuentra entonces que la densidad es

$$n = n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0}{\hbar \omega_{\mathbf{k}}} \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\mathbf{k}}} - 1} + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 - \hbar \omega_{\mathbf{k}}}{2 \hbar \omega_{\mathbf{k}}} \right). \quad (3.24)$$

En el límite de temperatura cero, $\beta \rightarrow \infty$, así que el primer término de la suma es cero

$$n = n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 - \hbar \omega_{\mathbf{k}}}{2 \hbar \omega_{\mathbf{k}}},$$

después en el límite continuo, es decir donde la suma se cambia por una integral,

$$n = n_0 + \frac{1}{N_s} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{V}{(2\pi)^d} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 - \hbar \omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar \omega_{\mathbf{k}}} d\mathbf{k} = n_0 + \frac{1}{N_s} \frac{1}{2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{V}{(2\pi)^d} \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0}{\hbar \omega_{\mathbf{k}}} - 1 \right) d\mathbf{k}.$$

Haciendo cambio de variable de momentos \mathbf{k} a \mathbf{q} con

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a} \mathbf{q} \implies d\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^d d\mathbf{q},$$

y sustituyendo también $N_s = V/a^d$, la integral toma la forma de

$$n = n_0 + \frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} \frac{a^d}{V} \frac{V}{(2\pi)^d} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^d \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{q}} + U_0 n_0}{\hbar \omega_{\mathbf{q}}} - 1 \right) d\mathbf{q},$$

$$n = n_0 + \frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{q}} + U_0 n_0}{\hbar \omega_{\mathbf{q}}} - 1 \right) d\mathbf{q}. \quad (3.25)$$

El resultado de la integral numérica (3.25) se muestra en la Figura 3.1, donde se observa en (a) que para el caso bidimensional la diferencia entre el llenado entero $n=1.0$ y semientero $n=0.5$ es muy pequeña, aunque para el caso tridimensional (b) es un poco mayor. Sin embargo, en ambos casos notamos que no hay ningún valor del parámetro U/t para el cual se anule la fracción de condensado, lo que lleva a pensar que no hay transición a la fase aislante, aunque esto es incorrecto. La aproximación de Bogoliubov no presenta una transición de fase correcta por lo que hay que considerar una teoría de campo medio diferente que pueda representar un estado aislante inducido por las interacciones.

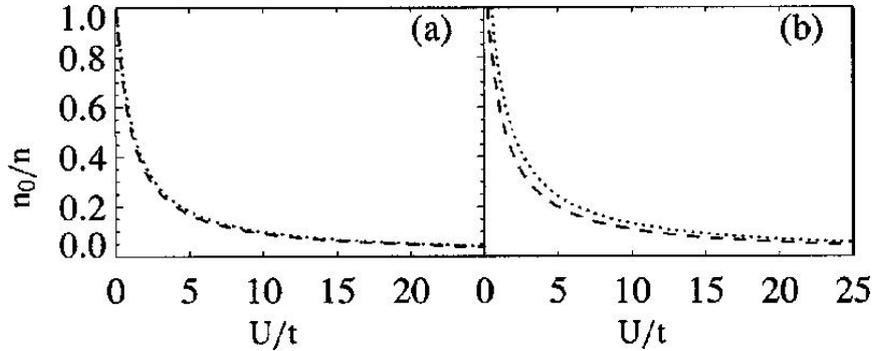


Figura 3.1: Fracción de condensado n_0/n en una (a) red bidimensional y en una (b) red tridimensional como función del parámetro U/t donde la línea rayada corresponde a $n=0.5$ y la punteada a $n=1.0$. Resultado tomado de van Oosten *et. al.* [16]

3.2. Aproximación de Desacoplamiento

Para describir la fase de aislante de Mott a través de una aproximación de campo medio, es necesario introducir un parámetro de orden de superfluido $\psi = \sqrt{n_i} = \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle = \langle \hat{b}_i \rangle$ donde n_i es el valor esperado del número de partículas en el sitio i . Los valores esperados también se consideran como reales. La teoría de campo medio se construye haciendo [16]

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j = \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle \hat{b}_j + \hat{b}_i^\dagger \langle \hat{b}_j \rangle - \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle \langle \hat{b}_j \rangle = \psi (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) - \psi^2. \quad (3.26)$$

Sustituyendo en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard (2.22) se obtiene

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\psi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) - \psi^2) + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i - \mu \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i. \quad (3.27)$$

Para un número de dimensiones d el número de vecinos más cercanos, o número de coordinación, es $2d = z$, así que desarrollando la suma en el primer término de 3.27 se obtiene:

$$\begin{aligned} & -t \sum_{\langle i,j \rangle} \psi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) + \sum_{\langle i,j \rangle} t \psi^2 = \sum_i 2d \psi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + \sum_i 2dt \psi^2 \\ & = -tz \psi \sum_i (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + zt \sum_i \psi^2 = -tz \psi \sum_i (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + zt N_s \psi^2, \end{aligned}$$

donde N_s es el número de sitios en la red. Por lo tanto,

$$H^{eff} = -zt \psi \sum_i (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + zt N_s \psi^2 + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i - \mu \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i. \quad (3.28)$$

Este Hamiltoniano es diagonal con respecto al índice de sitio i , por lo que podemos utilizar un Hamiltoniano efectivo de sitio. Sean $\bar{U} = \frac{U}{zt}$, $\bar{\mu} = \frac{\mu}{zt}$ y el operador de número $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$. Notamos que,

$$\hat{n}_i^2 - \hat{n}_i = \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) = (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i)^2 - \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i - \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i.$$

Pero,

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i = \hat{b}_i^\dagger (\hat{b}_i \hat{b}_i^\dagger - 1) \hat{b}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i - \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i,$$

entonces:

$$H^{eff} = -zt \psi \sum_i (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + zt N_s \psi^2 + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i.$$

Haciendo adimensional el Hamiltoniano dividiendo entre zt se obtiene:

$$H^{eff} = \frac{1}{2} \bar{U} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \bar{\mu} \sum_i \hat{n}_i - \psi \sum_i (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + \psi^2.$$

Este Hamiltoniano es válido en cada sitio y por eso podemos omitir el índice para tener el Hamiltoniano de sitio:

$$H^{eff} = \frac{1}{2} \bar{U} \hat{n} (\hat{n} - 1) - \bar{\mu} \hat{n} - \psi (\hat{b}^\dagger + \hat{b}) + \psi^2. \quad (3.29)$$

3.3. Teoría de perturbaciones de segundo orden

Escribiendo $H^{eff} = H^{(0)} + \psi V$ con

$$\begin{aligned} H^{(0)} &= \frac{1}{2} \bar{U} \hat{n} (\hat{n} - 1) - \bar{\mu} \hat{n} + \psi^2 \\ V &= -(\hat{b}^\dagger + \hat{b}), \end{aligned} \quad (3.30)$$

podemos notar que $E_n^{(0)} = \frac{1}{2} U n(n-1) - \mu n$, donde n es un número natural, es decir:

$$\begin{aligned}
 E_1^{(0)} &= -\bar{\mu} \\
 E_2^{(0)} &= \bar{U} - 2\bar{\mu} \\
 E_3^{(0)} &= 3\bar{U} - 3\bar{\mu} \\
 E_4^{(0)} &= 6\bar{U} - 4\bar{\mu} \\
 &\dots
 \end{aligned}$$

Ahora si graficamos las rectas con $x = \frac{\bar{\mu}}{\bar{U}}$, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 E_1^{(0)} &= -x \\
 E_2^{(0)} &= 1 - 2x \\
 E_3^{(0)} &= 3 - 3x \\
 E_4^{(0)} &= 6 - 4x \\
 &\dots
 \end{aligned}$$

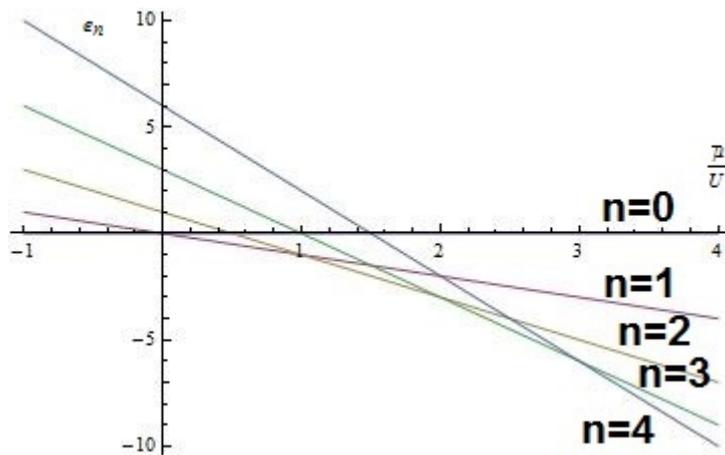


Figura 3.2: Energías para el estado base $E_n^{(0)} = \frac{1}{2}Un(n-1) - \mu n$

Observamos que el estado base sin perturbación depende del intervalo en que se encuentre la relación $\frac{\bar{\mu}}{\bar{U}}$, y su energía será:

$$E_g^{(0)} = \left\{ E_n^{(0)} \mid n = 0, 1, 2, \dots \right\}_{min}$$

Analizando los intervalos vemos que si $\bar{\mu} < 0 \implies E_g^{(0)} = 0$, si $0 < \bar{\mu} < \frac{\bar{\mu}}{\bar{U}} \implies E_g^{(0)} = -\frac{\bar{\mu}}{\bar{U}}$, si $\frac{\bar{\mu}}{\bar{U}} < \bar{\mu} < 2\frac{\bar{\mu}}{\bar{U}} \implies E_g^{(0)} = 1 - 2\frac{\bar{\mu}}{\bar{U}}$, etc. En general:

$$E_g^{(0)} = \begin{cases} 0 & \text{si } \bar{\mu} < 0 \\ \frac{1}{2}\bar{U}g(g-1) - \bar{\mu}g & \text{si } \bar{U}(g-1) < \bar{\mu} < \bar{U}g \end{cases} \quad (3.31)$$

Calcularemos ahora la corrección a segunda orden para la perturbación con la expresión

$$E_g^{(2)} = \psi^2 \sum_{n \neq g} \frac{|\langle g | V | n \rangle|^2}{E_g^{(0)} - E_n^{(0)}}, \quad (3.32)$$

donde $|n\rangle$ denota la función de onda sin perturbación con n partículas, y para la cual el estado base está dado por $n = g$. Como

$$\begin{aligned}\langle g | V | n \rangle &= \langle g | c^\dagger + c | n \rangle = \langle g | c^\dagger | n \rangle + \langle g | c | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle g | n+1 \rangle + \sqrt{n} \langle g | n-1 \rangle \\ &= \sqrt{n+1} \delta_{g,n+1} + \sqrt{n} \delta_{g,n-1},\end{aligned}$$

entonces

$$E_g^{(2)} = \sum_{n \neq g} \frac{(n+1) \delta_{g,n+1}}{E_g^{(0)} - E_n^{(0)}} + \frac{(n) \delta_{g,n-1}}{E_g^{(0)} - E_n^{(0)}}.$$

Evaluando el primer término de la suma en $n = g-1$ y el segundo en $n = g+1$ se obtiene:

$$E_g^{(2)} = \frac{(g)}{E_g^{(0)} - E_{g-1}^{(0)}} + \frac{(g+1)}{E_g^{(0)} - E_{g+1}^{(0)}},$$

donde

$$\begin{aligned}E_g^{(0)} - E_{g-1}^{(0)} &= \frac{1}{2} \bar{U} g(g-1) - \bar{\mu} g - \left(\frac{1}{2} \bar{U} (g-1)(g-2) - \bar{\mu} (g-1) \right) \\ &= \frac{1}{2} \bar{U} (g-1)(g-g+2) - \bar{\mu} (g-g+1) = \bar{U} (g-1) - \bar{\mu}.\end{aligned}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}E_g - E_{g-1} &= \frac{1}{2} \bar{U} g(g-1) - \bar{\mu} g - \left(\frac{1}{2} \bar{U} (g+1)(g) - \bar{\mu} (g+1) \right) = \frac{1}{2} \bar{U} g(g-1-g-1) - \bar{\mu} (g-g-1) \\ &= -\bar{U} g + \bar{\mu},\end{aligned}$$

por lo tanto,

$$E_g^{(2)} = \frac{g}{\bar{U}(g-1) - \bar{\mu}} + \frac{g+1}{-\bar{U}g + \bar{\mu}} \quad (3.33)$$

Si ahora escribimos a la energía del estado base como una expansión en ψ obtenemos:

$$E_g(\psi) = a_0(g, \bar{U}, \bar{\mu}) + a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu}) \psi^2 + O(\psi^4).$$

Esta función es cuadrática, es decir una parábola centrada en $\psi = 0$ y cuando $a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu}) > 0$ la función se minimiza para $\psi = 0$. Si $a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu}) < 0$ el valor que minimiza la función ya no es cero, $\psi \neq 0$. Esto significa físicamente que $a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu}) = 0$ marca la frontera entre las fases de superfluido y de aislante. Resolviendo para μ

$$a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu}) = E_g^{(2)} = \frac{g}{\bar{U}(g-1) - \bar{\mu}} + \frac{g+1}{-\bar{U}g + \bar{\mu}} + 1 = 0, \quad (3.34)$$

resulta que

$$\bar{\mu}_\pm = \frac{1}{2} (\bar{U}(2g-1) - 1) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\bar{U}^2 - 2\bar{U}(2g+1) + 1}. \quad (3.35)$$

La siguiente figura muestra una gráfica de la ecuación 3.35 para $g = 1, 2, 3$

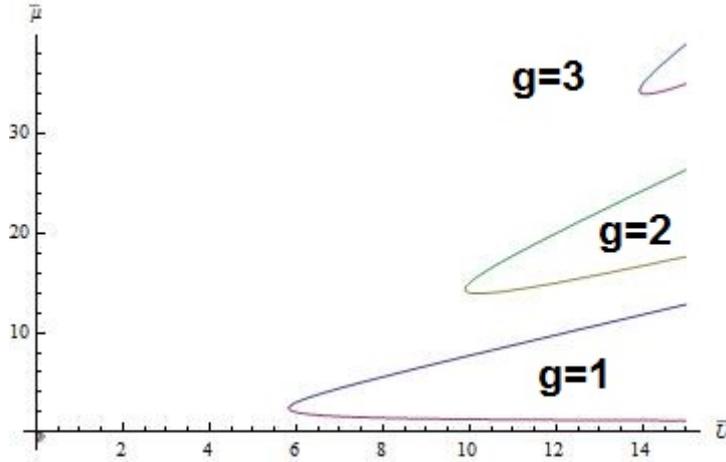


Figura 3.3: Diagrama de fase para el Hamiltoniano de Bose-Hubbard obtenido por teoría de perturbaciones. Los ejes son adimensionales

3.4. Diagonalización Exacta

La diagonalización exacta es un método numérico que ofrece un tratamiento a un problema físico de muchos cuerpos reduciéndolo a un problema matemático donde se expresa al Hamiltoniano en cierta base [26]. En esta tesis se utiliza el método para observar las transiciones de fase cuánticas del Modelo de Bose Hubbard extendido para átomos con espín $S = 1$ en redes ópticas clásicas y en una cavidad óptica como se expresó en (2.23). Para este problema de muchos cuerpos puede utilizarse la diagonalización exacta sólo para sistemas pequeños debido a la enorme dimensión del espacio de Hilbert, dada por

$$D(N, M) = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!}, \quad (3.36)$$

donde N es el número de átomos y M el número de sitios en la red. Para ilustrar las implicaciones de la ecuación 3.36 consideremos el caso donde $M = N$. Si $N = M = 8, 10,$ y 12 entonces $D(N, M) = 6432, 92378$ y 1352078 , respectivamente. Por lo tanto la diagonalización estándar donde todos los elementos de la matriz están guardados y no existen simetrías tiene problemas para $N = M > 8$ ya que los recursos de una computadora de escritorio son insuficientes.

El uso de la diagonalización exacta surge de la necesidad de optimizar el proceso para obtener valores y vectores propios de una matriz, en este caso de la representación matricial H de (2.22). Para reducir una matriz asociada a un espacio de Hilbert de dimensión D a la forma $U\Lambda U^\dagger$, donde Λ es una matriz diagonal real y U una matriz unitaria, el tiempo que una computadora de escritorio común se tomaría sería del orden de D^3 y el espacio en la memoria del orden D^2 . Así que para dimensiones superando, por ejemplo $D = 1,000,000$, el problema consume demasiados recursos. Sin embargo, físicamente no es necesario obtener todo el espectro de energías del Hamiltoniano, ya que sólo el estado base y algunos estados excitados de baja energía contribuyen significativamente a la termodinámica del sistema a bajas temperaturas.

El método de diagonalización exacta se basa en el algoritmo de Lanczos [27], que utiliza una relación de recurrencia de tres pasos para reducir una matriz simétrica H de tamaño $L \times L$. Dado un vector arbitrario inicial, llamado vector pivote \mathbf{v}_1 , y tomando \mathbf{v}_0 el algoritmo produce en L pasos una matriz ortogonal $V = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_L]$ y una matriz tridiagonal H_L tal que $HV = VH_L$. Los valores propios de H y H_L coinciden. En la nueva base H_L es tridiagonal y es fácilmente

diagonalizable. Además puede demostrarse que los valores propios de H_L se aproximan muy bien a los de H , con sólo $k \ll L$ iteraciones. La recurrencia de tres pasos es la siguiente [8]

$$\begin{aligned}
|w_l\rangle &= H|v_l\rangle - \beta_l|v_{l-1}\rangle, \\
\alpha_l &= \langle v_l|w_l\rangle, \\
|w_j\rangle &= |w_j\rangle - \alpha_l|v_l\rangle, \\
\beta_{l+1} &= \|w_j\| \sqrt{\langle w_j|w_j\rangle}, \\
|v_{l+1}\rangle &= |w_j\rangle / \beta_{l+1},
\end{aligned} \tag{3.37}$$

lo que lleva a la matriz

$$H_L = \begin{pmatrix}
\alpha_0 & \beta_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\
\beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\
0 & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\
\dots & & & & & & & & & \\
0 & 0 & 0 & & & 0 & \beta_{L-2} & \alpha_{L-2} & \beta_{L-1} & \\
0 & 0 & 0 & & & 0 & 0 & \beta_{L-1} & \alpha_{L-1} &
\end{pmatrix}$$

Convenientemente para nuestro problema, los valores y vectores que convergen primero son los extremos. En este trabajo se aplica el método de diagonalización exacta y al final se encuentra el estado base y algunos estados excitados utilizando la paquetería *Armadillo* para $C++$, la cual invoca al algoritmo de Lanczos a través de ARPACK.

El espacio de Hilbert correspondiente al problema central de este trabajo es de dimensión aún más grande, ya que cada átomo tiene 3 proyecciones de espín, lo que podemos interpretar como si hubiera $3M$ sitios en la red con N átomos. La dimensión se modifica entonces a

$$D = \frac{(N + 3 * M - 1)!}{N!(3 * M - 1)!}, \tag{3.38}$$

donde el factor de 3 que multiplica al número de sitios proviene de las tres componentes de espín que puede tener el átomo en cada sitio.

3.4.1. Generación de la base

Utilizando la notación $n_{\sigma,i}$ donde σ es la proyección de espín 1, 0 ó -1 e i es el i -ésimo sitio, definimos la base natural por el número de ocupación de partículas por sitio

$$\{ | n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, n_{1,2}, n_{0,2}, n_{-1,2}, \dots, n_{1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M} \rangle \},$$

a través de los operadores de número

$$\begin{aligned}
\hat{n}_{1,i} | n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, \dots, n_{1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M} \rangle &= n_{1,i} | n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, \dots, n_{1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M} \rangle \\
\hat{n}_{0,i} | n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, \dots, n_{1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M} \rangle &= n_{0,i} | n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, \dots, n_{1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M} \rangle \\
\hat{n}_{-1,i} | n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, \dots, n_{1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M} \rangle &= n_{-1,i} | n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, \dots, n_{-1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M} \rangle,
\end{aligned} \tag{3.39}$$

con $n_{\sigma,i} \geq 0$. Se trabaja en el espacio donde el número de partículas es fijo:

$$\sum_{\sigma,i}^M n_{\sigma,i} = N. \quad (3.40)$$

Es necesario enumerar todos los vectores de la base que satisfacen la restricción (3.40). Notemos que es posible ordenar todos los vectores de la base [26]. Para dos vectores diferentes $|n_1, n_2, \dots, n_{3M}\rangle$ y $|\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots, \bar{n}_{3M}\rangle$ debe existir cierto índice $1 \leq k \leq M-1$ tal que $n_i = \bar{n}_i$ y $n_k \neq \bar{n}_k$ para $1 \leq i \leq k-1$. Diremos entonces que $|n_1, n_2, \dots, n_{3M}\rangle$ es superior a $|\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots, \bar{n}_{3M}\rangle$ si $n_k > \bar{n}_k$. Esto define un orden sobre todos los vectores de la base, donde $|N, 0, \dots, 0\rangle$ es superior a todos y $|0, \dots, 0, N\rangle$ es inferior a todos.

Es posible generar todos los vectores de la base en orden descendente a partir del vector superior utilizando el siguiente algoritmo. Sea un vector $|n_1, n_2, \dots, n_{3M}\rangle$ con $n_M < N$, supongamos que $n_k \neq 0$ y $n_i = 0$ para todo $k+1 \leq i \leq M-1$ entonces puede construirse el siguiente vector $|\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots, \bar{n}_{3M}\rangle$ a partir de las reglas:

- $\bar{n}_i = n_i$ para $1 \leq i \leq k-1$;
- $\bar{n}_k = n_k - 1$;
- $\bar{n}_{k+1} = N - \sum_{i=1}^k \bar{n}_i$ y $\bar{n}_i = 0$ para $i \geq k+2$.

Las ventajas de este procedimiento son que se necesita un sólo ciclo para generar la base, y que cada vector puede guardarse en una matriz A de dimensiones $D \times M$. De esta forma en la fila v de la matriz A se encuentra el vector

$$|v\rangle = |n_{1,1}, n_{0,1}, n_{-1,1}, \dots, n_{1,M}, n_{0,M}, n_{-1,M}\rangle.$$

Un ejemplo de la configuración de vectores de la base para el sistema sencillo donde $M = 2$ y $N = 2$ que satisfacen la restricción (3.40) y generado con el algoritmo descrito anteriormente se muestra en la Tabla 3.1.

3.4.2. Construcción de la matriz Hamiltoniana

Para determinar la representación matricial H del Hamiltoniano de Bose Hubbard (2.22) en esta base es necesario calcular los elementos de matriz

$$H_{u,v} \equiv \langle u | \hat{H} | v \rangle. \quad (3.41)$$

Al determinar la matriz H notamos que es muy poco densa, es decir que hay a lo más $6M+1$ elementos distintos de cero por columna. Es importante no guardar todos los elementos en una matriz densa ya que cuesta memoria del orden de D^2 . Si se determinan las posiciones de los elementos distintos de cero y sus valores, entonces podemos guardarlos en una matriz tipo *sparse*, que sólo requiere memoria del orden de D .

Para determinar la matriz hay que tratar al Hamiltoniano por separado entre la parte que es diagonal y la que no lo es. Esto también es útil cuando queremos cambiar las cantidades U_0 , U_2 y t en los cálculos numéricos para estudiar las transiciones de fase. La parte más complicada es la no diagonal, es decir la del término de tunelaje. El método se basa en encontrar qué vector de la base $|v\rangle$ se conecta con otro vector $|u\rangle$ después de que los operadores $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ actúan sobre él. Sin embargo, lo que realmente importa es la posición de ambos vectores dentro de la base tabulada en la matriz A , más precisamente el número de la fila en la que se encuentran.

v	$n_{1,1}$	$n_{0,1}$	$n_{-1,1}$	$n_{1,2}$	$n_{0,2}$	$n_{-1,2}$
1	2	0	0	0	0	0
2	1	1	0	0	0	0
3	1	0	1	0	0	0
4	1	0	0	1	0	0
5	1	0	0	0	1	0
6	1	0	0	0	0	1
7	0	2	0	0	0	0
8	0	1	1	0	0	0
9	0	1	0	1	0	0
10	0	1	0	0	1	0
11	0	1	0	0	0	1
12	0	0	2	0	0	0
13	0	0	1	1	0	0
14	0	0	1	0	1	0
15	0	0	1	0	0	1
16	0	0	0	2	0	0
17	0	0	0	1	1	0
18	0	0	0	1	0	1
19	0	0	0	0	2	0
20	0	0	0	0	1	1
21	0	0	0	0	0	2

Cuadro 3.1: Vectores de la base para $N = 2$ partículas con tres proyecciones de espín y $M = 2$ sitios

Para evitar comparar elemento por elemento se recurre a la técnica de *hashing*, que consiste en asignar una etiqueta a cada vector a través de una función T

$$|x\rangle \rightarrow T(|x\rangle), \quad (3.42)$$

donde la etiqueta $T(|x\rangle)$ debe ser única para cada vector. En otras palabras, se construye un mapeo uno a uno entre las filas de A y un vector que contenga todas las etiquetas. La función utilizada es [26]

$$T(v) = \sum_{i=1}^M (\ln p_i) n_{vi}, \quad (3.43)$$

con $p_i = 100 * i + 3$.

Dado un vector de la base $|v\rangle$ podemos calcular su etiqueta de acuerdo con la ecuación (3.43) y buscarla entre el vector que contiene todas las etiquetas de la base para encontrar su posición v . Adicionalmente, si ordenamos las etiquetas de manera ascendente o descendente el número de pasos que tardará en encontrar su posición será a lo más $\log_2 D$ intentos gracias al método de bisección, que es una ventaja considerable a no ordenarlo, ya que tomaría en promedio $D/2$ intentos encontrar la etiqueta. Considerando que D puede ser del orden de 10^5 , entonces el número de intentos para encontrar la etiqueta en una base ordenada es aproximadamente 13.

Así que se ordena la base de acuerdo al valor de la etiqueta de cada vector y se guarda en una nueva matriz, que es a la que aplicaremos los operadores. Se determinan los elementos distintos a cero columna a columna. Es necesario tener una lista de índices de vecinos más cercanos para poder sumar o restar una partícula a la ocupación del sitio. Para un vector arbitrario $|v\rangle$, los

operadores de tunelaje actúan de la siguiente manera

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j |v\rangle = \sqrt{(n_i + 1)n_j} |\dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1\rangle. \quad (3.44)$$

Después de realizar la operación para todos los pares de índices $\{i, j\}$ de vecinos más cercanos, se calcula la etiqueta de todos los vectores y se busca en la lista de etiquetas ordenadas. Si se encuentra una coincidencia en la posición u , entonces sabremos que la entrada de la parte de la matriz Hamiltoniana correspondiente a la energía cinética (u, v) es distinta de cero y su valor es $\sqrt{(n_i + 1)n_j}$. De esta manera podemos guardar sólo la entrada y su valor en una matriz dispersa (*sparse*). Siguiendo la misma técnica calculamos también la parte no diagonal del operador S^2 (2.30).

Para las partes del Hamiltoniano correspondientes a los operadores de número las representaciones son diagonales así que basta hacer una suma por columnas de los sitios correspondientes y después transformar el vector resultante a una matriz dispersa diagonal. El Hamiltoniano completo (2.23) se obtiene sumando cada una de las partes y dejando los parámetros t, U_0, U_2 como variables.

3.4.3. Cantidades observables

Obteniendo el estado base $|\psi_0\rangle$ de la matriz Hamiltoniana pueden calcularse cantidades observables realizando el cálculo de valores de expectación. La cantidad observable más simple es el número de ocupación promedio del sitio i [28].

$$\langle \hat{n}_i \rangle = \langle \psi_0 | \hat{n}_i | \psi_0 \rangle. \quad (3.45)$$

Para una red translacionalmente invariante, el número de ocupación promedio es el mismo en todos los sitios e igual al factor de llenado N/N_s .

Sin embargo, la estructura del estado sí cambia dependiendo de los parámetros U_0 y t . Una cantidad que nos ayuda a estudiar estos cambios es la de las fluctuaciones alrededor del número de ocupación, dadas por

$$\Delta_i = \sqrt{\langle \psi_0 | \hat{n}_i^2 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \hat{n}_i | \psi_0 \rangle^2}. \quad (3.46)$$

El número de fluctuaciones es grande cuando $|\psi_0\rangle$ es una superposición de muchos estados $|n_1, \dots, n_M\rangle$ ya que diferentes números de ocupación existen en el sitio i . En cambio si el estado base es sólo un estado, las fluctuaciones son cero.

Además de las cantidades anteriores existe una más compleja que contiene información de las propiedades físicas del gas ultrafrío en la red. Para ayudarnos a definir a un condensado de Bose-Einstein a través del estado base de un sistema de muchos bosones interactuantes, consideramos la matriz de densidad de un cuerpo asociada a $|\psi_0\rangle$ [28]:

$$\rho_{ij}^{(1)} = \langle \psi_0 | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \psi_0 \rangle. \quad (3.47)$$

Los vectores propios de la matriz de densidad de un cuerpo describen los llamados orbitales naturales y sus valores propios a los números de ocupación. De acuerdo con Penrose y Onsager [29], un condensado de Bose-Einstein está presente si uno de los orbitales naturales está ocupado macroscópicamente. Eso significa que la proporción entre el número de ocupación y el número total de partículas es finito en el límite termodinámico, es decir cuando $N/N_s \rightarrow \infty$. Esta proporción es la fracción de condensado $f_c = N_c/N$. De la normalización de la matriz de densidad de un cuerpo tenemos que $\text{Tr} \rho_{ij}^{(1)} = N$ y para cualquier sistema existe un valor propio igual o mayor

al factor de llenado. Por lo tanto la fracción de condensado f_c siempre es mayor que $1/N_s$ y no se anula en sistemas finitos. Obtenemos la fracción de condensado calculando la proporción entre el valor propio más grande de (3.47) y el número de sitios de la red.

3.5. Sistemas espinoriales

Al extender el Modelo de Bose-Hubbard a partículas de espín-1 es necesario modificar también las herramientas para su análisis. Discutiremos en particular la aproximación de desacoplamiento y la diagonalización exacta.

La teoría de campo medio para bosones con espín a temperatura cero busca obtener el diagrama de fase y observar la transición de fase Superfluido-Aislante de Mott. Además de ello, las fases superfluidas pueden ser ferromagnéticas o antiferromagnéticas, dependiendo de cómo la interacción de espín favorece o desfavorece la formación de singletes. Partiendo del modelo de Bose Hubbard para espín-1 (2.23) se desacopla el término de tunelaje para obtener un modelo efectivo por sitio y después resolverlo de manera autoconsistente. Utilizamos la aproximación [22]:

$$\left(\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger - \langle \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \rangle\right) \left(\hat{b}_{\sigma,j} - \langle \hat{b}_{\sigma,j} \rangle\right) \approx 0 \quad (3.48)$$

donde $\langle O \rangle$ denota el valor esperado del operador O . Despejando tenemos:

$$\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} \simeq \langle \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \rangle \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \langle \hat{b}_{\sigma,j} \rangle - \langle \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \rangle \langle \hat{b}_{\sigma,j} \rangle. \quad (3.49)$$

Para analizar las fases superfluidas se introduce un parámetro de orden superfluido

$$\psi_\sigma \equiv \langle \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \rangle \equiv \hat{b}_{\sigma,i}, \quad (3.50)$$

para $\sigma = 1, 0$, y -1 . Estos parámetros son reales ya que los estados de equilibrio tienen fases uniformes para una red óptica clásica. Dada la aproximación de desacoplamiento (3.49), el Hamiltoniano (2.23) puede escribirse como una suma de Hamiltonianos por sitio, que se denotan como H_i^{MF} , donde

$$H_i^{MF} = \frac{U_0}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{U_2}{2} (S_i^2 - 2\hat{n}_i) - \mu \hat{n}_i - \psi_\sigma (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger + \hat{b}_{\sigma,i}) + \sum_{\sigma} |\psi_\sigma|^2. \quad (3.51)$$

La escala de energía se escoge haciendo $zt = 1$, donde z es el número de vecinos más cercanos. En las fases superfluidas, al menos uno de los parámetros ψ_σ es distinto de cero. Los resultados obtenidos numéricamente de manera autoconsistente (Figura 3.4) muestran distintas fases de superfluido.

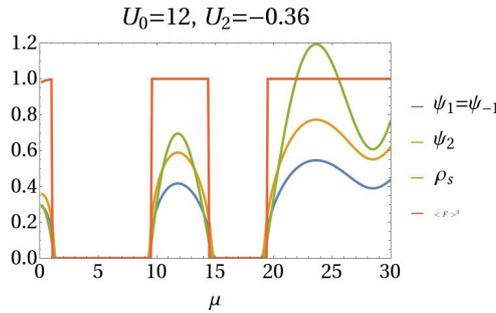


Figura 3.4: Valores de los parámetros superfluidos en la teoría de campo medio.

Capítulo 4

Resultados

4.1. Redes ópticas clásicas

Se realizó la simulación de un sistema de partículas con espín-1 en seis sitios para una red óptica bidimensional con dos filas y tres columnas. Para ello se utilizó la técnica de diagonalización exacta para el Hamiltoniano de Bose-Hubbard de espín-1 con número de partículas constante (ecuación (2.23)):

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,j}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}) + \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i). \quad (4.1)$$

La dimensión del espacio de Hilbert de acuerdo a la ecuación (3.38) es $D = 100,947$. Dada la naturaleza espinorial de los átomos, puede distinguirse en el sistema la configuración antiferromagnética y ferromagnética. El caso antiferromagnético corresponde a cuando el parámetro U_2 es positivo, y el ferromagnético cuando es negativo. En ambos casos se trabajó con una red con llenado conmensurado, con número de partículas N igual al número de sitios N_s y número promedio de partículas por sitio igual a uno.

4.1.1. Caso antiferromagnético

Los cálculos se realizaron para los parámetros $U_0 = 1$ y $U_2 = 0.3$, tomados de las referencias [30], [31] y [32]. Se realizaron las mediciones de los número de ocupación de componente por sitio $\langle \sum n_{\sigma,i} \rangle / N_s$ y las fluctuaciones $\Delta_{\sigma,i}$ alrededor de este número. De la Figura 4.1b vemos que la ocupación promedio de las tres componentes $\sigma = 1, 0, -1$ se mantiene igual al variar el parámetro t . Es decir, no existe ningún rompimiento de simetría de espín. De la Figura 4.1a vemos que las fluctuaciones totales alrededor del número de ocupación son análogas a las de un sistema no espinorial en una red óptica clásica. También se observa que la componente $\sigma = 0$ tiene fluctuaciones ligeramente mayores a las de $\sigma \pm 1$.

También se calculó la magnetización, que es

$$m_z = \sum_i \langle \psi_0 | \hat{S}_{z,i} | \psi_0 \rangle, \quad (4.2)$$

pero ya que en el caso antiferromagnético la magnetización se anula, como se ve en la Figura 4.2, se hizo también el cálculo elevando al cuadrado el operador \hat{S}_z , es decir $m_z^2 = \sum_i \langle \psi_0 | \hat{S}_{z,i}^2 | \psi_0 \rangle$. Se midió también el valor esperado del operador \hat{S}^2 , que está escrito con todos sus términos en la ecuación (2.30),

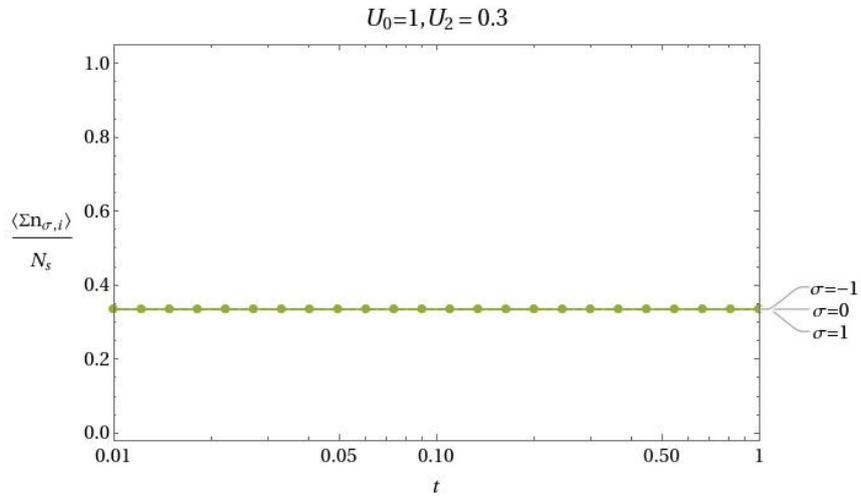
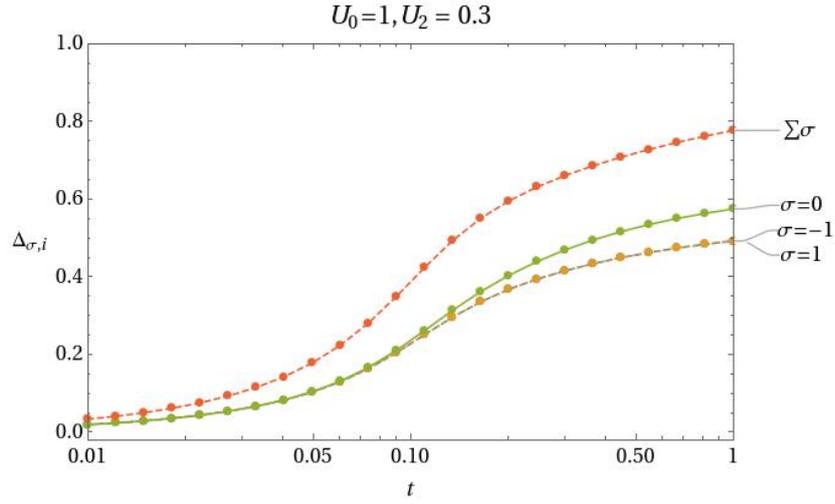


Figura 4.1: Cantidades observables en una simulación de 6 átomos en una red óptica clásica de 2 por 3 sitios para la configuración antiferromagnética $U_2 > 0$ y $\varepsilon < 0$.

$$\langle \hat{S}^2 \rangle = \sum_i \langle \psi_0 | \hat{S}_i^2 | \psi_0 \rangle, \quad (4.3)$$

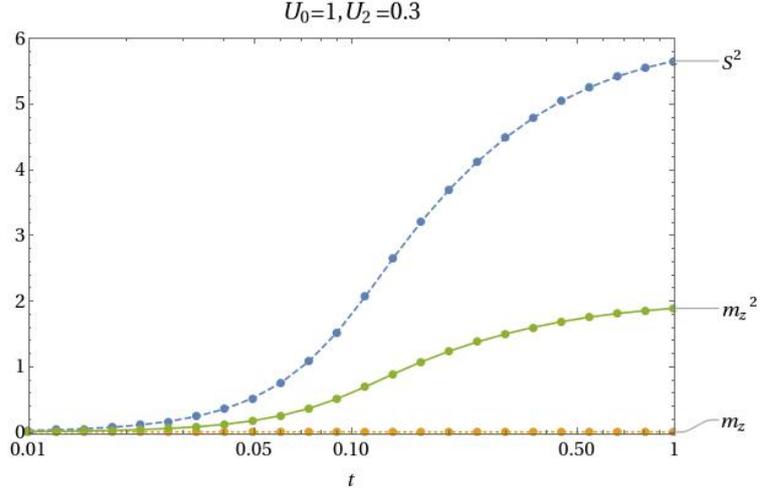


Figura 4.2: Valores esperados de S^2, m_z y m_z^2 , para un sistema espinorial de seis partículas en seis sitios en una red óptica clásica.

4.1.2. Caso ferromagnético

En el caso ferromagnético $U_2 < 0$ y se realizaron los cálculos numéricos utilizando los parámetros $U_0 = 1, U_2 = -0,03$, siguiendo a [30], [31], [32]. Ya que el estado base es altamente degenerado, se requiere agregar dos términos infinitesimales al Hamiltoniano (4.1) que rompan esta degeneración. El primero es $\varepsilon \sum_i \hat{n}_{0,i}$, con ε negativo y del orden de 10^{-4} . Este término maximiza la componente de espín $\sigma = 0$ en la fase de aislante de Mott. Adicionalmente tenemos el término $\varepsilon \sum_i \hat{S}_{zi}^2$, con ε positivo y del orden de 10^{-4} . Este término garantiza que las componentes $\sigma = \pm 1$ se mantengan iguales. Por lo tanto, el Hamiltoniano analizado es:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,j}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}) + \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i) - \varepsilon \sum_i \hat{n}_{0,i} + \varepsilon \sum_i \hat{S}_{zi}^2. \quad (4.4)$$

De manera congruente con [30], observamos de manera cualitativa en la Figura 4.4b que en la fase de Aislante de Mott la componente $\sigma = 0$ es máxima y en la fase superfluida ésta disminuye y la ocupación de $\sigma \pm 1$ crece, tendiendo a ser la mitad de la ocupación de $\sigma = 0$.

En cuanto a las cantidades medidas de $\langle \hat{S}^2 \rangle$, m_z y m_z^2 , mostradas en la Figura 4.3 también corroboramos los resultados de [30], vemos que $\langle \hat{S}^2 \rangle$ se maximiza y en el Aislante de Mott $\langle \hat{S}^2 \rangle = 8$.

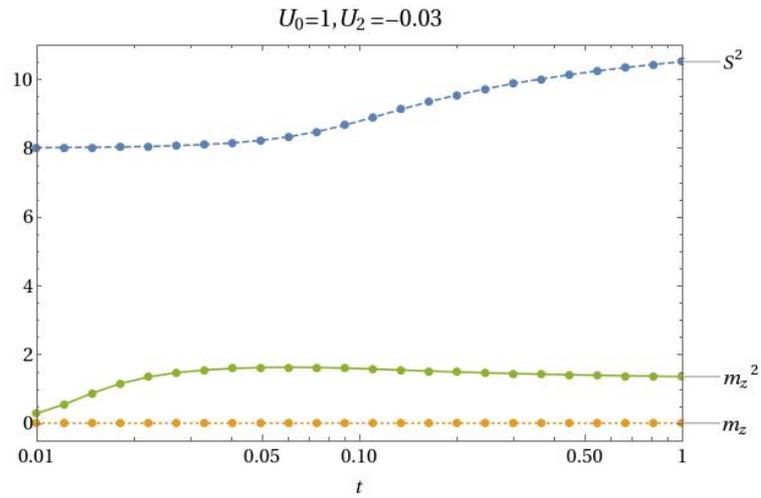
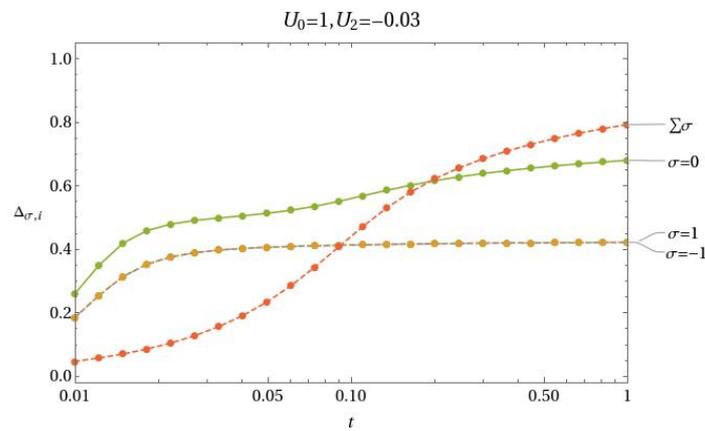
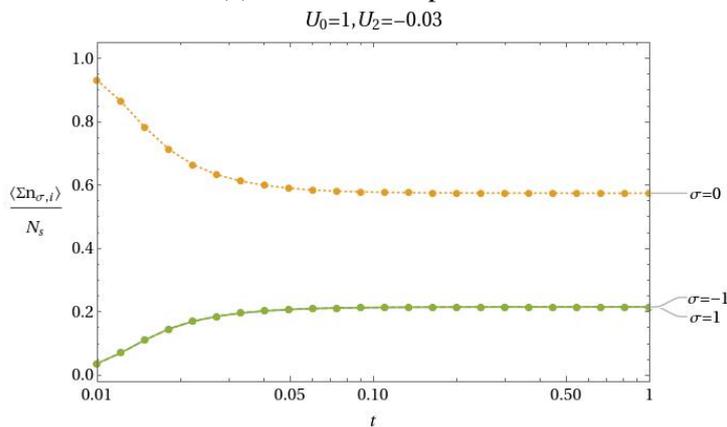


Figura 4.3: Valores esperados de S^2, m_z y m_z^2 , para un sistema espinorial de 4 partículas en 4 sitios en una red óptica clásica de dos dimensiones.



(a) Fluctuaciones por sitio



(b) Ocupación de cada componente de espín

Figura 4.4: Simulación de 4 átomos en una red óptica clásica de 2 por 2 sitios la configuración ferromagnética $U_0 < 0$.

4.2. Redes ópticas cuánticas

Partiendo del modelo efectivo para sistemas espinoriales ultrafríos dado por la ecuación (2.33) y que denotaremos como \hat{H} , que realiza mediciones para la proyección x , nosotros proponemos un modelo análogo en la proyección z , ya que la forma del operador S_z (ecuación (2.29)) permite analizar de manera más sencilla la estructura de los estados. El modelo se denota con \mathcal{H} y es

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,j}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}) + \frac{U_0}{2} \sum_i (\hat{n}_i)^2 + \frac{g_z}{N_s} \left(\sum_i \hat{S}_{zi} \right)^2, \quad (4.5)$$

y está relacionado con (2.33) a través de la rotación de operadores de espín $\hat{H} = U_y^\dagger \mathcal{H} U_y$, con $U_y = e^{\frac{3\pi i}{2}} S_y$.

Se realizó la construcción de la matriz Hamiltoniana de acuerdo al procedimiento descrito en el Capítulo 2 para realizar la diagonalización de ella. La dimensión del espacio de Hilbert de acuerdo a la ecuación (3.38) es $D = 100,947$. Se analizaron los casos antiferromagnético, donde $g_z > 0$, y ferromagnético donde $g_z < 0$.

4.2.1. Caso antiferromagnético

En el caso antiferromagnético del sistema agregamos un término infinitesimal al modelo (4.5) debido a que el estado base es degenerado y las mediciones numéricas fluctúan porque se escoge aleatoriamente uno de estos estados para realizar el cálculo de los valores esperados. El término infinitesimal agregado es $\varepsilon \sum_i \hat{n}_{0,i}$ y entonces el modelo efectivo es el siguiente

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,j}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}) + \frac{U_0}{2} \sum_i (\hat{n}_i)^2 + \frac{g_z}{N_s} \left(\sum_i \hat{S}_{zi} \right)^2 \pm \varepsilon \sum_i \hat{n}_{0,i}. \quad (4.6)$$

Los cálculos se realizaron para el parámetro $U_0 = 1$ y $g_z = 0,6$, además de analizar ε positiva y negativa. En ambos casos se midieron los número de ocupación de componente por sitio $\langle \sum_i n_{\sigma,i} \rangle / N_s$ y las fluctuaciones $\Delta_{\sigma,i}$ alrededor de este número.

En la Figura 4.5b se muestra como el número de ocupación promedio de las proyecciones de espín en el sistema para $\varepsilon < 0$. Observamos como la única componente ocupada es la de $\sigma = 0$ y se mantiene igual al variar el parámetro t , hasta que ocurre un rompimiento de simetría alrededor de $t = t_c \approx 0.2$ y las tres componentes colapsan a misma ocupación, donde naturalmente las tres son $\langle \sum_i n_{\sigma,i} \rangle / N_s = 1/3$. Las fluctuaciones alrededor de esta cantidad mostradas en la Figura 4.5a son congruentes con el número de ocupación. Para valores menores a $t = t_c \approx 0.2$, la única componente que contribuye al total de fluctuaciones, es decir la línea punteada roja, es la de las fluctuaciones en la componente $\sigma = 0$. Después del rompimiento de simetría, $t > t_c$ existe una contribución igual por parte de $\sigma = 1$ y $\sigma = -1$, lo que resulta en un cambio de concavidad en la curva de las fluctuaciones totales. Es entonces que las tres componentes contribuyen a las fluctuaciones de igual manera.

Fijándonos ahora en el caso $\varepsilon > 0$, notamos que no hay rompimiento de simetría pues las ocupaciones de componentes $\sigma = \pm$ en la Figura 4.7b se mantienen iguales al variar el parámetro t . Lo que ocurre en este caso es una inversión de la componente ocupada, esta vez son $\sigma = -1$ y $\sigma = 1$ quienes minimizan la energía del estado base y $\langle \sum_i n_{-1,i} \rangle / N_s = \langle \sum_i n_{1,i} \rangle / N_s = 0.5$. Cuando

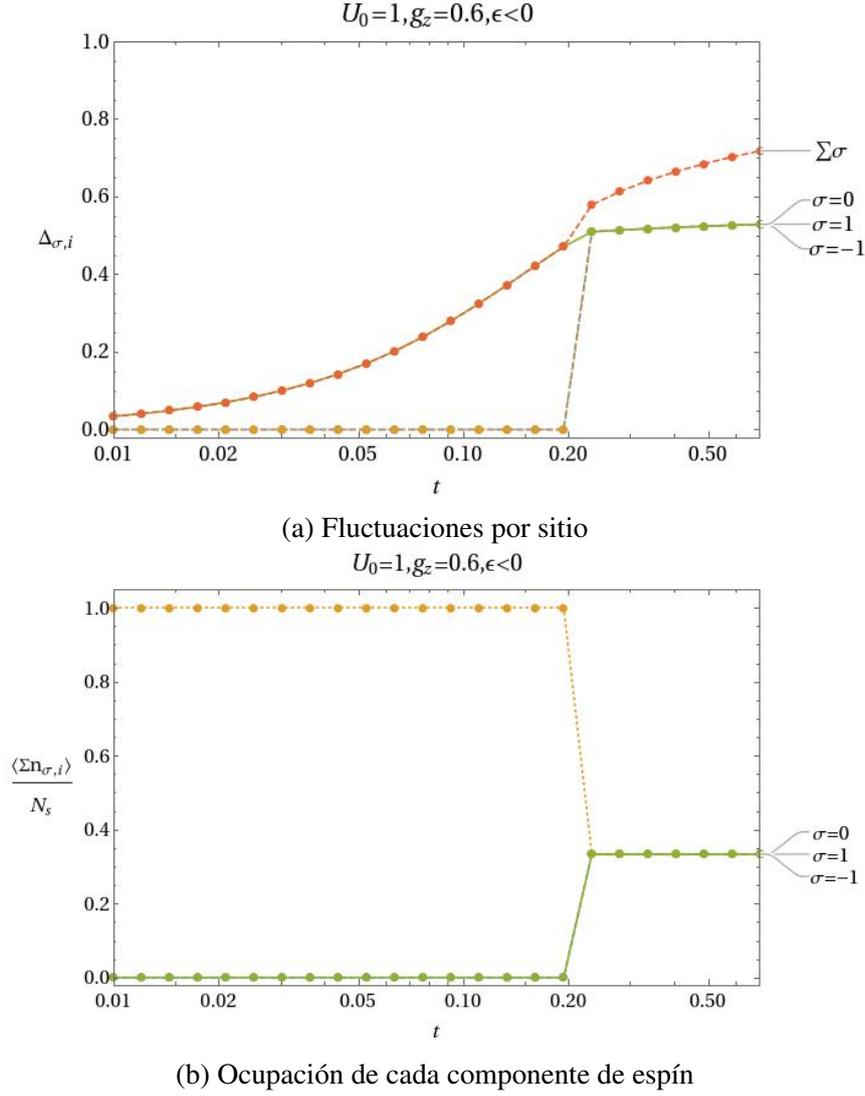


Figura 4.5: Cantidades observables en una simulación de 6 átomos en una red óptica de 2 por 3 sitios en una cavidad para la configuración antiferromagnética $g_z > 0$ y $\epsilon < 0$.

analizamos las fluctuaciones correspondientes a este caso en la Figura 4.7a, observamos que para $t < 0,2$ las fluctuaciones de las componentes $\sigma = -1$ y $\sigma = 1$, marcadas con la línea punteada amarilla, son mayores que las de la suma de las componentes, marcadas con la línea punteada roja. Ya que las fluctuaciones cuadradas alrededor de \hat{n} se definen como:

$$\Delta_{\sigma,i}^2 = 2\text{cov}(\hat{n}_{1,i}, \hat{n}_{-1,i}) + 2\text{cov}(\hat{n}_{0,i}, \hat{n}_{1,i}) + 2\text{cov}(\hat{n}_{0,i}, \hat{n}_{-1,i}) + \Delta_i(\hat{n}_{0,i})^2 + \Delta_i(\hat{n}_{1,i})^2 + \Delta_i(\hat{n}_{-1,i})^2, \quad (4.7)$$

donde la covarianza de dos operadores \hat{X} y \hat{Y} es $\text{cov} = \langle \hat{X}\hat{Y} \rangle - \langle \hat{X} \rangle \langle \hat{Y} \rangle$, encontramos que esto solo puede ser posible si las correlaciones entre las componentes $\sigma \pm 1$ son negativas, ya que $\text{cov}(\hat{n}_{0,i}, \hat{n}_{1,i}) = \text{cov}(\hat{n}_{0,i}, \hat{n}_{-1,i}) = 0$. El cálculo de estas correlaciones se muestra en la Figura 4.6. El hecho de que sean negativas nos indica que al variar la probabilidad de tunelaje t , una aumentará y la otra disminuirá instantáneamente. A esto se le conoce como un estado enredado, equivalente a decir que los estados que lo componen no pueden separarse [33].

Concluimos entonces que el efecto del término $\epsilon \sum_i \hat{S}_{zi}$ en las ocupaciones de las componentes de espín $\sigma = \pm 1$ es:

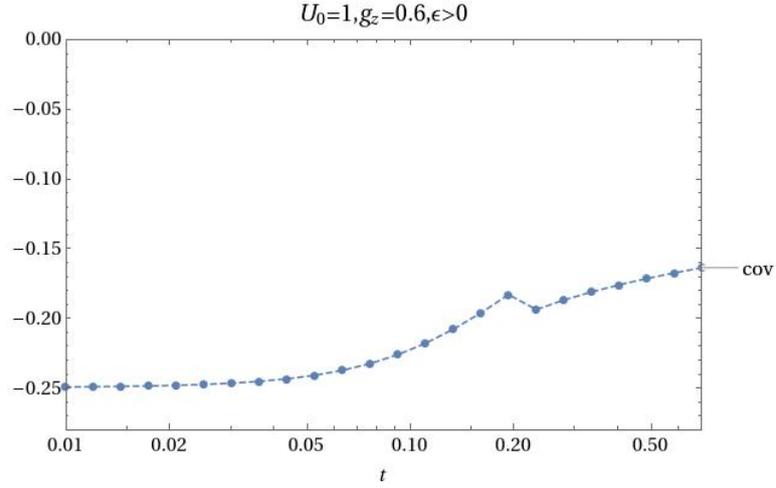
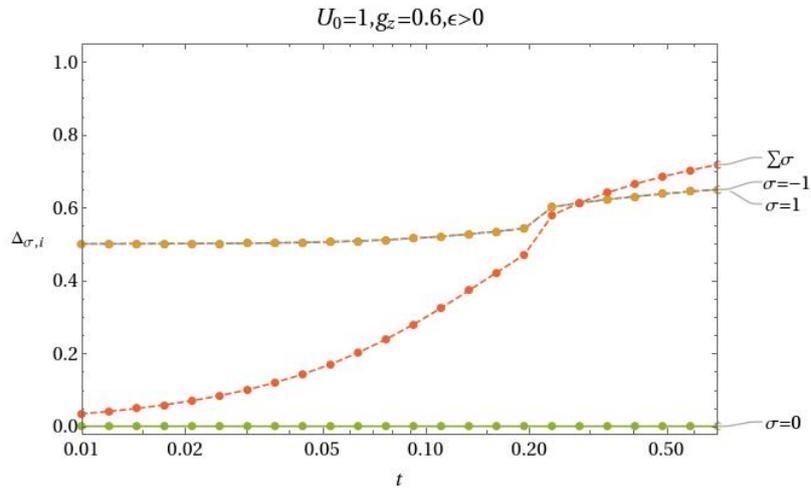
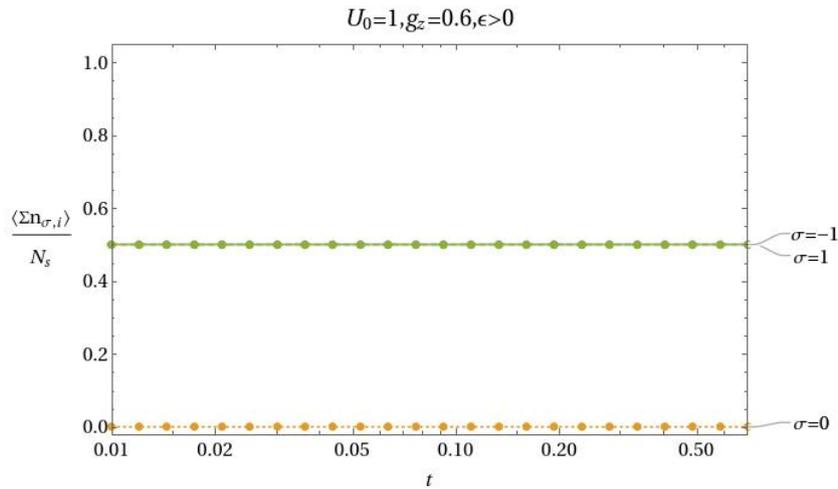


Figura 4.6: Correlaciones medidas entre las componentes $\sigma = 1$ y $\sigma = -1$ para el caso antiferromagnético con $\epsilon > 0$



(a) Fluctuaciones por sitio



(b) Ocupación de cada componente de espín

Figura 4.7: Simulación de 6 átomos en una red óptica de 2 por 3 sitios en una cavidad para la configuración antiferromagnética $g_z > 0$.

$$\begin{aligned} \varepsilon > 0 &\rightarrow \rho_1 = \rho_{-1} = 1/2 \\ \varepsilon < 0 &\rightarrow \begin{cases} \rho_1 = \rho_{-1} = 0 & \text{si } t \lesssim 0.2 \\ \rho_1 = \rho_{-1} = 1/3 & \text{si } t \gtrsim 0.2, \end{cases} \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde $\rho_{-1} = \frac{1}{N_s} \sum_i \langle \hat{n}_{-1,i} \rangle$ y $\rho_1 = \frac{1}{N_s} \sum_i \langle \hat{n}_{1,i} \rangle$.

4.2.2. Caso ferromagnético

Para el caso ferromagnético donde $g_z < 0$, el término que utilizamos para romper la degeneración del estado base es $\varepsilon \hat{S}_z$, así que el modelo efectivo es de la forma

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,j}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i}) + \frac{U_0}{2} \sum_i (\hat{n}_i)^2 + \frac{g_z}{N_s} \sum_i \hat{S}_{zi}^2 \pm \varepsilon \sum_i \hat{S}_{zi}. \quad (4.9)$$

Lo que obtuvimos en esta configuración fue que el sistema es equivalente a tener una sola componente de espín polarizada $\sigma \pm 1$. Si nos fijamos en la Figura 4.8b podemos ver que para $\varepsilon > 0$ la única componente ocupada es $\sigma = 1$ y así permanece para toda t . Las fluctuaciones correspondientes se muestran en la Figura 4.8a son congruentes a la afirmación anterior pues son iguales a las del modelo de Bose-Hubbard, y la única contribución es la de la componente ocupada $\sigma = 1$. Al cambiar el signo de ε lo que sucede es que la componente que se maximiza ahora es $\sigma = -1$, como podemos ver en las Figuras 4.9a y 4.9b, pero el sistema sigue siendo equivalente al de $\varepsilon > 0$.

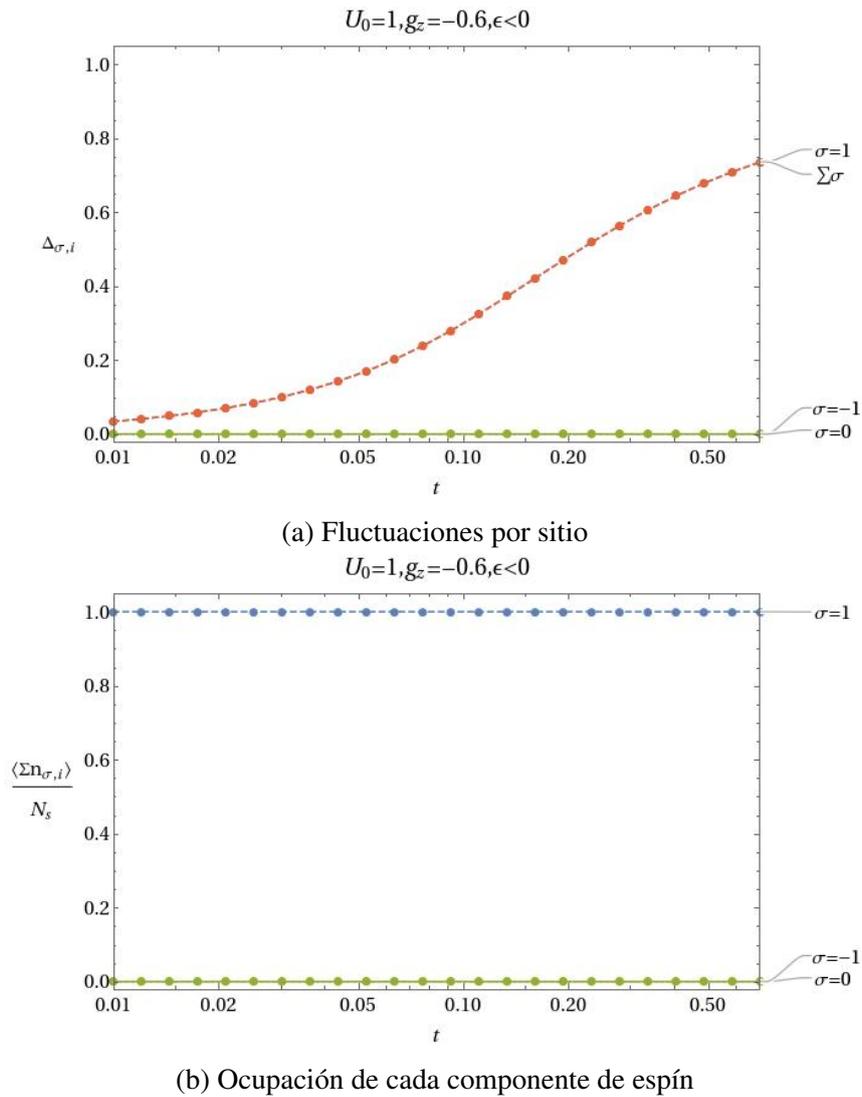


Figura 4.8: Simulación de 6 átomos en una red óptica de 2 por 3 sitios en una cavidad para la configuración ferromagnética $g_z < 0$.

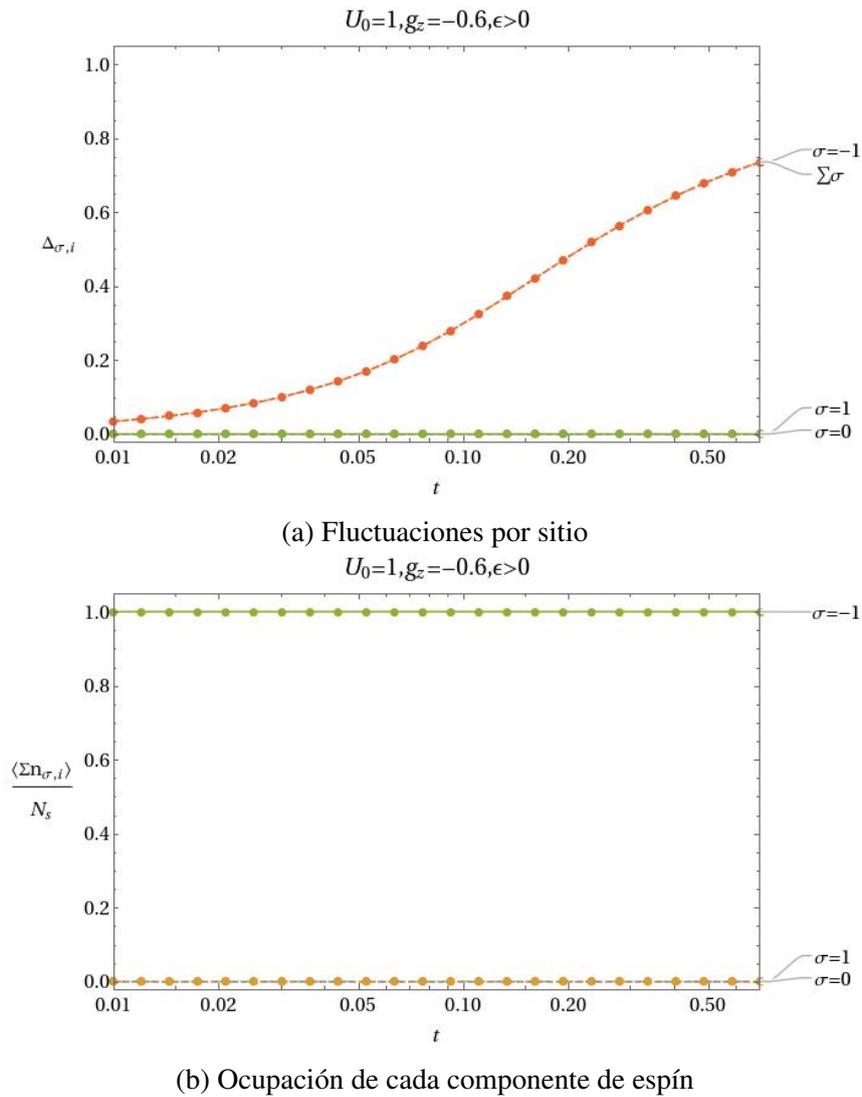


Figura 4.9: Simulación de 6 átomos en una red óptica de 2 por 3 sitios en una cavidad para la configuración antiferromagnética $g_z > 0$.

Capítulo 5

Conclusiones

Dado el interés en llevar los experimentos de gases atómicos ultrafríos a regímenes de nuevas interacciones y potenciales, se planteó un sistema espinorial en red óptica dentro de una cavidad óptica. El objetivo de este trabajo fue estudiar el Modelo de Bose Hubbard para átomos con espín total 1 y proyecciones de espín $m_F = -1, 0, 1$ en cavidades ópticas de alta reflectancia a través del método de diagonalización exacta para observar las propiedades de sus transiciones de fase. El problema se encuentra dentro del campo de estudio de gases atómicos ultrafríos en la física cuántica de muchos cuerpos.

Se derivó el Modelo de Bose - Hubbard para partículas sin espín partiendo de los principios físicos donde se aplica su estudio: los bosones en redes ópticas. Se presentó también el modelo extendido para bosones de espín-1 que se utiliza cuando las trampas que contienen los gases no tienen un campo magnético externo, es decir que son puramente ópticas. Se añadió finalmente el modelo que es el objeto de las simulaciones numéricas posteriores, un modelo efectivo para sistemas espinoriales dentro de una cavidad óptica.

Se realizó un repaso bibliográfico sobre las herramientas de análisis para el modelo de Bose-Hubbard sin espín que incluye a la aproximación de Bogoliubov, la aproximación de desacoplamiento, la teoría de perturbaciones de segundo orden y un método numérico, la diagonalización exacta. Posteriormente se indicó como puede extenderse el uso de la aproximación de desacoplamiento y la diagonalización exacta a sistemas espinoriales.

Los resultados comienzan mostrando cálculos numéricos de cantidades asociadas al Modelo de Bose-Hubbard para partículas de espín-1 en redes ópticas clásicas a través del método de diagonalización exacta. El sistema estudiado en el caso antiferromagnético es de seis partículas en seis sitios, mientras que en el caso ferromagnético la red fue de cuatro sitios con cuatro partículas. Se corroboraron los resultados de [30] y [31].

Como estudio principal de la tesis se realizó la simulación de un sistema de seis partículas en una red óptica de seis sitios en dos dimensiones. Siguiendo el procedimiento para realizar diagonalización exacta, se construyó la matriz Hamiltoniana asociada al modelo, donde el espacio de Hilbert es de dimensión $D = 100,947$ estados. Después de diagonalizar y encontrar el estado base se calcularon las cantidades de número de ocupación por componente en cada sitio y las fluctuaciones alrededor de ese número. Se encontró que para el sistema antiferromagnético existe una configuración que produce un cambio de simetría de espín al incrementar la probabilidad de tunelaje entre los sitios de la red. Existe otra configuración donde el estado base presenta anticorrelaciones entre sus componentes, lo que significa que es un estado enredado. Para el sistema ferromagnético se concluyó que su configuración es equivalente a la del modelo de Bose-Hubbard sin espín.

Como trabajo a futuro se pretende calcular más cantidades asociadas al sistema, como puede ser el grado de enredamiento. Además se pretende trabajar con sistemas más grandes, por ejemplo

de nueve partículas en nueve sitios, empleando técnicas para reducir el tamaño del espacio de Hilbert porque presenta un reto computacional diagonalizar una matriz tan grande.

Apéndice A

Algunos desarrollos

A.1. Aproximación de Bogoliubov

A.1.1. Desarrollo 1

Sustituyendo las relaciones (3.1) en el Hamiltoniano de Bose Hubbard (2.22) y suponiendo que tenemos una red cúbica con distancia de red a se obtiene

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j)} \\
 & + \frac{1}{N_s^2} \frac{1}{2} U_0 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \hat{a}_{\mathbf{k}'''} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i)} e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i)} e^{i(\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r}_i)} e^{i(\mathbf{k}''' \cdot \mathbf{r}_i)} \\
 & - \mu \sum_i \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \right)^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i)} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j)}. \tag{A.1}
 \end{aligned}$$

Desarrollaremos la suma sobre vecinos más cercanos $\sum_{\langle ij \rangle} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j)}$ para d dimensiones. Escribiéndola explícitamente y renombrando índices se tiene que

$$\begin{aligned}
 \sum_{\langle lj \rangle} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j)} = & \exp \left\{ \left(-i \left[\sum_{m=1}^d k_m \cdot a l - \sum_{m=1}^d k'_m \cdot a l - k'_1 a \right] \right) \right\} + \exp \left\{ \left(-i \left[\sum_{m=1}^d k_m \cdot a l - \sum_{m=1}^d k'_m \cdot a l + k'_1 a \right] \right) \right\} \\
 & + \exp \left\{ \left(-i \left[\sum_{m=1}^d k_m \cdot a l - \sum_{m=1}^d k'_m \cdot a l - k'_2 a \right] \right) \right\} + \exp \left\{ \left(-i \left[\sum_{m=1}^d k_m \cdot a l - \sum_{m=1}^d k'_m \cdot a l + k'_2 a \right] \right) \right\} \\
 & + \dots \\
 & + \exp \left\{ \left(-i \left[\sum_{m=1}^d k_m \cdot a l - \sum_{m=1}^d k'_m \cdot a l - k'_d a \right] \right) \right\} + \exp \left\{ \left(-i \left[\sum_{m=1}^d k_m \cdot a l - \sum_{m=1}^d k'_m \cdot a l + k'_d a \right] \right) \right\} \\
 = & \exp \left\{ \left(-i \left[\sum_{m=1}^d k_m \cdot a l - \sum_{m=1}^d k'_m \cdot a l \right] \right) \right\} \left(\sum_{m=1}^d \exp \{ (i [k'_m a]) \} + \sum_{m=1}^d \exp \{ (i [-k'_m a]) \} \right),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\langle l,j \rangle} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j)} &= \sum_i \exp\{(-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i)\} \left(\sum_{m=1}^d 2 \cos k_m a \right) \\ &= N_s \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left(\sum_{m=1}^d 2 \cos k_m a \right). \end{aligned}$$

Por lo tanto el primer término de la suma en el Hamiltoniano de la ecuación (A.1) es

$$\begin{aligned} -t \sum_{\langle l,j \rangle} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \frac{1}{\sqrt{N_s}} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} &= -t \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{1}{N_s} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \left(N_s \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sum_{m=1}^d 2 \cos k_m a \right) \\ &= -t \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \sum_{m=1}^d 2 \cos k_m a. \end{aligned}$$

En el segundo término de (A.1) se encuentra la siguiente suma

$$\sum_i e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i)} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i)} e^{i(\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}_i)} e^{i(\mathbf{k}'''\cdot\mathbf{r}_i)} = \sum_i e^{-i((\mathbf{k}+\mathbf{k}')-(\mathbf{k}''+\mathbf{k}''')\cdot\mathbf{r}_i)} = N_s \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''},$$

entonces dicho término es igual a

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_s^2} \frac{1}{2} U_0 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \hat{a}_{\mathbf{k}'''} N_s \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} \\ = \frac{1}{2} \frac{U_0}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \hat{a}_{\mathbf{k}'''} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''}. \end{aligned}$$

El último término del Hamiltoniano es simplemente

$$\begin{aligned} -\mu \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \right)^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} &= -\mu \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \right)^2 \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} N_s \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\ &= -\mu \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}, \end{aligned}$$

por lo tanto la expresión del Hamiltoniano (A.1) se reduce a la ecuación (3.4)

$$H = -t \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \sum_{m=1}^d 2 \cos k_m a + \frac{1}{2} \frac{U_0}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \hat{a}_{\mathbf{k}'''} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} - \mu \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A.2})$$

A.1.2. Fluctuaciones de orden 1

Haciendo la sustitución de los términos (3.12) en la expresión para el Hamiltoniano de Bose Hubbard (3.6) se tiene

$$\begin{aligned} H &= (-\bar{\epsilon}_0 - \mu)(\sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger)(\sqrt{N_0} + \hat{a}_0) + \frac{1}{2} \frac{U_0}{N_s} (\sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger)(\sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger)(\sqrt{N_0} + \hat{a}_0)(\sqrt{N_0} + \hat{a}_0) \\ &= (-\bar{\epsilon}_0 - \mu)(N_0 + \sqrt{N_0} \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0) + \frac{1}{2} \frac{U_0}{N_s} (N_0 + \sqrt{N_0} \hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0^\dagger \sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0)^* \\ &\quad (N_0 + \sqrt{N_0} \hat{a}_0 + \hat{a}_0 \sqrt{N_0} + \hat{a}_0 \hat{a}_0) \\ &= (-\bar{\epsilon}_0 - \mu)(N_0 + \sqrt{N_0} \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0) + \frac{1}{2} \frac{U_0}{N_s} (N_0 + 2\sqrt{N_0} \hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger)(N_0 + 2\sqrt{N_0} \hat{a}_0 + \hat{a}_0 \hat{a}_0). \end{aligned}$$

Desarrollando el último producto se obtiene

$$(N_0 + 2\sqrt{N_0}\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger)(N_0 + 2\sqrt{N_0}\hat{a}_0 + \hat{a}_0\hat{a}_0) = N_0^2 + \underline{2\hat{a}_0N_0^{3/2}} + N_0\hat{a}_0\hat{a}_0 + \underline{2N_0^{3/2}\hat{a}_0^\dagger} + 4N_0\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0 + 2\sqrt{N_0}\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_0 + N_0\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger + 2\hat{a}_0\sqrt{N_0}\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0\hat{a}_0, \quad (\text{A.3})$$

donde los términos subrayados corresponden a los términos lineales. En esta aproximación nos quedaremos sólo con ellos, es decir

$$H^{(1)} = (-\bar{\epsilon}_0 - \mu)\sqrt{N_0}(\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0) + \frac{1}{2}\frac{U_0}{N_s}2N_0^{3/2}(\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0),$$

por lo tanto el Hamiltoniano con fluctuaciones de orden 1 resulta en la expresión (3.8)

$$H^{(1)} = (-\bar{\epsilon}_0 - \mu + \frac{U_0}{N_s}N_0)\sqrt{N_0}(\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0). \quad (\text{A.4})$$

A.1.3. Determinación del Hamiltoniano Efectivo

El Hamiltoniano efectivo contiene las fluctuaciones de orden cero y orden dos. Para obtener el orden cero se sustituyen los operadores de creación y destrucción en el Hamiltoniano (3.6) por $\sqrt{N_0}$:

$$H^{(0)} = (-\bar{\epsilon}_0 - \mu)N_0 + \frac{1}{2}\frac{U_0}{N_s}N_0^2,$$

$$H^{(0)} = (-z\tau - \mu + \frac{1}{2}U_0n_0)N_0. \quad (\text{A.5})$$

Ahora, para obtener el orden dos se escriben todas las combinaciones en (3.6)

$$H^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} (-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu)\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\frac{U_0}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \left(\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}''}\hat{a}_{\mathbf{k}'''} + \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'''} \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} + \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'''} + \langle \hat{a}_{\mathbf{k}''}\hat{a}_{\mathbf{k}'''} \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} \right) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''},$$

y se sustituyen dos operadores a la vez por N_0 . Entonces el término que contiene las sumas es igual a

$$\frac{1}{2}\frac{U_0}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \left(N_0\hat{a}_{\mathbf{k}''}\hat{a}_{\mathbf{k}'''} + N_0\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}''} + N_0\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}'''} + N_0\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}'} \right) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''}. \quad (\text{A.6})$$

Las condiciones para que la Delta de Kroenecker no sea cero son

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{k}'' + \mathbf{k}''', \quad (\text{A.7})$$

lo cual implica que si tales condiciones son iguales a 0 entonces $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$ y $\mathbf{k}'' = -\mathbf{k}'''$. Aplicando estas condiciones al término (A.6) se obtiene

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}\frac{U_0}{N_s}N_0 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}'} + \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}''} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}'''} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}'} \right) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} \\ &= \frac{1}{2}n_0 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}}\hat{a}_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}'} + \hat{a}_{\mathbf{k}''}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}''} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}'''}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}'''} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}} \right) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} \end{aligned}$$

Finalmente se suma sobre \mathbf{k} y se obtiene que las fluctuaciones de orden 2 es

$$H^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} (-\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + 4 \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}). \quad (\text{A.8})$$

El Hamiltoniano efectivo se obtiene sumando la parte de orden cero (ecuación A.5) y la parte de orden dos (ecuación A.8)

$$H^{\text{eff}} = (-zt - \mu + \frac{1}{2} U_0 n_0) N_0 + \sum_{\mathbf{k}} (-\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + 4 \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}). \quad (\text{A.9})$$

Sea $\varepsilon_{\mathbf{k}} = zt - \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$, entonces

$$(-\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) = \varepsilon_{\mathbf{k}} - zt - \mu = \varepsilon_{\mathbf{k}} - zt - (U_0 n_0 - zt) = \varepsilon_{\mathbf{k}} - U_0 n_0, \quad (\text{A.10})$$

además $-zt - \mu = -U_0 n_0$. Sustituyendo estas relaciones en el Hamiltoniano efectivo (A.9) se tiene que

$$\begin{aligned} H^{\text{eff}} &= (-U_0 n_0 + \frac{1}{2} U_0 n_0) N_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - U_0 n_0) \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \sum_{\mathbf{k}} 4 \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}) \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 + \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} - U_0 n_0 \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + 2 U_0 n_0 \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right] \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 + \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right] \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) (\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} - 1) + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}) - \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} - \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &\quad + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ &\quad + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ &\quad + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_0 n_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{a}_{-\mathbf{k}}) \left((\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) \hat{a}_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 (\hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}) \right) \\ &\quad \left(U_0 n_0 \hat{a}_{\mathbf{k}} + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) (\hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}) \right) \end{aligned}$$

Podemos reescribir al Hamiltoniano efectivo como la expresión (3.11)

$$H^{\text{eff}} = -\frac{1}{2} U_0 n_0 N_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{a}_{-\mathbf{k}}) \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 & U_0 n_0 \\ U_0 n_0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

A.1.4. Condición de los coeficientes

Escribimos el conmutador de los operadores para obtener la condición que los coeficientes deben cumplir.

$$\begin{aligned}
 [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger] &= \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger - \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \\
 &= (u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger)(u_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}) - (u_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}})(u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger) \\
 &= u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} - (u_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger) \\
 &= (u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* - v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*) \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + (u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* - v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}) \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + (v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* - u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + (v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* - u_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \\
 &= (|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger - \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}) \\
 &= (|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger].
 \end{aligned}$$

Por lo tanto la condición es que los coeficientes satisfagan

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (\text{A.12})$$

A.1.5. Relación de dispersión

Partiendo de las ecuaciones donde $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ son soluciones:

$$[(u_{\mathbf{k}})^2 + (v_{\mathbf{k}})^2] U_0 n_0 - 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) = 0, \quad (\text{A.13})$$

$$(|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2) (\epsilon_{\mathbf{k}} + U_0 n_0) - (u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*) U_0 n_0 = \hbar \omega_{\mathbf{k}}, \quad (\text{A.14})$$

suponemos que $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ son números reales. Restando A.14 de A.13 se obtiene

$$[(u_{\mathbf{k}})^2 + (v_{\mathbf{k}})^2] \epsilon_{\mathbf{k}} - 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}) = \hbar \omega_{\mathbf{k}},$$

donde podemos completar el término cuadrático y obtener

$$(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2 \epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar \omega_{\mathbf{k}}.$$

Ahora hacemos la suma de las ecuaciones A.13 y A.14

$$\begin{aligned}
 &[(u_{\mathbf{k}})^2 + (v_{\mathbf{k}})^2] (\epsilon_{\mathbf{k}} + 2U_0 n_0) - 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} + 2U_0 n_0) = \hbar \omega_{\mathbf{k}} \\
 \implies &[(u_{\mathbf{k}})^2 + (v_{\mathbf{k}})^2 - 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}] (\epsilon_{\mathbf{k}} + 2U_0 n_0) = \hbar \omega_{\mathbf{k}} \\
 &(u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}})^2 (\epsilon_{\mathbf{k}} + 2U_0 n_0) = \hbar \omega_{\mathbf{k}}.
 \end{aligned}$$

Multiplicando las dos ecuaciones encontradas para $\hbar \omega_{\mathbf{k}}$:

$$(\hbar \omega_{\mathbf{k}})^2 = (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2 (u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}})^2 \epsilon_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} + 2U_0 n_0)$$

Se concluye que:

$$\hbar \omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} + 2U_0 n_0)} \quad (\text{A.15})$$

Bibliografía

- [1] P. Kapitza, “Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point”, *Nature* **1938**, 141, 74.
- [2] J. F. Allen y A. D. Misener, “Flow of Liquid Helium II”, *Nature* **1938**, 141, 75.
- [3] S. N. Bose, “Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese”, *Z. Phys* **1924**, 26, 178.
- [4] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”, *Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.* **1924**, 261.
- [5] H. T. C. Stoof, K. B. Gubbels y D. Dickerscheid, *Ultracold Quantum Fields*, Primera Edición, Springer, **2009**.
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman y E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor”, *Science* **1995**, 269, 198.
- [7] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn y W. Ketterle, “Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms”, *Physical Review Letters* **1995**, 75, 3969.
- [8] M. Lewenstein, A. Sanpera y V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices*, Primera Edición, Oxford University Press, **2012**.
- [9] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner y P. Zoller, “Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices”, *Physical Review Letters* **1998**, 81, 15.
- [10] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein y D. S. Fischer, “Boson localization and the superfluid-insulator transition”, *Physical Review B* **1989**, 40, 1.
- [11] M. Greiner, O. M. O., T. Esslinger, T. W. Hänsch e I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms”, *Nature* **2002**, 415, 39-44.
- [12] D. Stamper-Kurn y W. Ketterle en *Proceedings of the Les Houches Summer School, Course LXXII, 1999*, ed. por R. Kaiser, ed. por C. Westbrook, ed. por F. David, Springer, New York, **2001**.
- [13] C. Grigo, *Spin-1 bosons in two-dimensional optical lattices*, Ludwig-Maximilians-Universität München, **2015**.
- [14] M. Landini, N. Dogra, K. Kroeger, L. Hruby, T. Donner y T. Esslinger, “Formation of a Spin Texture in a Quantum Gas Coupled to a Cavity”, *Physical Review Letters* **2018**, 120, 223602.
- [15] R. M. Kroeze, Y. Guo, V. D. Vaidya, J. Keeling y B. L. Lev, “Spinor Self-Ordering of a Quantum Gas in a Cavity”, *Physical Review Letters* **2018**, 121, 163601.
- [16] D. van Oosten, P. van der Straten y H. T. C. Stoof, “Quantum phases in an optical lattice”, *Physical Review A* **2001**, 63, 053601.
- [17] C. Trefzger, C. Menotti, B. Capogrosso-Sansone y M. Lewenstein, “Ultracold dipolar gases in optical lattices”, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **2011**, 44, 193001.

-
- [18] I. Bloch, “Ultracold quantum gases in optical lattices”, *Nature Physics* **2005**, *1*, 23-30.
- [19] G. F. Gribakin y V. V. Flambaum, “Calculation of the scattering length in atomic collisions using the semiclassical approximation”, *Physical Review A* **1993**, *48*, 1.
- [20] I. Bloch, J. Dalibard y W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases”, *Reviews of Modern Physics* **2008**, *80*.
- [21] L. Pitaevskii y S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*, Primera Edición, Oxford University Press, **2003**.
- [22] R. V. Pai, K. Sheshadri y R. Pandit, “Phases and transitions in the spin-1 Bose-Hubbard model: Systematics of a mean-field theory”, *Physical Review B* **2008**, 014503.
- [23] S. F. Caballero-Benitez, G. Mazzucchi e I. B. Mekhov, “Quantum simulators based on the global collective light-matter interaction”, *Physical Review A* **2016**, *93*, 063632.
- [24] S. F. Caballero-Benitez e I. B. Mekhov, “Quantum Optical Lattices for Emergent Many-Body Phases of Ultracold Atoms”, *Physical Review Letters* **2015**, *115*, 243604.
- [25] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Primera Edición, Wiley, **1991**.
- [26] J. M. Zhang y R. X. Dong, “Exact diagonalization: the Bose-Hubbard model as an example”, *European Journal of Physics* **2010**, *31*, 591.
- [27] C. Lanczos, “An Iteration Method for the Solution of the Eigenvalue Problem of Linear Differential and Integral Operators”, *Journal of Research of the National Bureau of Standards* **1950**, *45*, 2133.
- [28] R. Roth y K. Burnett, “Phase diagram of bosonic atoms in two-color superlattices”, *Physical Review A* **2003**, *68*, 023604.
- [29] O. Penrose y L. Onsager, “Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium”, *Physical Review* **1956**, *104*, 3.
- [30] L. de Forges de Parny, F. Hébert, V. G. Rousseau y G. G. Batrouni, “Interacting spin-1 bosons in a two-dimensional optical lattice”, *Physical Review B* **2013**, *88*, 104509.
- [31] Y. Toga, H. Tsuchiura, M. Yamashita, K. Inaba y H. Yokoyama, “Mott Transition and Spin Structures of Spin-1 Bosons in Two-Dimensional Optical Lattices at Unit Filling”, *Journal of the Physical Society of Japan* **2012**, *81*, 063001.
- [32] D. M. Stamper-Kurn y M. Ueda, “Spinor Bose gases: Symmetries, magnetism, and quantum dynamics”, *Reviews of Modern Physics* **2013**, *85*, 1119.
- [33] B. Zeng, X. Chen, D.-L. Zhou y X.-G. Wen, *Quantum Information meets Quantum Matter*, Primera Edición, Springer, **2019**.