



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

TRANSICIONES DE FASE CUÁNTICAS DE ÁTOMOS
ULTRAFRÍOS EN REDES ÓPTICAS CLÁSICAS Y
CUÁNTICAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

P R E S E N T A :

ADRIÁN ULISES RAMÍREZ BARAJAS

TUTOR

DR. SANTIAGO FRANCISCO CABALLERO BENÍTEZ



CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., 2021



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.

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a la UNAM, a la Facultad de Ciencias y a los diferentes profesores que tuve a lo largo de la carrera, por darme la oportunidad de estudiar una carrera científica de calidad y mostrarme lo bello e intrigante que es el mundo en el que vivimos.

Agradezco a mis padres, quienes, mediante su trabajo duro y esfuerzo, han sido el soporte por el cual llego a este punto. A mis hermanos León, Arlen y Liuba, por ser una guía y un modelo a seguir, que me inspira a ir más adelante.

Agradezco a Brenda Córdova, por acompañarme y apoyarme a lo largo de estos años de carrera.

Agradezco al Dr. Santiago Caballero, por asesorarme y dirigir esta tesis, por las largas conversaciones y por sus consejos académicos.

Agradezco a los sinodales que revisaron este trabajo y me realizaron valiosos comentarios.

Agradezco al programa de becas de PAPIIT para realizar mi tesis en el proyecto DGAPA-PAPIIT: IN109619 y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología CONACYT en el proyecto de Ciencia Básica: A1-S-30934. Ambos proyectos fueron fundamentales en el proceso de formación y elaboración de este trabajo.

A mis padres.

Resumen

En este trabajo se estudian átomos bosónicos sin espín en redes ópticas a temperatura cero, descritos por el modelo de Bose-Hubbard [1, 2]. Este sistema presenta una transición de fase cuántica, entre el aislante de Mott, en la cual el número de átomos por sitio es entero, y la fase del superfluido. Para tratar este problema, se utilizan diferentes aproximaciones: la aproximación de desacoplamiento [3], en la que se desprecian las fluctuaciones de segundo orden de los operadores de creación y aniquilación por sitio, y el formalismo B+U [4], el cual es una extensión a la teoría de desacoplamiento que toma en cuenta las fluctuaciones de procesos de salto doble de partículas dispersadas. Con ambos métodos, se reproduce el diagrama de fases del sistema. La teoría B+U, que inicialmente se formuló para el modelo de Bose-Hubbard con un modo espacial, es extendida en esta tesis para tratar problemas con un mayor número de modos. Esto lo aplicamos al problema de átomos ultrafríos en redes ópticas dentro de una cavidad óptica. Colocar al sistema dentro de una cavidad origina un mayor acoplamiento entre la luz y la materia, ya que la luz dispersada hacia la cavidad modifica el potencial de la red y se crean estados autoconsistentes de luz-materia. Esto hace posible la aparición de diferentes fases de la materia, con interacciones de corto y largo alcance [5,6]. Como resultado principal del presente trabajo, se obtiene el diagrama de fases del problema con la cavidad utilizando el formalismo B+U, el cual se compara con el que se obtiene utilizando la aproximación de desacoplamiento, elaborado en trabajos previos [5]. Se observa que al utilizar el formalismo B+U y al tomar en cuenta las fluctuaciones de procesos de salto doble, las curvas de transición de fase ocurren a una mayor energía de tunelaje. La principal ventaja del formalismo B+U es el poder obtener resultados más precisos en comparación con la teoría de desacoplamiento, a un bajo coste computacional.

Índice general

1. Introducción	1
2. Marco teórico	3
2.1. Átomos ultrafríos en redes ópticas	3
2.1.1. Redes ópticas	3
2.1.2. Interacciones entre átomos y resonancias de Feshbach	4
2.2. Modelo de Bose-Hubbard	7
2.2.1. Aproximación de Bogoliubov	9
2.2.2. Aproximación de desacoplamiento	11
2.2.3. Ansatz de Gutzwiller	13
2.3. Transiciones de fase cuánticas	17
3. Teoría B+U aplicada al modelo de Bose Hubbard	22
3.1. Teoría dinámica de campo medio para bosones	22
3.2. Teoría Bogoliubov+U (B+U)	26
3.2.1. Algoritmo autoconsistente a $T = 0$	30
3.2.2. Diagrama de fases	30
3.3. Generalización de la teoría B+U a más de un modo	34
4. Átomos en redes ópticas dentro de una cavidad	39
4.1. Dispersión de luz a 90°	40
4.1.1. Aproximación de desacoplamiento	40
4.1.2. Aproximación B+U	41
5. Conclusiones	47
Apéndice A. Segunda cuantización	48
Apéndice B. Coeficientes críticos de la teoría de campo medio	50
Apéndice C. Teoría de campo del modelo de Bose-Hubbard	55
C.1. Función de partición	55
C.2. Modelo efectivo	57
Referencias	65

1 Introducción

La mecánica cuántica es la rama de la física que estudia sistemas a escalas atómicas y subatómicas, dominio en el que la física clásica deja de ser válida. Esta teoría, formulada en la década de 1920, es actualmente uno de los pilares principales de la física contemporánea, siendo sus predicciones comprobadas experimentalmente a un grado inmenso de precisión. Actualmente, transcurrido un siglo desde que se establecieron los fundamentos del mundo microscópico, las comunidades de física atómica, molecular, óptica cuántica y materia condensada buscan controlar sistemas cuánticos macroscópicos, tanto para desarrollar nuevas tecnologías como computadoras cuánticas y materiales novedosos, como para seguir entendiendo las propiedades de la naturaleza.

Uno de los campos de investigación que se han desarrollado en este contexto es el de la materia ultrafría, en el que los átomos son enfriados a temperaturas cercanas al cero absoluto y las propiedades cuánticas de la materia se vuelven importantes. Los sistemas de materia ultrafría representan uno de los sistemas más controlables y prometedores para estudiar la física cuántica de muchos cuerpos, permitiendo además el descubrimiento de fases y fenomenología nunca antes vistas. Esta área ha logrado muchos avances teóricos y experimentales en los últimos años. El suceso que marcó el inicio de una era de descubrimientos en esta área fue en 1995, año en el que se logró crear experimentalmente condensados de Bose-Einstein en gases diluidos de Rubidio [7], Litio [8] y Sodio [9], mediante técnicas de enfriamiento con láseres y trampas magnéticas. Un condensado de Bose-Einstein se da en átomos bosónicos debajo de una temperatura crítica y está caracterizada por una ocupación macroscópica del estado menos energético, por lo que es un fenómeno puramente cuántico [10].

A pesar de los avances experimentales, tratar con sistemas de muchos cuerpos teóricamente sigue representando una gran dificultad. Si se quiere resolver un modelo de manera exacta, el sistema se ve limitado a un sistema pequeño, ya que la dimensión del espacio de Hilbert crece de manera exponencial conforme aumenta el número de partículas. Como consecuencia, es necesario utilizar diferentes métodos estadísticos y aproximaciones de medios efectivos.

Una alternativa para atacar el problema de muchos cuerpos es desarrollar sistemas que imiten el comportamiento de sistemas cuánticos de muchos cuerpos, pero que estos sean más simples y accesibles experimentalmente, siendo posible variar libremente sus parámetros y explorar sus características en diferentes dominios. Específicamente, se busca describir los sistemas complejos de la materia condensada, ya que en sólidos y otros materiales es complicado modificar experimentalmente las cantidades que determinan el comportamiento de los átomos. A estos sistemas imitadores se les denomina simuladores cuánti-

cos [11] y fueron inicialmente idealizados por Feynman en 1982 [12]. Algunas propuestas para realizar simuladores cuánticos son los átomos ultrafríos [13], trampas con iones [14] y tecnologías con fotones [15].

Uno de los simuladores cuánticos que han logrado reproducirse casi perfectamente de manera experimental [16] es el modelo de Bose-Hubbard, propuesto inicialmente por Fisher [1] y su realización con átomos ultrafríos en redes ópticas por Jaksch [2]. Dicho modelo describe el comportamiento de bosones con interacciones repulsivas de corto alcance en un potencial periódico y está caracterizado por una transición de fase entre un aislante de Mott y una fase superfluida. En este caso, la red óptica imita el potencial periódico que existe en un sólido, siendo posible modificar la red a través de los láseres que la forman. El modelo de Bose-Hubbard es el modelo más simple que puede describir bosones interactuantes en una red, por lo que representa un punto de partida para desarrollar modelos más complejos.

Se han desarrollado extensiones al modelo de Bose-Hubbard, tomando en cuenta partículas con espín, con interacciones más allá de sitios vecinos, con partículas de varias clases, por nombrar algunos ejemplos [11]. Entre estas modificaciones, es posible colocar la red óptica dentro de una cavidad de alta reflectancia, la cual altera las interacciones entre los átomos y la luz, produciendo procesos de largo alcance que acoplan todos los sitios del sistema [5, 6]. Como consecuencia, dependiendo de la región del espacio de parámetros en el que uno se encuentre, es posible observar la formación de fases estructuradas espacialmente.

En la presente tesis se expone el modelo de Bose-Hubbard, desde la formación de una red óptica y los fenómenos que permiten colocar a los átomos en esta, hasta las diferentes aproximaciones analíticas para simular el problema. El enfoque del trabajo está en describir la transición de fase de este y otros modelos asociados. Primero, en el capítulo 2, se describe qué es una red óptica y la forma de cambiar las propiedades de los átomos, como su energía cinética y su interacción, cuando están sobre la red. También, se deduce el modelo de Bose-Hubbard y se exponen diferentes aproximaciones para tratar el problema. Mediante el *ansatz* de Gutzwiller se obtiene su diagrama de fases. Al final del capítulo se introduce el tema de transiciones de fase cuánticas y el concepto de universalidad, que permite identificar propiedades similares en diferentes modelos, así como algunos elementos de teoría de campo. En el capítulo 3 se expone la teoría B+U, una aproximación aplicable al modelo de Bose-Hubbard, que permite mejorar los resultados obtenidos por la aproximación de desacoplamiento, incluyendo fluctuaciones de operadores de salto hasta orden cuártico, a un bajo coste computacional. Esta teoría es extendida en la presente tesis a sistemas que admiten más de un modo espacial. En el capítulo 4, se describe el modelo de la red óptica dentro de una cavidad. Dicho sistema, que en trabajos previos [5] fue resuelto utilizando la aproximación de desacoplamiento, es tratado mediante la teoría B+U de dos modos. Finalmente, en el capítulo 5, se presentan las conclusiones y los comentarios finales.

2 Marco teórico

2.1. Átomos ultrafríos en redes ópticas

2.1.1. Redes ópticas

Una red óptica es un potencial periódico formado por un campo electromagnético, en el cual es posible colocar a los átomos en sitios determinados y obtener el análogo de una red de un sólido. El fenómeno físico principal que permite almacenar a los átomos en estas redes es la interacción del campo eléctrico con el momento dipolar eléctrico inducido sobre el átomo, como se verá en esta sección.

Consideremos un campo eléctrico $E(\mathbf{r}, t)$ oscilante, con frecuencia ω lejos de las resonancias atómicas, de manera que no se induzcan transiciones significativas hacia otros niveles atómicos. Un átomo colocado en este campo adquiere un momento dipolar \mathbf{d} dado por [11]

$$\mathbf{d}(t) = \alpha(\omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (2.1)$$

donde α es el tensor de polarización. Si el campo eléctrico se supone uniforme en la escala espacial de los átomos, es posible aplicar la aproximación dipolar, en la cual la contribución de la interacción dipolo-campo al Hamiltoniano es [17]

$$\hat{H}' = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}, \quad (2.2)$$

donde $\hat{\mathbf{d}} = e \sum_j \hat{\mathbf{r}}_j$ es el operador de momento dipolar. Los $\hat{\mathbf{r}}_j$ son las posiciones de los electrones con respecto al núcleo atómico. El cambio de energía que induce esta contribución se puede ver como un potencial externo conservativo que actúa sobre el átomo. Cuando la polarización es un escalar, es decir, cuando el medio es isotrópico, el potencial queda dado por [10]

$$V(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{1}{2} \alpha'(\omega) \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t, \quad (2.3)$$

donde $\alpha'(\omega)$ es la parte real de la polarización, la cual depende de la frecuencia del campo eléctrico ω y de los estados atómicos excitados. $\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t$ representa un promedio temporal sobre un tiempo mucho mayor al periodo del campo $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. Es posible calcular la polarización utilizando teoría de perturbaciones a segundo orden para campos pequeños. En esta situación, cuando una resonancia ω_r está más cercana a ω que las otras, el potencial cumple

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

con $\Delta = \omega - \omega_r$ la desintonía del láser con respecto a la resonancia atómica ω_r , e $I(\mathbf{r}, t)$ la intensidad del campo eléctrico. Dependiendo del signo de la desintonía, se tiene un potencial repulsivo si $\Delta > 0$, en el que los átomos se alejan de los máximos de intensidad, y uno atractivo si $\Delta < 0$.

Para crear una red óptica, es necesario elegir un campo eléctrico tal que $\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t$ sea periódico en el espacio. La forma más simple de lograrlo es sobreimponiendo dos haces contrapropagantes provenientes de láseres que tengan la misma frecuencia ω . Suponiendo que los haces están polarizados en el eje z y se propagan a lo largo del eje x , el campo eléctrico queda dado por

$$E_z = E_0 \cos(kx - \omega t) + E_0 \cos(-kx - \omega t) = 2 \cos(kx) \cos(\omega t). \quad (2.5)$$

Como $\langle \cos^2(\omega t) \rangle_t = \frac{1}{2}$, podemos escribir el potencial como

$$V(x) = V_0 \cos^2(kx) = \frac{V_0}{2} (\cos(2kx) + 1), \quad (2.6)$$

lo que representa un potencial con periodicidad $\lambda/2$, donde λ es la longitud de onda de los haces de los láseres. V_0 es una constante que determina la profundidad de la red.

De manera similar, es posible colocar pares adicionales de láseres en las demás direcciones espaciales, creando redes ópticas de mayores dimensiones. Por ejemplo, el análogo de (2.6) en tres dimensiones es

$$V(\mathbf{r}) = V_0 (\cos^2 kx + \cos^2 ky + \cos^2 kz), \quad (2.7)$$

donde se supone una red homogénea y que no hay interferencia entre las tres ondas estacionarias. Esto último se puede lograr eligiendo polarizaciones ortogonales para cada onda estacionaria. Adicionalmente, se pueden crear redes de diferentes geometrías, cambiando la orientación de los láseres, su polarización o la forma de los potenciales. Las redes formadas son ideales, ya que no presentan defectos, son rígidas y no soportan fonones, es decir, no hay excitaciones a modos colectivos de vibración de la red. La profundidad y periodicidad de la red también pueden ser controladas variando los parámetros de los láseres.

2.1.2. Interacciones entre átomos y resonancias de Feshbach

A continuación se describen las fuerzas interatómicas de los átomos alcalinos neutros, los cuales son usados usualmente para la formación de condensados de Bose-Einstein. Estos átomos tienen un electrón fuera de sus capas llenas, es decir, un electrón de valencia. Al interactuar dos átomos, existe una componente atractiva debida a que electrones de valencia en diferentes estados de espín pueden formar un enlace covalente al ocupar el mismo orbital. Esta fuerza no está presente cuando los dos electrones tienen el mismo estado de espín, por el principio de exclusión de Pauli. Por otra parte, la fuerza también tiene una componente repulsiva, que domina a distancias interatómicas pequeñas. Dicha fuerza es causada por la repulsión electromagnética de Coulomb entre las nubes electrónicas de los átomos. Adicionalmente, a distancias mayores, hay otra componente atractiva debida a la interacción dipolo-dipolo entre los átomos. Esta es la fuerza de van der Waals y tiene la forma $-\alpha/r^6$, con α una constante. Aunque esta fuerza es más débil que la que forma enlaces covalentes, la fuerza de van der Waals puede formar estados ligados en átomos alcalinos.

A pesar de que las fuerzas entre átomos alcalinos neutros son fuertes, estas son de corto alcance y ocurren raramente en un gas diluido. En los gases ultrafríos, la separación entre partículas es del orden de 100 nm. Esto es mayor a la escala de longitud asociada a las interacciones interatómicas, usualmente por un orden de magnitud. Como consecuencia, los procesos de más de dos cuerpos no son importantes y solo es necesario considerar la dispersión de dos cuerpos, aplicando la teoría cuántica de la dispersión. Adicionalmente, la función de onda de un sistema de muchos cuerpos varía lentamente en el espacio para la mayoría de las configuraciones; la excepción es cuando ocurren colisiones entre átomos y la función de onda varía rápidamente. Para evitar tratar con las correlaciones de corto alcance ocasionadas por las dispersiones y la complicada dependencia espacial del potencial real, se utiliza un potencial efectivo que toma en cuenta las correlaciones de corto alcance.

La dispersión de un par de partículas de masas m a bajas energías es dominada por la onda s y está descrita por la longitud de dispersión a . Como las energías cinéticas de los átomos son bajas, el momento relativo entre los átomos es pequeño y la longitud de onda de de Broglie es mucho más larga que la extensión efectiva del potencial de interacción. En consecuencia, es posible reemplazar el potencial por uno de contacto, que es proporcional a la longitud de dispersión [10]:

$$V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (2.8)$$

La longitud de dispersión a puede ser ajustada variando parámetros externos, como campos eléctricos y magnéticos. Con esto, es posible modificar las interacciones de los átomos en redes ópticas. Al mecanismo que permite lo anterior se le conoce como resonancia de Feshbach [18], el cual se describe a continuación.

Para entender las resonancias de Feshbach, es necesario introducir algunos conceptos de teoría de dispersión. Consideremos la dispersión dada por

$$A + B \rightarrow A' + B', \quad (2.9)$$

de dos partículas A y B , que da como resultado las partículas A' y B' . Las partículas pueden tener diferentes estados internos, por lo que A' y B' pueden corresponder a diferentes estados de A y B para dispersiones inelásticas. Se le denomina como canal a un estado posible de las dos partículas antes o después de la colisión. Un canal queda determinado por la elección de los números cuánticos de las partículas. El canal de entrada consiste en el estado de A y B , mientras que el canal de salida está dado por el estado de A' y B' . Un canal es abierto si las partículas tienen energía cinética suficiente para considerarse libres una de las otras asintóticamente a distancias grandes. Un canal es cerrado en el caso contrario y corresponde a un estado ligado.

Consideremos dos potenciales $V_a(R)$ y $V_c(R)$, que dependen de la distancia R entre las partículas, como se muestra en la figura 2.1. El potencial $V_a(R)$ representa a un canal abierto y tiende asintóticamente a cero, por lo que para R grande, si la energía de las partículas es mayor a cero, estas son libres. El potencial $V_c(R)$ corresponde a un canal cerrado, que soporta estados ligados en un intervalo de R .

Suponemos que tenemos dispersión de átomos ultrafríos, de manera que se tienen energías cinéticas bajas y es suficiente considerar la dispersión de onda s . Una resonancia de

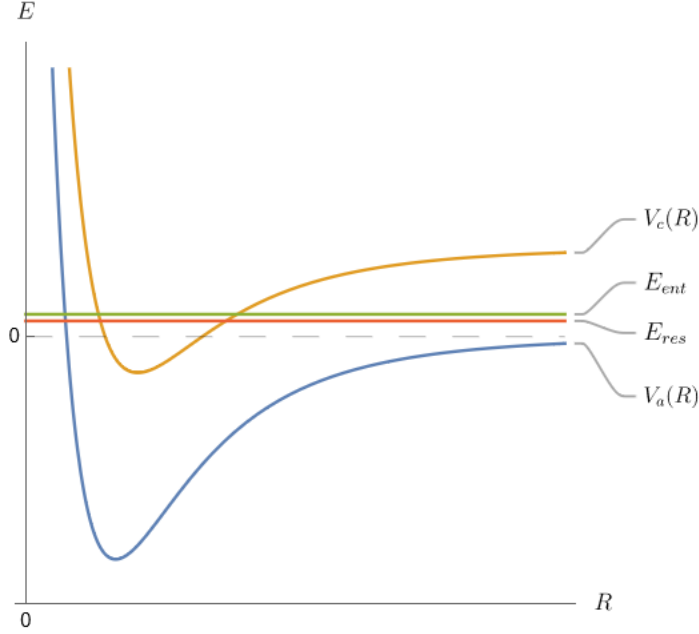


Figura 2.1: Potencial V_a y V_c que ocasionan una resonancia de Feshbach. El fenómeno ocurre cuando los átomos del canal de entrada con energía E_{ent} colisionan y se acoplan a la resonancia del canal cerrado, con energía E_{res} .

Feshbach ocurre cuando la energía del estado ligado del canal cerrado es cercana a la del estado no ligado del canal abierto. En este caso, los dos canales se acoplan de manera resonante. Esto ocasiona un cambio en la longitud de dispersión de onda s dado por [10, 18]

$$\frac{4\pi\hbar}{m}a = \frac{4\pi\hbar}{m}a_a + \frac{|\langle\Psi_{res}|\hat{P}_{cerrado}\hat{H}\hat{P}_{abierto}|\Psi_{ent}\rangle|^2}{E_{ent} - E_{res}}, \quad (2.10)$$

donde $\hat{P}_{cerrado}$ y $\hat{P}_{abierto}$ son operadores de proyección a los espacios respectivos, E_{ent} y $|\Psi_{ent}\rangle$ denotan la energía y el estado del canal de entrada, E_{res} y $|\Psi_{res}\rangle$ son la energía y el estado de la resonancia, m es la masa de las partículas, que se suponen iguales, y a_a es la longitud de dispersión de onda s asociada al potencial $V_a(R)$.

La diferencia de energía entre los canales puede ser controlada mediante un campo magnético externo. Esto modifica la longitud de dispersión de los átomos, mediante la expresión [18]

$$a = a_a \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (2.11)$$

donde B es el campo magnético, B_0 es el valor del campo magnético donde se da la resonancia y para el cual la longitud de dispersión diverge, y el parámetro Δ es el ancho de la resonancia, expresado por

$$\Delta = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_a} \frac{|\langle\Psi_{res}|\hat{P}_{cerrado}\hat{H}\hat{P}_{abierto}|\Psi_{ent}\rangle|^2}{\mu_\alpha + \mu_\beta - \mu_{res}}. \quad (2.12)$$

En la ecuación anterior, $\mu_\xi = \partial E_\xi / \partial B$, donde E_ξ es la energía del canal ξ . E_α y E_β corresponden a las energías de las partículas que colisionan. De esta manera, es posible controlar

las interacciones para átomos en redes ópticas.

Por último, la ecuación (2.11) muestra que cerca de la resonancia B_0 , la longitud de dispersión es muy grande. En esta región, el estado tiene un comportamiento universal tal que puede ser descrito en términos de un potencial efectivo con longitud de dispersión a . Además, es posible hacer una distinción respecto al tamaño del ancho de la resonancia Δ . En las resonancias estrechas, usualmente menores a $10^{-4} T$, el comportamiento universal solo persiste para una fracción muy pequeña del ancho. Por otro lado, el comportamiento universal en las resonancias anchas, mayores a $10^{-4} T$, se extiende sobre una fracción considerable del ancho de la resonancia [18].

2.2. Modelo de Bose-Hubbard

Consideremos un sistema de N átomos bosónicos sin espín que interactúan entre ellos mediante el potencial $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, en presencia de un potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$. El Hamiltoniano en segunda cuantización (ver apéndice A) es el siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.13)$$

En el caso de átomos en redes ópticas, $V_{ext}(\mathbf{r})$ incluye al potencial periódico de la red y a otros potenciales externos adicionales, como el potencial debido a una trampa magnética. Como se trabaja con átomos ultrafríos, el potencial interatómico se puede reemplazar por un potencial de contacto $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (4\pi\hbar^2 a/m) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, con m la masa atómica y a la longitud de dispersión de onda s .

Para obtener el modelo de Bose-Hubbard, se supone que los átomos permanecen en la banda energética más baja, lo cual se puede lograr cuando la red es lo suficientemente profunda. En este caso, es posible expandir los operadores de campo en la base de funciones Wannier $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ de la banda más baja:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \hat{b}_i w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (2.14)$$

En la ecuación anterior se introduce el operador de aniquilación de partículas \hat{b}_i en el sitio i , con el correspondiente operador de creación \hat{b}_i^\dagger . Estos operadores cumplen las reglas de conmutación $[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ y $[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0$. Sustituyendo (2.14) en (2.13) y empleando la ortogonalidad de las funciones de Wannier, se llega al Hamiltoniano

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} t_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_i U_{ijkl} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l, \quad (2.15)$$

donde el tunelaje t_{ij} y la interacción U_{ijkl} están dados por

$$t_{ij} = - \int d\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) \right) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (2.16)$$

$$U_{ijkl} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \int d\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l). \quad (2.17)$$

Consideramos ahora sólo el tunelaje entre sitios vecinos y que este es isotrópico en toda la red, con valor t . El término t_{ii} de un mismo sitio se ignora ya que su contribución por sitio es constante. También, se toma sólo las contribuciones del mismo sitio en la interacción (2.17), ya que las funciones de Wannier son funciones localizadas y sus traslapes despreciables. Con estas suposiciones, se llega al Hamiltoniano de Bose-Hubbard

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (2.18)$$

donde $U = U_{iiii}$, y la suma $\sum_{\langle i,j \rangle}$ es sobre los j primeros vecinos de los sitios i . El operador $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ es el operador de número del sitio i . El modelo (2.18) describe a átomos bosónicos ultrafríos neutros sin espín en una red óptica, en el régimen de amarre fuerte, cuando los átomos permanecen en su banda energética más baja, solo hay tunelaje entre sitios vecinos y la interacción de contacto solo se da entre átomos de un mismo sitio.

Si suponemos que el número de partículas del sistema puede cambiar, es necesario trabajar en el ensamble gran canónico e introducir el potencial químico μ que controla el número de partículas en el sistema. Con esto, el Hamiltoniano de Bose-Hubbard es [1]

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i. \quad (2.19)$$

El primer término de (2.19) favorece el tunelaje de los átomos entre sitios vecinos; el segundo término se debe a la interacción de contacto entre los átomos y penaliza la ocupación de varios átomos en un determinado sitio, a la vez que favorece la localización de un número fijo de átomos por sitio. Como resultado, se tiene una competencia entre la energía cinética de las partículas y las interacciones interatómicas, que puede ser cuantificado mediante el cociente zt/U , donde z es el número de coordinación o de vecinos más cercanos. Esto origina que el modelo de Bose-Hubbard presente dos fases, un superfluido y un aislante de Mott.

En la fase del aislante de Mott, las densidad de átomos por sitio está conmensurada a números enteros y la función de onda de los átomos se encuentra localizada en los sitios de la red. Las fluctuaciones de la densidad son en gran parte suprimidas, pero permanecen finitas. No hay coherencia de fase, la longitud de correlación es finita y existe una brecha energética de excitaciones de huecos y partículas, por lo que es necesario suministrar cierta cantidad de energía al sistema para agregar o retirar partículas. El salto de átomos entre sitios diferentes de la red constituye una excitación de un par hueco-partícula, en el que se retira un átomo de un sitio y se coloca en otro sitio. Dado que la creación de esta excitación requiere de suministrar una energía finita al sistema, los saltos se ven suprimidos y el sistema es un aislante. Además, esta fase es incompresible.

En el estado superfluido, la función de onda de los átomos está distribuida en toda la red, por lo que los átomos pueden moverse libremente sobre esta y no están localizados. La viscosidad es nula, existe coherencia de fase de largo alcance y el espectro energético

es continuo. Las fluctuaciones de átomos por sitio son grandes y la longitud de correlación diverge.

La existencia de las dos fases en el modelo se puede entender por el siguiente argumento. La fase de aislante de Mott ocurre debajo de un valor crítico $(zt/U)_c$, cuando la energía de interacción domina a la energía de tunelaje. En este caso, el aumento de energía cinética de las partículas al moverse por la red no compensa el aumento en energía potencial causada por la repulsión de los átomos en un mismo sitio y la energía total aumenta. Por consiguiente, es energéticamente favorable que no haya tunelaje y los átomos permanezcan localizados. Por otra parte, arriba del valor crítico $(zt/U)_c$, los átomos tienen energía suficiente para superar la repulsión de los demás átomos; la energía se minimiza cuando los átomos se desplazan por la red. Esto ocasiona que el sistema pase al estado supefluido.

Como comentario adicional a la deducción del modelo de Bose-Hubbard, al realizar la expansión en operadores de sitio utilizando las funciones de Wannier (2.14), se supuso una red de tamaño infinito, con un potencial periódico que se extiende por todo el espacio. En la práctica, esto no es posible y siempre se tiene un número finito de sitios en la red, por lo que en la expansión (2.14) se deben de tomar solo las funciones de Wannier que correspondan a sitios de la red. Aun así, el modelo de Bose-Hubbard presenta un buen modelo en el interior de la red.

En lo que sigue se buscará describir la transición de fase entre el aislante de Mott y el superfluido en el modelo de Bose-Hubbard de manera analítica. Para esto, será necesario realizar diferentes aproximaciones de campo medio.

2.2.1. Aproximación de Bogoliubov

Consideremos el límite de interacciones débiles del modelo de Bose-Hubbard (2.19), con el cociente $zt/U \rightarrow \infty$, y desarrollamos una teoría de campo en medio, siguiendo el tratamiento en [3]. Cuando se desprecian las interacciones, las N partículas del sistema se condensan en el estado base. Si se toman en cuenta interacciones débiles, se tiene un número N_0 macroscópico de partículas en el condensado. Es conveniente transformar los operadores de sitio al espacio de cuasimomento, mediante

$$\hat{b}_i = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (2.20)$$

$$\hat{b}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}. \quad (2.21)$$

Los operadores $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$ destruyen y crean una partícula con cuasimomento \mathbf{k} , respectivamente. N_s es el número de sitios y \mathbf{r}_i es la posición del sitio i . Se toma un sistema de volumen finito, de manera que se tienen sumas discretas, donde \mathbf{k} pertenece a la primera zona de Brillouin. Se cumple que en ambas representaciones el número total de partículas está dado por $N = \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}$. Utilizando $\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} = N_s \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ y $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} = 2t \sum_{j=1}^d \cos k_j a$, donde d es la dimensión de la red, el Hamiltoniano transformado es

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} (-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) + \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'',\mathbf{k}'''} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}''} \hat{a}_{\mathbf{k}'''} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''}. \quad (2.22)$$

La aproximación de Bogoliubov se basa en el hecho de que, para un condensado Bose-Einstein, el promedio de átomos condensados es una cantidad macroscópica $N_0 \gg 1$. Las partículas condensadas se encuentran en el estado de cuasimomento $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, que es el estado de menor energía. El número de partículas condensadas es $N_0 = \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle$, por lo que se aproxima $\langle \hat{a}_0 \rangle = \langle \hat{a}_0^\dagger \rangle = \sqrt{N_0}$. Los operadores de creación y aniquilación se separan en sus valores promedios y un operador de fluctuación, que denotamos con el mismo símbolo.

$$\hat{a}_0 \rightarrow \sqrt{N_0} + \hat{a}_0, \quad (2.23)$$

$$\hat{a}_0^\dagger \rightarrow \sqrt{N_0} + \hat{a}_0^\dagger. \quad (2.24)$$

Minimizando la energía con respecto a las partículas condensadas, se expande (2.22) a segundo orden en las fluctuaciones. El potencial químico se fija a $\mu = Un_0 - zt$, de manera que los términos lineales en las fluctuaciones se anulen. Con esto, el Hamiltoniano resultante es

$$\begin{aligned} H = & \left(-zt - \mu + \frac{1}{2}Un_0 \right) N_0 + \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} (-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \\ & + \frac{1}{2}Un_0 \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger + 4\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (2.25)$$

En (2.25), los términos de energía cinética son tratados de manera exacta, mientras que los términos correspondientes a la interacción son aproximados. El Hamiltoniano es diagonalizado mediante una transformación de Bogoliubov

$$\begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

donde los operadores $c_{\mathbf{k}}$ y $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ obedecen la misma regla de conmutación $[\hat{c}_{\mathbf{k}}, \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger] = 1$, lo que implica que los coeficientes de la transformación satisfacen $|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Exigiendo que el Hamiltoniano transformado tenga la forma final

$$H = -\frac{1}{2}Un_0N_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\hbar\omega_{\mathbf{k}} - (zt - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} + Un_0)] + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}, \quad (2.27)$$

se llega a que los coeficientes de (2.27) cumplen

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{(zt - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}})^2 + 2Un_0\epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (2.28)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = |u_{\mathbf{k}}|^2 - 1 = \frac{1}{2} \left(\frac{zt - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} + Un_0}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1 \right). \quad (2.29)$$

La ecuación (2.28) es el espectro de excitación. En el límite termodinámico, el espectro es continuo en \mathbf{k} , por lo que no hay brechas energéticas.

Es posible obtener la densidad de partículas n en función de la densidad de partículas condensadas n_0 , a temperatura cero [3]:

$$n = n_0 + \int_{-1/2}^{1/2} d\mathbf{q} \left(\frac{zt - \bar{\epsilon}_{\mathbf{q}} + Un_0}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}} - 1 \right), \quad (2.30)$$

con $\mathbf{q} = 2\pi\mathbf{k}/a$ y a la distancia entre sitios vecinos. La fracción condensada n_0/n como función del cociente U/t se muestra en la figura 2.2, para una red cuadrada y una red cúbica. En esta aproximación, la fracción condensada es máxima, con valor 1, en el límite $U/t \rightarrow 0$, que corresponde a cuando no hay interacciones. Conforme el cociente U/t aumenta, la fracción condensada disminuye, tendiendo a cero para $U/t \rightarrow \infty$, donde las interacciones son mucho mayores que la energía de tunelaje. No se observa ningún valor crítico en el que la densidad se vaya a cero, por lo que la transición de fase no es descrita en esta aproximación. Esto se debe a que las interacciones juegan un papel importante al describir el aislante de Mott y estas sólo son tomadas de forma aproximada. En su lugar, es posible desarrollar otra teoría de campo medio que trate las interacciones de manera exacta y aproxime los términos de tunelaje. Esto se mostrará en la sección siguiente y será la base para los siguientes desarrollos del presente trabajo.

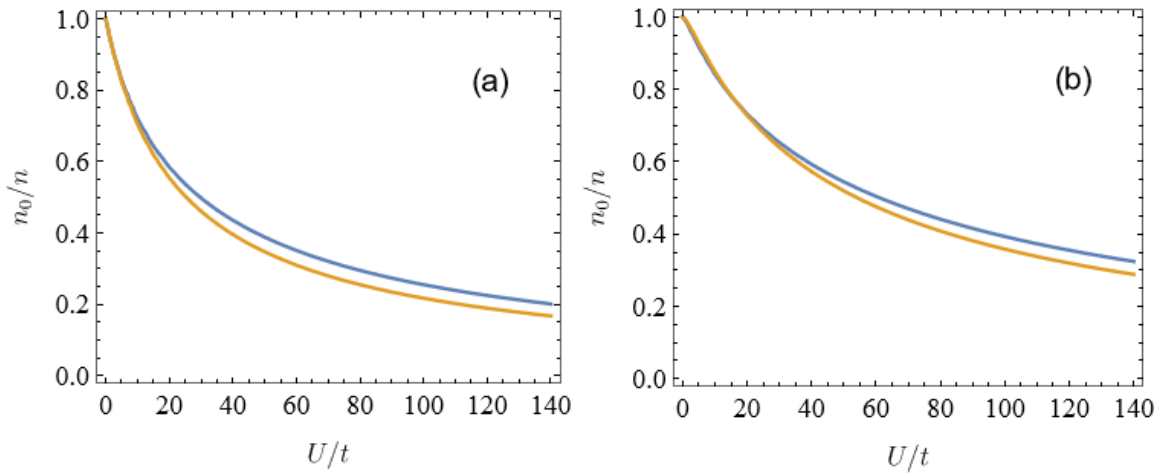


Figura 2.2: Fracción condensada n_0/n en función del cociente U/t , del modelo de Bose Hubbard en la aproximación de Bogoliubov, en una red cuadrada de (a) dos y (b) tres dimensiones. Las líneas azules corresponden a $n = 1.0$ y las líneas naranjas a densidad $n = 0.5$.

2.2.2. Aproximación de desacoplamiento

A continuación se busca describir la transición de fase aproximando los términos de energía cinética del modelo de Bose-Hubbard. Se define el parámetro de orden superfluido ψ como el valor de expectación del operador de aniquilación en el estado base del sistema. Este parámetro se supone independiente de los sitios y, sin pérdida de generalidad, se toma como un número real: $\psi = \langle \hat{b}_i \rangle = \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle = \sqrt{n_i}$. n_i es el valor esperado del número de partículas en el sitio i . La aproximación de desacoplamiento consiste en despreciar las fluctuaciones de segundo orden de los operadores de creación y aniquilación, es decir, $\delta \hat{b}_i^\dagger \delta \hat{b}_j = (\hat{b}_i^\dagger - \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle)(\hat{b}_j - \langle \hat{b}_j \rangle) \simeq 0$, por lo que $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j \simeq \psi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) - \psi^2$. Haciendo la descomposición anterior en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard, se logra escribir el Hamiltoniano en una suma de términos locales:

$$H = \sum_i \left[-zt\psi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i) + zt\psi^2 + \frac{U}{2}\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu\hat{n}_i \right], \quad (2.31)$$

donde z es el número de vecinos más cercanos. Por lo tanto, es suficiente resolver el problema para solo un sitio i .

Consideremos el límite de interacciones fuertes $zt/U \rightarrow 0$. Como trataremos con el Hamiltoniano de un solo sitio, se omite el subíndice i en los operadores. Además, denotamos el Hamiltoniano en este límite como $\hat{H}^{(0)}$.

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2}U\hat{n}(\hat{n}-1) - \mu\hat{n} + zt\psi^2. \quad (2.32)$$

El Hamiltoniano es diagonal en la base de número $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$, tal que $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$. A estos estados se le llaman estados de Fock y tienen un número definido de átomos por sitio: $\langle \hat{n} \rangle = n$. La energía de estos estados es

$$E_n^{(0)} = \frac{1}{2}Un(n-1) - \mu n + zt\psi^2. \quad (2.33)$$

La energía $E_g^{(0)}$ del estado base del sistema se calcula pidiendo que $E_g^{(0)} < E_{g\pm 1}^{(0)}$, obteniéndose

$$E_g^{(0)} = \begin{cases} 0 & \text{si } \mu < 0 \\ \frac{U}{2}g(g-1) - \mu g & \text{si } \bar{U}(g-1) < \mu < Ug \end{cases}. \quad (2.34)$$

La diferencia de energía (energía de excitación) entre estados con diferente n está dada por

$$E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} = Un - \mu, \quad (2.35)$$

por lo que el espectro es brechado. Además, $\partial \langle \hat{n} \rangle / \partial \mu = 0$, por lo que estos estados son incompresibles. Estas dos características, además de que los estados tienen densidades conmensuradas enteras, definen a la fase del aislante de Mott (MI). Es necesario notar que cuando μ/U es un entero, la brecha energética (2.35) se anula, el espectro es continuo y se tiene un superfluido.

Para tratar el caso en que zt/U es no nulo, se aplica teoría de perturbaciones al Hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$, tomando el término de tunelaje $\psi\hat{V} = -zt\psi(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)$ como la perturbación. Escribimos

$$\begin{aligned} \hat{H} &= H^{(0)} + \psi\hat{V} \\ &= \frac{1}{2}U\hat{n}(\hat{n}-1) - \mu\hat{n} + zt\psi^2 - zt\psi(\hat{b}^\dagger + \hat{b}). \end{aligned} \quad (2.36)$$

La primera corrección a la energía es nula, ya que $E^{(1)} = \langle \psi\hat{V} \rangle$ y los valores esperados de los operadores de creación y aniquilación en la base de Fock no perturbada son nulos.

Ahora se calcula la corrección de la energía a segundo orden.

$$\begin{aligned} E_g^{(2)} &= \sum_{n \neq g} \frac{|\langle g | -zt\psi(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) | n \rangle|^2}{E_g^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &= (zt\psi)^2 \left(\frac{|\langle g | \hat{b}^\dagger | g-1 \rangle|^2}{E_g^{(0)} - E_{g-1}^{(0)}} + \frac{|\langle g | \hat{b} | g+1 \rangle|^2}{E_g^{(0)} - E_{g+1}^{(0)}} \right) \\ &= (zt\psi)^2 \left(\frac{g}{U(g-1) - \mu} + \frac{g+1}{\mu - Ug} \right), \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\implies E_g = \frac{U}{2}g(g-1) - \mu g + zt\psi^2 \left(\frac{ztg}{U(g-1) - \mu} + \frac{zt(g+1)}{\mu - Ug} + 1 \right) + O(\psi^4). \quad (2.38)$$

Aplicando la teoría de transiciones de fase de segundo orden de Landau, se escribe la energía como función del parámetro ψ y luego se minimiza esta expresión,

$$E_g(\psi) = a_0(g, \mu, U) + \psi^2 a_2(g, \mu, U) + O(\psi^4), \quad (2.39)$$

donde

$$a_2(g, \mu, U) = zt \left(\frac{ztg}{U(g-1) - \mu} + \frac{zt(g+1)}{\mu - Ug} + 1 \right). \quad (2.40)$$

La energía del estado base es mínima con respecto a ψ , si $\psi = 0$ cuando $a_2 > 0$, o para algún valor $\psi \neq 0$ cuando $a_2 < 0$. Por lo tanto $a_2(g, \bar{\mu}, \bar{U}) = 0$ es la frontera entre las dos fases. A su vez, es una ecuación cuadrática en μ , que tiene como solución

$$\bar{\mu}_{\pm} = \frac{1}{2}[\bar{U}(2g-1) - 1] \pm \frac{1}{2}\sqrt{\bar{U}^2 - 2\bar{U}(2g+1) + 1}, \quad (2.41)$$

donde se definen $\bar{U} = U/zt$ y $\bar{\mu} = \mu/zt$. Estos valores de $\bar{\mu}$ determinan la frontera entre las dos fases en el espacio fase.

De la misma condición $a_2(g, \bar{\mu}, \bar{U}) = 0$, la frontera entre las fases en el espacio μ/U y zt/U es

$$\frac{1}{zt} = \frac{g}{\mu - U(g-1)} + \frac{g+1}{Ug - \mu}, \quad (2.42)$$

de donde

$$\frac{zt}{U} = -\frac{g(g-1) - \frac{\mu}{U}(2g-1) + \left(\frac{\mu}{U}\right)^2}{1 + \frac{\mu}{U}}. \quad (2.43)$$

Las fronteras de transición dadas por (2.41) y (2.43) se muestran en las figuras 2.3 y 2.4, respectivamente

2.2.3. Ansatz de Gutzwiller

En el límite $t/U \rightarrow 0$, los operadores de diferentes sitios están desacoplados y el Hamiltoniano es diagonal en la base de número de diferentes sitios. Los estados del sistema son estados de Fock y podemos escribir al estado como $|\Psi\rangle_n = \prod_i (\hat{b}_i^\dagger)^n |0\rangle$, donde $|0\rangle$ es el estado de vacío. Esto corresponde al aislante de Mott. Por otra parte, en el límite sin interacciones $t/U \rightarrow \infty$, se tiene un estado superfluido y el estado se puede escribir como un estado coherente [19] $|\Psi\rangle = \prod_{l=1}^M \exp\left(\sqrt{N/N_s} \hat{b}_l^\dagger\right) |0\rangle_l$, con N el número de partículas, N_s el número de sitios, \hat{b}_l^\dagger el operador de creación de partículas en el sitio l y $|0\rangle_l$ el estado de cero partículas en el sitio l . Por lo tanto, en ambos límite el estado es de la forma

$$|\Psi\rangle_{GW} = \prod_i \sum_{n=0}^{n_{max}} f_n^{(i)} |n\rangle_i. \quad (2.44)$$

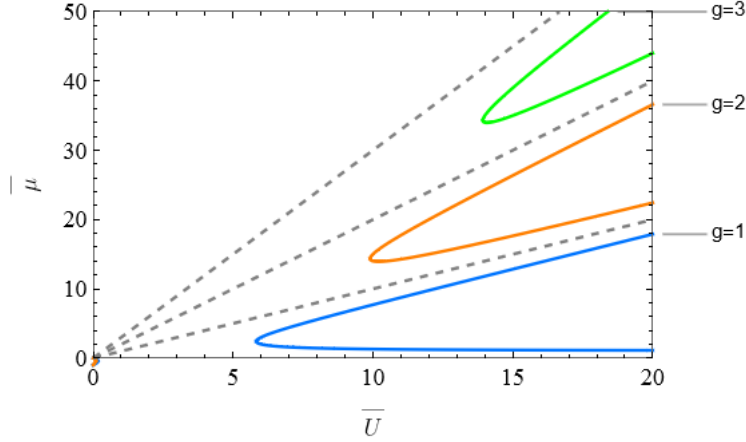


Figura 2.3: Diagrama de fase del Hamiltoniano de Bose-Hubbard, bajo teoría de perturbaciones de segundo orden. Se definen $\bar{U} = U/zt$ y $\bar{\mu} = \mu/zt$. Las líneas solidas indican la separación entre la fase superfluida y los aislantes de Mott. Para un valor de $\bar{\mu}$ fija, al aumentar \bar{U} es posible entrar a diferentes estados de Mott. Las líneas punteadas indican el diagrama de fase a orden cero y separan los diferentes estados de Mott. g indica la densidad de las fases de Mott.

La aproximación de Gutzwiller [19] consiste en utilizar (2.44) como el estado de sistema, para todos los valores de zt/U . De esta forma, el estado de Gutzwiller interpola ambos límites y proporciona una forma simple de calcular numéricamente las cantidades del sistema, junto con el Hamiltoniano por sitio en la aproximación de desacoplamiento

$$H = \left[-zt\psi(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) + zt\psi^2 + \frac{U}{2}\hat{n}(\hat{n} - 1) - \mu\hat{n} \right]. \quad (2.45)$$

El estado $|\Psi\rangle_{GW}$ presenta un llenado máximo n_{max} que trunca la base del espacio de Hilbert. Además, los coeficientes cumplen la condición de normalización $\sum_n |f_n^{(i)}|^2 = 1$.

Como ejemplo, para un llenado máximo de 4, la forma matricial del Hamiltoniano $H_{nm} = \langle n|\hat{H}|m\rangle$ es

$$(H) = \begin{pmatrix} tz\psi^2 & -tz\psi & 0 & 0 & 0 \\ -tz\psi & tz\psi^2 - \mu & -\sqrt{2}tz\psi & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}tz\psi & tz\psi^2 + U - 2\mu & -\sqrt{3}tz\psi & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}tz\psi & tz\psi^2 + 3U - 3\mu & -2tz\psi \\ 0 & 0 & 0 & -2tz\psi & tz\psi^2 + 6U - 4\mu \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Los coeficientes $f_n^{(i)}$ se determinen tal que minimicen la energía del estado base del sistema. Esto es equivalente a realizar un algoritmo autoconsistente que busque convergencia en el parámetro ψ , con la condición de autoconsistencia $\langle \hat{b} \rangle = \psi$ [20], evaluando en el estado base. Dicho algoritmo consiste en:

1. Proponer un valor inicial ψ_0 al parámetro de orden diferente de cero .

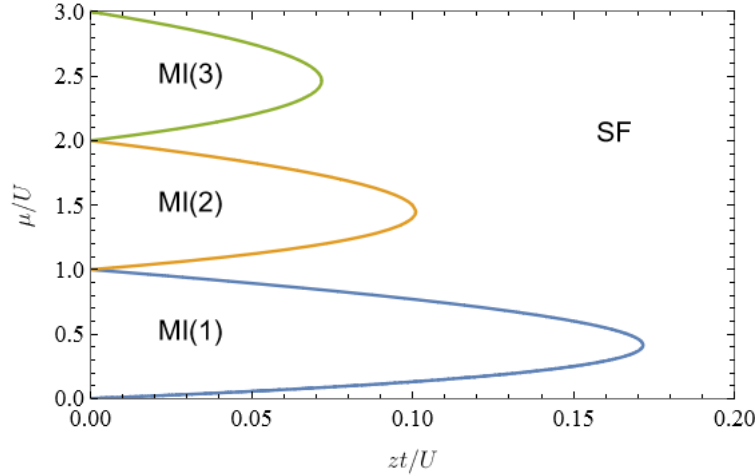


Figura 2.4: Diagrama de fases obtenido por teoría de perturbaciones en la energía cinética a segundo orden. Se observa la frontera entre el superfluido (SF) y el aislante de Mott (MI). El número en los lóbulos de los aislantes de Mott indica la densidad en los sitios.

2. Crear la matriz del Hamiltoniano dependiente del parámetro de orden.
3. Obtener el estado base y calcular el valor de expectación del operador de aniquilación. Este número es el nuevo parámetro de orden ψ .
4. Evaluar si $|\psi - \psi_0| < \varepsilon$, donde ε es una tolerancia. Si se cumple la condición, ψ converge al valor deseado. Si no se cumple, se actualiza el valor del parámetro de orden $\psi_0 \rightarrow \psi$ y se repite desde el paso 2 con el nuevo parámetro de orden.

El diagrama de flujo del algoritmo se muestra en la figura 2.5.

Los resultados de la simulación se presentan en la figura 2.6, donde se grafican el parámetro de orden superfluido ψ y la densidad por sitio $\rho = \langle \hat{n} \rangle$. Se observan las fases del aislante de Mott, donde $\psi = 0$ y la densidad por sitio es un número entero; y el superfluido, donde $|\psi| \neq 0$ y la densidad no está conmensurada. Para determinar la frontera de transición de fase, se encontraron los puntos donde ψ se hacía diferente de cero y se realizó un ajuste sobre estos puntos.

El estado de Gutzwiller presenta ciertos problemas. Por ejemplo, que el aislante de Mott corresponda a un sólo estado de Fock $|n_0\rangle$ solo es correcto cuando $t = 0$. La aproximación no toma en cuenta correlaciones espaciales, ya que las funciones de correlación de diferentes sitios se factorizan entre contribuciones de cada sitio: $\langle \Psi | \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{b}_i^\dagger | \Psi \rangle \langle \Psi | \hat{b}_j | \Psi \rangle$ para $i \neq j$. Esto hace que las predicciones sean malas para bajas dimensiones, donde las correlaciones son más importantes; los resultados mejoran a mayor dimensiones. Por último, este ansatz no toma en cuenta efectos de tamaño finito; se predice una transición de fase en sistemas de cualquier tamaño debido al desacoplamiento en contribuciones de cada sitio por separado. La transición de fase en realidad necesita de un sistema grande.

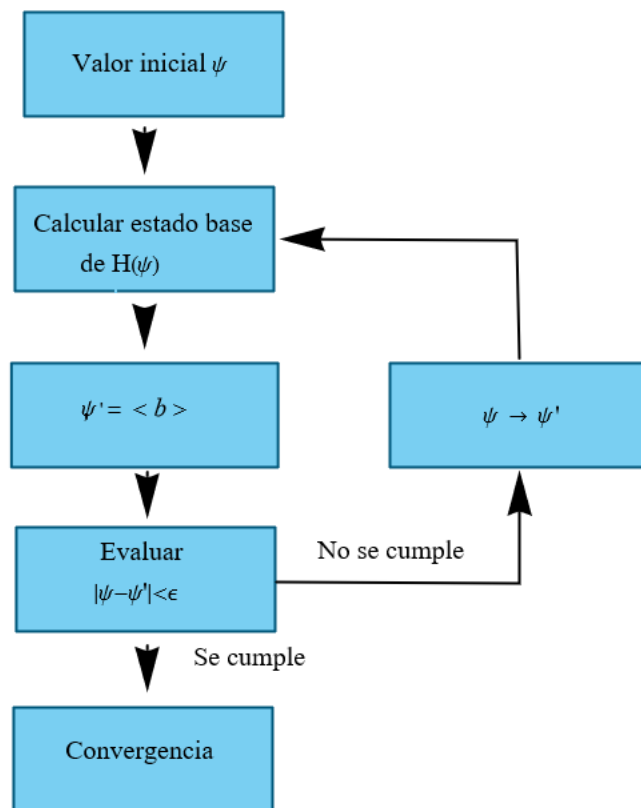


Figura 2.5: Diagrama de flujo del algoritmo para determinar el valor de $\psi = \langle \hat{b} \rangle$, utilizando la teoría de campo medio.

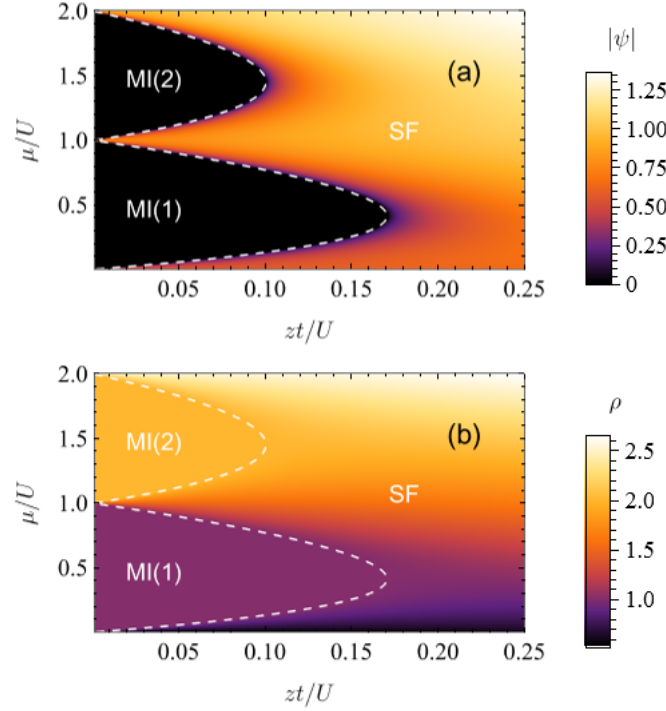


Figura 2.6: Diagrama de fases del modelo de Bose-Hubbard, en la aproximación de campo medio, utilizando el estado de Gutzwiller con llenado máximo de 6. (a) Parámetro de orden superfluido $|\psi|$. (b) Densidad por sitio $\rho = \langle \hat{n} \rangle$.

2.3. Transiciones de fase cuánticas

Una transición de fase cuántica está definida para sistemas a temperatura cero, en los puntos donde la energía del estado base no es analítica [20]. Las transiciones de fase cuánticas son causadas por las fluctuaciones cuánticas, que dependen de la competencia entre diferentes parámetros que describen al sistema. En el modelo de Bose-Hubbard, la transición aislante-superfluido es una transición de fase cuántica. La competencia de parámetros que origina la transición está caracterizada por el cociente entre la amplitud de tunelaje y la interacción t/U . Adicionalmente, una transición de fase cuántica de segundo orden se ve acompañada por un cambio abrupto en el estado base del sistema y se asocia al rompimiento espontáneo de alguna simetría. Por ejemplo, la simetría $U(1)$ se rompe espontáneamente al pasar al estado superfluido, en el modelo de Bose-Hubbard. En contraste, a temperatura finita, una transición de fase es causada por las fluctuaciones térmicas, que son mucho mayores a las fluctuaciones cuánticas y la transición está definida para los puntos donde la energía libre es no analítica.

Un punto crítico g_c es un punto en el espacio de parámetros g donde se da la transición de fase cuántica. De manera similar al caso clásico, en los sistemas conocidos con transiciones de fase cuánticas de segundo orden, varias cantidades físicas siguen un comportamiento divergente o de ley de potencias en la cercanía de los puntos críticos, caracterizados por los llamados exponentes críticos [21]. Estos exponentes permiten introducir el concepto de clases de universalidad. Si diferentes sistemas tienen el mismo conjunto de exponentes crí-

ticos, estos pertenecen a una determinada clase de universalidad. El comportamiento de los sistemas pertenecientes a la misma clase de universalidad es similar cerca del punto crítico, a pesar de sus diferentes estructuras microscópicas.

A continuación se definen los exponentes críticos, utilizando $\Delta g = g - g_c$ como la distancia al punto crítico. En el modelo de Bose Hubbard, $\Delta g = (zt/U) - (zt/U)_c$, donde $(zt/U)_c$ es el punto crítico y los puntos críticos son todos los puntos en el espacio de parámetros que forman la frontera entre el aislante de Mott y el superfluido. Las cantidades que presentan comportamiento crítico son: la parte singular de la energía libre f_s , la longitud de correlación ξ , el tiempo de relajación τ , el parámetro de orden $\psi = -\frac{\partial f_s}{\partial H}$, la susceptibilidad $\chi = -\frac{\partial \psi}{\partial H}$ y la función de correlación del parámetro de orden $G(r)$. Al definir f_s , la energía libre se separa en la suma de la parte regular f_r , que no cambia de manera significativa al acercarnos al punto crítico, y la parte singular f_s , que contiene el comportamiento singular del sistema cerca del punto crítico [22]. Para definir al parámetro de orden, se introduce un campo externo H conjugado al parámetro de orden en la energía libre, que se acopla a este y contribuye el término lineal en el parámetro de orden $-H\psi$ en la expresión de la energía libre. Este campo externo rompe la simetría asociada a la transición de fase. Los coeficientes críticos α , ν , β , γ , z y δ se definen en la cercanía del punto crítico $\Delta g \rightarrow 0$ por las siguientes relaciones [21]:

$$f_s \propto |\Delta g|^{2-\alpha}, \quad (2.47)$$

$$\xi \propto |\Delta g|^{-\nu}, \quad (2.48)$$

$$\psi \propto |\Delta g|^\beta, \quad (2.49)$$

$$\chi(H=0) \propto |\Delta g|^{-\gamma}, \quad (2.50)$$

$$\tau \propto |\Delta g|^{-\nu z}, \quad (2.51)$$

$$\psi(H, \Delta g=0) \propto H^{1/\delta}, \quad (2.52)$$

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d+z-2+\eta}}, \quad (2.53)$$

donde r es la distancia y d es la dimensión del sistema,

La teoría de escalamiento permite obtener relaciones que satisfacen los exponentes críticos, por lo que estos no son independientes. Estas son [21]:

$$2 - \alpha = \nu(d + z), \quad (2.54)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.55)$$

$$\beta + \gamma = \beta\delta, \quad (2.56)$$

$$\nu(2 - \eta) = \gamma, \quad (2.57)$$

$$2\beta = \nu(d + z - 2 + \eta). \quad (2.58)$$

El coeficiente β para el modelo de Bose-Hubbard está relacionado con el parámetro de orden superfluido $\psi = \langle \hat{b}_i \rangle$. Para los puntos multicríticos a densidad $n = 1$ y $n = 2$, obtuvimos el valor de $\beta = 1/2$, variando la energía de tunelaje del sistema a densidad constante y utilizando la simulación con la aproximación de campo medio. En este caso, β se define por $\psi = |zt/U - (zt/U)_c|^\beta$, donde la posición de los puntos multicríticos está dada

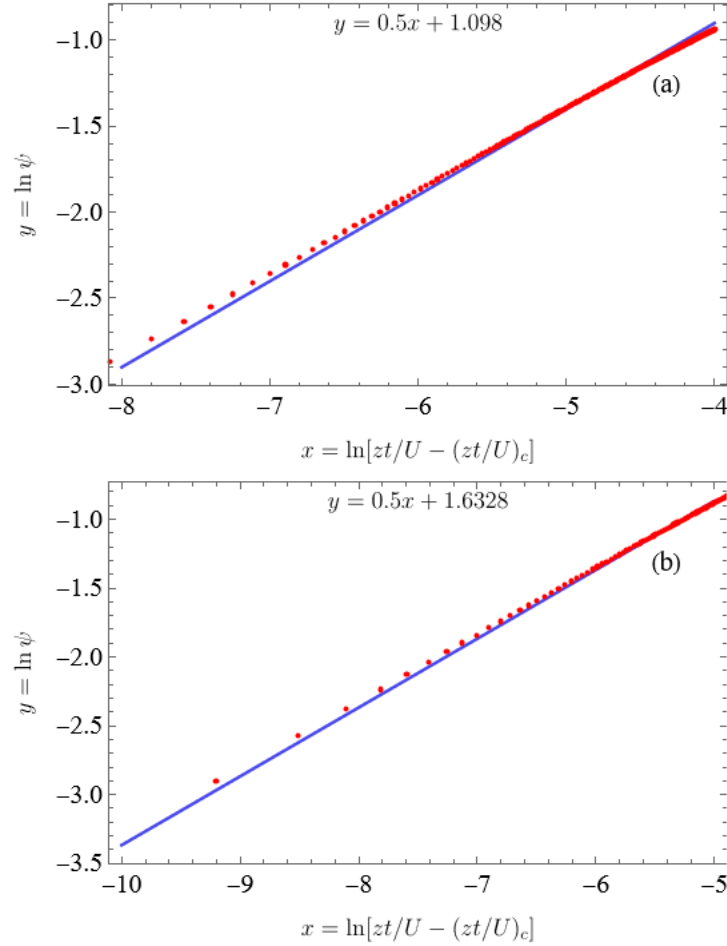


Figura 2.7: Comportamiento crítico del modelo de Bose-Hubbard, en los puntos multicríticos. La transición se da a densidad constante (a) $n = 1$ y (b) $n = 2$. Se muestra el logaritmo del parámetro de orden superfluido ψ al variar el logaritmo de la energía de tunelaje zt/U con respecto a la posición del punto crítico $(zt/U)_c$. Las pendientes de las rectas resultantes dan el coeficiente crítico de $\beta = 1/2$ para los dos casos.

por $(zt/U)_c$. Los resultados se muestran en la gráfica 2.7. El valor de $\beta = 1/2$ coincide con el valor de la teoría de campo medio. En el apéndice B se calculan los coeficientes críticos de la teoría de campo medio.

Una alternativa teórica equivalente al uso de operadores para el estudio microscópico del problema de muchos cuerpos es el de integrales funcionales. Mediante esta formulación, sistemas interactuantes pueden ser clasificados en un número pequeño de clases de universalidad, definidas por sus simetrías fundamentales [23]. La idea básica de este método es escribir la función de partición del sistema como una integral sobre todos los grados de libertad en todos los tiempos. En el apéndice C se trata con la teoría de campo de Bose-Hubbard, utilizando integrales funcionales.

Mediante integrales funcionales, la acción del modelo de Bose-Hubbard (C.15) se es-

cribe como

$$S = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\sum_i \left(\hbar b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i \right) - t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^* b_j \right], \quad (2.59)$$

donde los campos complejos $b_i = b_i(\tau)$ y $b_i^* = b_i^*(\tau)$ son los eigenvalores de los operadores $\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger$, al tiempo imaginario τ . La integración es sobre el tiempo imaginario. Como se muestra en el apéndice C.2, siguiendo a detalle el tratamiento en [20] y [24], se puede escribir la acción del modelo como

$$S[\Psi, \Psi^*] = \int d^d x \int_0^{\hbar\beta} d\tau \times \left(-\hbar \frac{\partial r}{\partial \mu} \Psi^* \partial_\tau \Psi - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 r}{\partial \mu^2} |\partial_\tau \Psi|^2 - \frac{a^2}{4t\hbar d^2} |\nabla \Psi|^2 + r |\Psi|^2 + \frac{u}{2} |\Psi|^4 + \dots \right), \quad (2.60)$$

donde se introducen los campos Ψ, Ψ^* , mediante una transformación de Hubbard-Stratonovich [23, 25] y los campos b_i, b_i^* fueron integrados. $a = |\mathbf{a}|$ es la magnitud del vector base de la red hipercúbica. El sistema además tiene la función de partición

$$Z = \int \mathcal{D}[\Psi] \mathcal{D}[\Psi^*] e^{-\beta V \mathcal{F}_0 - \frac{1}{\hbar} S[\Psi, \Psi^*]}, \quad (2.61)$$

donde V es el volumen del sistema y \mathcal{F}_0 es la densidad de energía libre. Se encuentra que el coeficiente r de (2.60) es

$$r = \frac{1}{z t} - \chi_0(\mu/U), \quad (2.62)$$

donde

$$\chi_0(\mu/U) = \frac{n_o(\mu/U) + 1}{U n_o(\mu/U) - \mu} + \frac{n_o(\mu/U)}{\mu - U n_o(\mu/U) - 1} \quad (2.63)$$

y

$$n_o(\mu/U) = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{\mu}{U} < 0 \\ \text{si } n-1 < \frac{\mu}{U} < n, \quad n \in \mathbb{Z}^+ & \end{cases}. \quad (2.64)$$

La frontera entre el superfluido y el aislante de Mott utilizando teoría de perturbaciones a segundo orden en la aproximación de desacoplamiento está descrita por $r = 0$, lo cual se puede ver al comparar (2.62) con (2.42).

Tomemos ahora una teoría de campo efectiva, que incluye solo las contribuciones de los campos a la acción (2.60) hasta orden cuártico. Consideremos el coeficiente $\frac{\partial r}{\partial \mu}$ de la acción (2.60) cerca de la transición de fase, es decir, cerca de $r = 0$. Dependiendo si $\frac{\partial r}{\partial \mu}$ es nulo, tenemos dos posibles casos, en los que la transición de fase es descrita por dos teorías de campo distintas con diferente clase de universalidad [1, 20]:

- Transición genérica: ocurre cuando $\frac{\partial r}{\partial \mu}$ es no nulo. Este es el caso de todos los puntos de la transición de fase, excepto en las puntas de los lóbulos de Mott. La acción que

describe esta transición es

$$S_{Bose}[\Psi, \Psi^*] = \int d^d x \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(-\hbar \frac{\partial r}{\partial \mu} \Psi^* \partial_\tau \Psi - \frac{a^2}{4t\hbar d^2} |\nabla \Psi|^2 + r |\Psi|^2 + \frac{u}{2} |\Psi|^4 \right), \quad (2.65)$$

donde se despreció el término de la segunda derivada en el tiempo, suponiendo que domina el término de la primera derivada. Esta acción describe la clase de universalidad de la transición vacío-superfluido de la teoría crítica del gas de Bose diluido [20]. En este caso, la transición se ve acompañada por un cambio en la densidad, lo cual puede darse al agregar o quitar un número pequeño de partículas que se encuentren en la fase de Mott; esto es, variando el potencial químico.

- Transición en los puntos multicríticos: se da cuando $\frac{\partial r}{\partial \mu}$ es nulo. Esto ocurre si r es independiente de μ , lo cual corresponde a las puntas de los lóbulos de Mott, donde la frontera de transición tiene una tangente vertical en la figura 2.4. La transición en los puntos multicríticos está descrita por la acción

$$S_{XY}[\Psi, \Psi^*] = \int d^d x \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 r}{\partial \mu^2} |\partial_\tau \Psi|^2 - \frac{a^2}{4t\hbar d^2} |\nabla \Psi|^2 + r |\Psi|^2 + \frac{u}{2} |\Psi|^4 \right), \quad (2.66)$$

que corresponde a la teoría del modelo XY, o modelo de rotor $O(2)$ en $d + 1$ dimensiones [20]. Esta transición de fase se da a densidad constante y su causa es diferente a la de la transición genérica, ya que un aumento en la energía cinética ocasiona que los átomos puedan superar la repulsión de los otros átomos y moverse libremente por el sistema, pasando a la fase superfluida. En este caso, no cambia el potencial químico al darse la transición. Para el modelo XY en tres dimensiones, estimaciones teóricas utilizando simulaciones Monte-Carlo basada en escalamientos de tamaño finito y expansiones a altas temperaturas [26], indican que los valores de los coeficientes críticos son $\alpha = 0.0146(8)$, $\gamma = 1.3177(5)$, $\nu = 0.67155(27)$, $\eta = 0.380(4)$, $\beta = 0.348585(2)$ y $\delta = 4.780(2)$.

3 Teoría B+U aplicada al modelo de Bose Hubbard

En el presente capítulo se expone el formalismo B+U aplicado al modelo de Bose-Hubbard, siguiendo la referencia [4]. La teoría se formuló originalmente como el límite de frecuencia cero de la teoría dinámica de campo medio para bosones (BDMFT), un método muy preciso pero computacionalmente exigente. El formalismo B+U es más simple y tiene un costo computacional bajo. Este se puede ver como una extensión a la teoría de campo medio estático de la sección 2.2.2, donde se toman en cuenta las fluctuaciones ocasionadas por procesos de salto doble entre sitios vecinos. En la sección 3.1 se dará una breve introducción a las ecuaciones del BDMFT, para posteriormente desarrollar la teoría B+U de un modo a detalle (sección 3.2) y extenderla a varios modos (sección 3.3). A esta teoría, que le denominamos B+U multimodo, será aplicable a sistemas con fases moduladas espacialmente, que presenten varios modos, como es el caso de átomos ultrafríos en una red óptica dentro de una cavidad. Dicho problema se tratará en el capítulo 4. En el presente capítulo, se utilizan integrales funcionales de la acción y la función de partición, tema que se puede revisar en el apéndice C.1.

3.1. Teoría dinámica de campo medio para bosones

La dificultad de tratar analíticamente de manera exacta, incluso los Hamiltonianos de muchos cuerpos más simples, y el rápido crecimiento de las capacidades computacionales, han motivado el atacar dichos problemas mediante métodos numéricos. Los métodos exactos son los de diagonalización exacta [27, 28] y los métodos Monte Carlo [29]. Sin embargo, ambos métodos presentan ciertas limitantes. En el método de diagonalización exacta, el espacio de Hilbert crece exponencialmente conforme aumenta el tamaño del sistema, por lo que el problema solo es tratable para un número de sitios pequeño. Por otro lado, los métodos Monte Carlo presentan un problema de signo, que no les permite ser aplicables a bajas temperaturas. Las dificultades anteriores provocan que el uso de diferentes aproximaciones sea esencial en el estudio de problemas de muchos cuerpos. Una de las aproximaciones con mayor precisión numérica para sistemas fuertemente correlacionados ha sido la teoría dinámica de campo medio (DMFT) y su extensión a bosones (BDMFT).

La teoría dinámica de campo medio fue inicialmente desarrollada para el caso fermiónico [30]. La idea principal del método es mapear el modelo de red a un modelo de una impureza embebida en un campo medio efectivo, tomando en cuenta las fluctuaciones lo-

cales. La aproximación se vuelve exacta en el límite de infinitas dimensiones espaciales o, equivalentemente, en el límite de número de coordinación grande. Posteriormente, la teoría fue extendida al caso bosónico, estableciéndose la teoría dinámica de campo medio para bosones (BDMFT). Diferentes deducciones del BDMFT se pueden encontrar en [31–33]. A continuación se muestra la deducción de la acción efectiva del sistema de la impureza, presentada en [32], utilizando el método de medio efectivo, junto con las ecuaciones autoconsistentes que se obtienen. Las cuentas las desarrollamos a detalle.

Se parte de la acción del modelo de Bose-Hubbard homogéneo:

$$S = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\hbar \sum_i b_i^*(\tau) \partial_\tau b_i(\tau) - t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^*(\tau) b_j(\tau) \right) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_i \left(\frac{U}{2} n_i(\tau)(n_i(\tau) - 1) - \mu n_i(\tau) \right). \quad (3.1)$$

Los campos $b_i(\tau)$ se expanden alrededor del campo medio $\psi = \langle b_i(\tau) \rangle$, como $b_i(\tau) = \psi + \delta b_i(\tau)$. ψ es un número complejo independiente del sitio y de τ , que permite romper la simetría $U(1)$ del sistema. Con esto, el término de energía cinética es:

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^*(\tau) b_j(\tau) = -zt\psi^* \sum_i b_i(\tau) - zt\psi \sum_i b_i^*(\tau) + ztN_s |\psi|^2 - t \sum_{\langle i,j \rangle} \delta b_i^*(\tau) \delta b_j(\tau),$$

donde N_s es el número de sitios.

Consideramos un sitio arbitrario del sistema, denotado por o . La acción del sistema se separa en tres partes: $S = S_{ext} + S_o + \Delta S$. S_o incluye solo los campos del sitio o , ΔS contiene los términos conformados por los campos del sitio o y el resto del sistema, y S_{ext} está conformado por campos que no incluyen al sitio o .

$$S_o = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\hbar b_o^*(\tau) \partial_\tau b_o(\tau) - zt[\psi^* b_o(\tau) + \psi b_o^*(\tau)] + \frac{U}{2} n_o(\tau)(n_o(\tau) - 1) - \mu n_o(\tau) + zt|\psi|^2 \right), \quad (3.2)$$

$$\Delta S = - \int_0^{\hbar\beta} d\tau t \sum_{\langle o,j \rangle} (\delta b_o^*(\tau) \delta b_j(\tau) + \delta b_j^*(\tau) \delta b_o(\tau)). \quad (3.3)$$

Nos interesa derivar una acción efectiva S_{eff} , tal que solo incluya campos del sitio o y la función de partición del sistema se pueda escribir como $Z = Z_{ext} Z_{eff}$. Las funciones de partición del sistema completo y del baño son

$$Z = \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] e^{-\frac{1}{\hbar} S[b, b^*]}, \quad (3.4)$$

$$Z_{ext} = \int \mathcal{D}^{(o)}[b] \mathcal{D}^{(o)}[b^*] e^{-\frac{1}{\hbar} S_{ext}[b, b^*]}, \quad (3.5)$$

donde la medida de integración $\mathcal{D}^{(o)}[b]\mathcal{D}^{(o)}[b^*]$ excluye los campos del sitio o . Desarrollando,

$$\begin{aligned}
 Z_{eff} &= \frac{1}{Z_{ext}} \int \mathcal{D}[b_o]\mathcal{D}[b_o^*] e^{-\frac{1}{\hbar}S_o} \int \mathcal{D}[b^{(o)}]\mathcal{D}[b^{(o)*}] e^{-\frac{1}{\hbar}(S_{ext}+\Delta S)} \\
 &= \frac{1}{Z_{ext}} \int \mathcal{D}[b_o]\mathcal{D}[b_o^*] e^{-\frac{1}{\hbar}S_o} \int \mathcal{D}[b^{(0)}]\mathcal{D}[b^{(0)*}] e^{-\frac{1}{\hbar}S_{ext}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\frac{\Delta S}{\hbar})^k}{k!} \\
 &= \int \mathcal{D}[b_o]\mathcal{D}[b_o^*] e^{-\frac{1}{\hbar}S_o} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle (-\frac{\Delta S}{\hbar})^k \rangle_{Z_{ext}}}{k!} \\
 &\approx \int \mathcal{D}[b_o]\mathcal{D}[b_o^*] e^{-\frac{1}{\hbar}S_o} \left[1 - \frac{1}{\hbar} \langle \Delta S \rangle_{Z_{ext}} + \frac{1}{2\hbar^2} \langle (\Delta S)^2 \rangle_{Z_{ext}} \right] \\
 &\approx \int \mathcal{D}[b_o]\mathcal{D}[b_o^*] e^{-\frac{1}{\hbar}S_{eff}},
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

donde

$$\langle \dots \rangle_{Z_{ext}} = \frac{1}{Z_{ext}} \int \mathcal{D}[b^{(0)}]\mathcal{D}[b^{(0)*}] e^{-\frac{1}{\hbar}S_{ext}} (\dots), \tag{3.7}$$

y la acción efectiva queda dada por

$$\begin{aligned}
 S_{eff} &= S_o + \langle \Delta S \rangle_{Z_{ext}} - \frac{1}{2\hbar} [\langle (\Delta S)^2 \rangle_{Z_{ext}} - \langle \Delta S \rangle_{Z_{ext}}^2] \\
 &= S_o - \frac{1}{2\hbar} \langle (\Delta S)^2 \rangle_{Z_{ext}}.
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

En el segundo renglón de (3.8), se utilizó que los términos con $\langle \Delta S \rangle_{Z_{ext}}$ se anulan:

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta S \rangle_{Z_{ext}} &= - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\langle o,j \rangle} (\delta b_o^*(\tau) \langle \delta b_j(\tau) \rangle_{Z_{ext}} + \langle \delta b_j^*(\tau) \rangle_{Z_{ext}} \delta b_o(\tau)) \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

De esta manera, la acción efectiva (3.8) coincide a segundo orden en la expansión (3.6). Introduciendo la matriz de hibridación

$$\Delta(\tau - \tau') = \frac{t^2}{\hbar} \begin{pmatrix} \sum_{\langle o,j \rangle} \sum_{\langle o,i \rangle} \langle \delta b_j(\tau) \delta b_i^*(\tau') \rangle_{Z_{ext}} & \sum_{\langle o,j \rangle} \sum_{\langle o,i \rangle} \langle \delta b_j(\tau) \delta b_i(\tau') \rangle_{Z_{ext}} \\ \sum_{\langle o,j \rangle} \sum_{\langle o,i \rangle} \langle \delta b_j(\tau)^* \delta b_i^*(\tau') \rangle_{Z_{ext}} & \sum_{\langle o,j \rangle} \sum_{\langle o,i \rangle} \langle \delta b_j^*(\tau) \delta b_i(\tau') \rangle_{Z_{ext}} \end{pmatrix}, \tag{3.10}$$

y la notación $\Phi_i(\tau) = \begin{pmatrix} b_i(\tau) \\ b_i^*(\tau) \end{pmatrix}$, $\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^* \end{pmatrix}$, la acción efectiva del BDMFT queda como

$$\begin{aligned}
 S_{eff} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\hbar b_o^*(\tau) \partial_\tau b_o(\tau) - zt \Psi^* \Phi_o + \frac{U}{2} n_o(\tau) (n_o(\tau) - 1) \right. \\
 &\quad \left. - \mu n_o(\tau) + zt |\psi|^2 \right) - \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \delta \Phi_o^\dagger(\tau) \Delta(\tau - \tau') \delta \Phi_o(\tau').
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Para obtener un conjunto de ecuaciones autoconsistentes, los valores de expectación en el sistema efectivo son identificados con los valores de expectación del sitio o . De esta manera, el parámetro de orden superfluido en el sistema efectivo se calcula mediante

$$\psi = \langle b_o(\tau) \rangle_{Z_{eff}}. \quad (3.12)$$

También, se utiliza la ecuación de Dyson [32]

$$\Sigma(i\omega_n) = i\omega_n \sigma_3 + \mu \mathbf{1} + \Delta(i\omega_n) - G_c^{-1}(i\omega_n), \quad (3.13)$$

donde Σ es la autoenergía, ω_n son las frecuencias de Matsubara, $\Delta(i\omega_n)$ es la transformada de Fourier de $\Delta(\tau - \tau')$, y $G_c(i\omega_n)$ es la transformada de Fourier de la función de Green conexas, definida por

$$G_c(\tau) = -\langle T\Phi(\tau)\Phi^\dagger(0) \rangle_{S_{eff}} + \Psi\Psi^\dagger, \quad (3.14)$$

con T el operador de ordenamiento temporal.

La aproximación central de DMFT es que la autoenergía de la red coincide con la autoenergía del sistema efectivo, por lo que la autoenergía se vuelve un cantidad local independiente del momento, es decir, $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n)$. Esto permite calcular la función de Green de la red mediante la siguiente expresión:

$$G_{red}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} [i\omega_n \sigma_3 + (\mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) \mathbf{1} - \Sigma(i\omega_n)]^{-1}. \quad (3.15)$$

El algoritmo consiste en suponer un valor de ψ y Δ , para calcular el valor de la autoenergía $\Sigma(i\omega_n)$ a partir de (3.13). Posteriormente se calcula la función de Green de la red mediante (3.15). Luego, se impone la igualdad $G_c(i\omega_n) = G_{red}(i\omega_n)$, de manera que se actualiza el valor de la función de hibridación a partir de la ecuación de Dyson

$$\Delta(i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n) - i\omega_n \sigma_3 - \mu \mathbf{1} + G_{red}^{-1}(i\omega_n). \quad (3.16)$$

Utilizando adicionalmente la ecuación (3.12) y la transformada de Fourier inversa de la función de hibridación, se calculan nuevos valores para $\Delta(\tau - \tau')$ y ψ , que son sustituidos en la acción (3.11). La acción se resuelve y se cierra el ciclo autoconsistente; este se repite hasta obtener convergencia.

La parte computacionalmente demandante en el BDMFT es la resolución de la acción (3.11), razón por la cual se formuló la teoría B+U. En [31, 32] se muestra un algoritmo de Monte Carlo cuántico para resolver el problema, método que va más allá de la presente discusión. Algunos resultados del BDMFT se presentan en la figura 3.1, en donde se exhibe una gran concordancia con los resultados obtenidos por cálculos Monte Carlo. Esto implica que la transición de Mott queda bien descrita por cantidades locales.

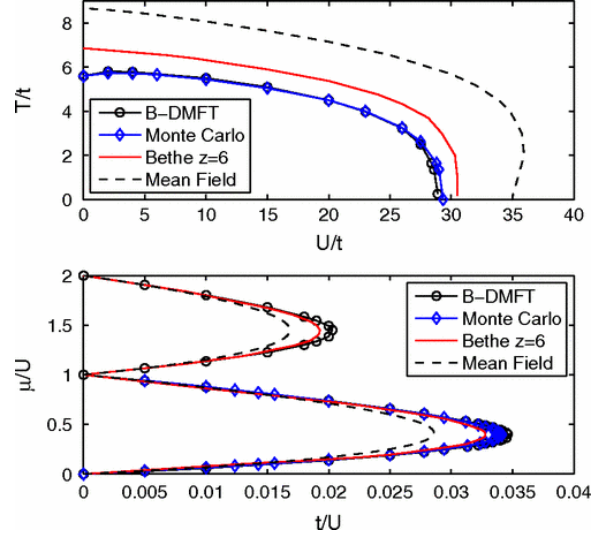


Figura 3.1: Diagrama de fases del modelo de Bose-Hubbard, utilizando BDMFT, simulaciones Monte Carlo, la solución de la red de Bethe para $z = 6$ y la teoría de campo medio estática. (Panel superior) Transición del superfluido a la fase normal. (Panel inferior) Diagrama de fases del estado base, mostrando los lóbulos de Mott para $n = 1$ y $n = 2$. Figura tomada de [31].

3.2. Teoría Bogoliubov+U (B+U)

A continuación se deduce la teoría B+U del modelo de Bose-Hubbard [4]. Las cuentas las desarrollamos nosotros en detalle. Para deducir el formalismo B+U, se parte del Hamiltoniano de Bose Hubbard homogéneo

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i. \quad (3.17)$$

Los operadores de creación y aniquilación se expanden de acuerdo a $\hat{b}_j = \psi + \delta \hat{b}_j$, con $\psi = \langle \hat{b}_i \rangle$ independiente del sitio. El Hamiltoniano se divide en tres partes: \hat{H}_o incluye a operadores que son solo de un sitio arbitrario o , $\Delta \hat{H}$ contiene a operadores que mezclan al sitio del origen con otros sitios, y \hat{H}_{ext} contiene a los otros términos: $\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_{ext} + \Delta \hat{H}$.

$$\hat{H}_o = \frac{U}{2} \hat{n}_o (\hat{n}_o - 1) - \mu \hat{n}_o - zt (\psi^* \hat{b}_o + \psi \hat{b}_o^\dagger) + zt |\psi|^2, \quad (3.18)$$

$$\Delta \hat{H} = -t \sum_{\langle i,o \rangle} (\delta \hat{b}_o^\dagger \delta \hat{b}_i + \delta \hat{b}_o \delta \hat{b}_i^\dagger) = -t \sum_{\langle i,o \rangle} \delta \Phi_o^\dagger \delta \Phi_i, \quad (3.19)$$

con $\delta \Phi_i = \begin{pmatrix} \delta \hat{b}_i \\ \delta \hat{b}_i^\dagger \end{pmatrix}$ y $\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^* \end{pmatrix}$.

Análogamente a BDMFT, se separa la función de partición $Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}} \right]$ del sistema completo en la forma $Z = Z_{ext} Z_{eff}$, donde Z_{ext} es la función de partición del sistema sin el sitio o . La función de partición Z_{eff} adquiere la forma aproximada

$$\begin{aligned}
Z_{eff} &= \frac{Z}{Z_{ext}} \\
&= \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_{ext}} e^{-\beta \hat{H}_o} e^{-\beta \Delta \hat{H}} \right]}{Z_{ext}} \\
&\approx \frac{\text{Tr}_o \left[e^{-\beta \hat{H}_o} \langle e^{-\beta \Delta \hat{H}} \rangle_{\hat{H}_{ext}} \right]}{Z_{ext}},
\end{aligned} \tag{3.20}$$

donde en la segunda línea se separaron las exponenciales despreciando los conmutadores que incluyen a $\Delta \hat{H}$. Al calcular la traza denotada por Tr_o , se suma sobre la base de número, variando solo el índice correspondiente al sitio o . Realizando una expansión en cumulantes,

$$\langle e^{-\beta \Delta \hat{H}} \rangle_{\hat{H}_{ext}} \approx e^{-\beta \langle \Delta \hat{H} \rangle_{\hat{H}_{ext}} + \frac{\beta^2}{2} (\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle_{\hat{H}_{ext}} - \langle \Delta \hat{H} \rangle_{\hat{H}_{ext}}^2)}. \tag{3.21}$$

$\langle \Delta \hat{H} \rangle_{\hat{H}_{ext}}$ involucra a términos de la forma $\langle \delta \hat{b}_i \rangle_{\hat{H}_{ext}} = \langle \hat{b}_i \rangle_{\hat{H}_{ext}} - \psi = 0$, con $i \neq o$, por lo que $\langle \Delta \hat{H} \rangle_{\hat{H}_{ext}} = 0$. Para el otro término de la exponencial,

$$\begin{aligned}
\frac{\beta^2}{2} \langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle_{\hat{H}_{ext}} &\approx \frac{\beta^2 t^2}{2} \left\langle \sum_{\langle i,o \rangle} \delta \Phi_i^\dagger \delta \Phi_o \sum_{\langle j,o \rangle} \delta \Phi_j^\dagger \delta \Phi_o \right\rangle_{\hat{H}_{ext}} \\
&= \frac{\beta^2 t^2}{2} \delta \Phi_o^\dagger \left\langle \sum_{\langle i,o \rangle} \delta \Phi_i \sum_{\langle j,o \rangle} \delta \Phi_j^\dagger \right\rangle_{\hat{H}_{ext}} \delta \Phi_o \\
&= \frac{\beta}{2} \delta \Phi_o \left\langle \beta t^2 \sum_{\langle i,o \rangle} \sum_{\langle j,o \rangle} \begin{pmatrix} \delta \hat{b}_i \delta \hat{b}_j^\dagger & \delta \hat{b}_i \delta \hat{b}_j \\ \delta \hat{b}_i^\dagger \delta \hat{b}_j^\dagger & \delta \hat{b}_i^\dagger \delta \hat{b}_j \end{pmatrix} \right\rangle_{\hat{H}_{ext}} \delta \Phi_o \\
&\approx \frac{\beta}{2} \delta \Phi_o^\dagger \Delta \delta \Phi_o.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

En la anterior ecuación se definió la función de hibridación como

$$\Delta = \begin{pmatrix} \beta t^2 \sum_{\langle i,o \rangle} \sum_{\langle j,o \rangle} \langle \delta \hat{b}_i^\dagger \delta \hat{b}_j \rangle_{\hat{H}_{ext}} & \beta t^2 \sum_{\langle i,o \rangle} \sum_{\langle j,o \rangle} \langle \delta \hat{b}_i \delta \hat{b}_j \rangle_{\hat{H}_{ext}} \\ \beta t^2 \sum_{\langle i,o \rangle} \sum_{\langle j,o \rangle} \langle \delta \hat{b}_i^\dagger \delta \hat{b}_j^\dagger \rangle_{\hat{H}_{ext}} & \beta t^2 \sum_{\langle i,o \rangle} \sum_{\langle j,o \rangle} \langle \delta \hat{b}_i^\dagger \delta \hat{b}_j \rangle_{\hat{H}_{ext}} \end{pmatrix}. \tag{3.23}$$

Notar que Δ definida de esta forma cumple $\Delta_{11} = \Delta_{22}$, $\Delta_{12} = \Delta_{21}^*$. Esto implica que implica que la función de partición del sistema efectivo se puede escribir como

$$\begin{aligned}
Z_{eff} &= \text{Tr}_o \left[e^{-\beta \hat{H}_o} \langle e^{-\beta \Delta \hat{H}} \rangle_{\hat{H}_{ext}} \right] \\
&= \text{Tr}_o \left[e^{-\beta (\hat{H}_o - \frac{1}{2} \delta \Phi_o^\dagger \Delta \delta \Phi_o)} \right].
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Recordando que $Z_{eff} = \text{Tr}_o [e^{-\beta \hat{H}_{eff}}]$, se llega a la expresión del Hamiltoniano efectivo

$$\hat{H}_{eff} = -\frac{1}{2} \delta \Phi_o^\dagger \Delta \delta \Phi_o + \frac{U}{2} \hat{n}_o (\hat{n}_o - 1) - \mu \hat{n}_o - z t \Psi^\dagger \Phi_o + z t |\psi|^2. \tag{3.25}$$

Expandiendo el Hamiltoniano de forma explícita, se tiene

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{eff} &= -\frac{1}{2}(\delta\hat{b}_o^\dagger\delta\hat{b}_o + \delta\hat{b}_o\delta\hat{b}_o^\dagger)\Delta_{11} - \frac{1}{2}\delta\hat{b}_o^\dagger\delta\hat{b}_o^\dagger\Delta_{12} - \frac{1}{2}\delta\hat{b}_o\delta\hat{b}_o\Delta_{12}^* \\
 &\quad + \frac{U}{2}\hat{n}_o(\hat{n}_o - 1) - \mu\hat{n}_o - zt(\Psi^*\hat{b}_o + \Psi\hat{b}_o^\dagger) + zt|\Psi|^2 \\
 &= -\frac{1}{2}[(\hat{b}_o^\dagger - \Psi^*)(\hat{b}_o - \Psi) + (\hat{b}_o - \Psi)(\hat{b}_o^\dagger - \Psi^*)]\Delta_{11} \\
 &\quad - \frac{1}{2}(\hat{b}_o^\dagger - \Psi^*)(\hat{b}_o^\dagger - \Psi^*)\Delta_{12} - \frac{1}{2}(\hat{b}_o - \Psi)(\hat{b}_o - \Psi)\Delta_{12}^* \\
 &\quad + \frac{U}{2}\hat{n}_o(\hat{n}_o - 1) - \mu\hat{n}_o - zt(\Psi^*\hat{b}_o + \Psi\hat{b}_o^\dagger) + zt|\Psi|^2 \\
 &= \left(\Psi^*\hat{b}_o + \Psi\hat{b}_o^\dagger - \hat{n}_o - \frac{1}{2} - |\Psi|^2\right)\Delta_{11} + \left(\Psi^*\hat{b}_o^\dagger - \frac{1}{2}\hat{b}_o^\dagger\hat{b}_o^\dagger - \Psi^*2\right)\Delta_{12} \\
 &\quad + \left(\Psi\hat{b}_o - \frac{1}{2}\hat{b}_o\hat{b}_o - \Psi^2\right)\Delta_{12}^* + \frac{U}{2}\hat{n}_o(\hat{n}_o - 1) - \mu\hat{n}_o - zt(\Psi^*\hat{b}_o + \Psi\hat{b}_o^\dagger) + zt|\Psi|^2.
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

La característica principal de la teoría B+U es la imposición de que el valor del condensado y la función de Green del sistema completo coincidan con las cantidades correspondientes del sistema efectivo:

$$\Psi = \langle \hat{b}_o \rangle_{\hat{H}_{eff}}, \tag{3.27}$$

$$G_c^{o,o}(\omega_n = 0) = -\langle \Phi_o \Phi_o^\dagger \rangle_{\hat{H}_{eff}}(\omega_n = 0) + \Psi\Psi^\dagger. \tag{3.28}$$

Notamos que este Hamiltoniano es equivalente al modelo BDMFT (3.11) en el límite

$$\Delta(\tau - \tau') \rightarrow \Delta\delta(\tau - \tau'), \tag{3.29}$$

donde ahora Δ es independiente del tiempo. Con esto, la acción de sistema efectivo es:

$$\begin{aligned}
 S_{eff} &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\hbar b_o^*(\tau) \partial_\tau b_o(\tau) - zt\Psi^\dagger \Phi_o(\tau) + \frac{U}{2}n_o(\tau)(n_o(\tau) - 1) \right. \\
 &\quad \left. - \mu n_o(\tau) + zt|\Psi|^2 - \frac{1}{2}\delta\Phi_o^\dagger(\tau)\Delta\delta\Phi_o(\tau) \right).
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

Debido a la relación del sistema descrito por (3.25) con el modelo BDMFT, es posible escribir una ecuación de Dyson a partir de (3.13). Sin embargo, como Δ ahora es independiente de tiempo, la ecuación de Dyson solo debe de ser evaluada a una frecuencia de Matsubara. Para que las matrices Δ y G_c^{-1} tengan la mismas propiedades de simetría, se evalúa a frecuencia cero. Esto nos da la ecuación de Dyson

$$\Delta = \Sigma(i\omega_n = 0) - \mu\mathbf{1} + G_c^{-1}(i\omega_n = 0), \tag{3.31}$$

de donde se puede calcular Δ en función de las autoenergías Σ , utilizando además las definiciones

$$G_c(i\omega_n = 0) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k G(i\omega_n = 0, k), \tag{3.32}$$

$$G(i\omega_n = 0, k)^{-1} = G_0^{-1}(k, i\omega_n = 0) - \Sigma, \quad (3.33)$$

donde $G_0^{-1}(k, i\omega_n) = (\mu - \varepsilon(k))\mathbf{I} + i\omega_n\sigma_z$ es la función de Green local y $\varepsilon(k)$ es la relación de dispersión.

Para resolver el problema, se considera el gran potencial $\Omega[\psi, \Sigma]$, el cual se minimiza variando las autoenergías Σ . Según la teoría del BDMFT, el mínimo con respecto al término cinético $\frac{\delta\Omega}{\delta(\psi)} = 0$ ya es tomado en cuenta por la condición de autoconsistencia (3.27). Para simplificar la minimización, nosotros escribimos $\Omega[\Sigma, \psi] = \Omega[\Delta[\Sigma], \psi]$ y el potencial se varía con respecto a las hibridaciones.

$$\begin{aligned} \delta\Omega &= \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{11}}\delta\Delta_{11} + \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{12}}\delta\Delta_{12} + \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{12}^*}\delta\Delta_{12}^* \\ &= \sum_{\Delta_i} \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_i}\delta\Delta_i, \end{aligned} \quad (3.34)$$

donde $\Delta_i \in \{\Delta_{11}, \Delta_{12}, \Delta_{12}^*\}$. Integrando

$$\begin{aligned} \implies \Omega &= \sum_{\Delta_i} \int \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_i} d\Delta_i \\ &= \sum_{\Delta_i} \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_i} \Delta_i - \sum_{\Delta_i} \int \Delta_i d\left(\frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_i}\right) \\ &\approx \sum_{\Delta_i} \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_i} \Delta_i. \end{aligned} \quad (3.35)$$

El último término del penúltimo renglón en (3.35) incluye segundas derivadas con respecto a las Δ , que se desprecian, como se muestra a continuación. El gran potencial es $\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\Delta, \psi) = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left[e^{-\beta H_{eff}(\Delta, \psi)} \right]$. Se tiene que $\frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_i} = \left\langle \frac{\partial H_{eff}}{\partial \Delta_i} \right\rangle_{H_{eff}}$, por lo que

$$\begin{aligned} d\left(\frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_i}\right) &= \sum_{\Delta_j} \frac{\delta^2\Omega}{\delta\Delta_j\delta\Delta_i} d\Delta_j \\ &= \sum_{\Delta_j} \frac{1}{Z_{eff}} \text{Tr} \left[-\beta e^{-\beta H_{eff}} \frac{\partial H_{eff}}{\partial \Delta_j} \frac{\partial H_{eff}}{\partial \Delta_i} + e^{-\beta H_{eff}} \frac{\partial^2 H_{eff}}{\partial \Delta_j \partial \Delta_i} \right] d\Delta_j \\ &= -\beta \sum_{\Delta_j} \left\langle \frac{\partial H_{eff}}{\partial \Delta_j} \frac{\partial H_{eff}}{\partial \Delta_i} \right\rangle_{H_{imp}} d\Delta_j \\ &\approx 0, \end{aligned} \quad (3.36)$$

ya que los términos $\left\langle \frac{\partial H_{eff}}{\partial \Delta_j} \frac{\partial H_{eff}}{\partial \Delta_i} \right\rangle_{H_{imp}}$ son de la forma $\langle \delta b_o^{(\dagger)} \delta b_o^{(\dagger)} \delta b_o^{(\dagger)} \delta b_o^{(\dagger)} \rangle_{H_{imp}} \approx 0$. Con esto, el gran potencial es

$$\Omega(\Delta, \psi) = \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{11}}\Delta_{11} + \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{12}}\Delta_{12} + \left(\frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{12}}\right)^* \Delta_{12}^*, \quad (3.37)$$

$$\frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{11}} = \left\langle \psi^* \hat{b}_o + \psi \hat{b}_o^\dagger - \hat{b}_o^\dagger \hat{b}_o - \frac{1}{2} - |\psi|^2 \right\rangle_{\hat{H}_{eff}}, \quad (3.38)$$

$$\frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{12}} = \left\langle \psi^* \hat{b}_o^\dagger - \frac{1}{2} \hat{b}_o^\dagger \hat{b}_o^\dagger - \frac{1}{2} \psi^{*2} \right\rangle_{H_{eff}}. \quad (3.39)$$

Durante la minimización, el valor de las componentes de Δ se acotan, de manera que no rebasen la energía cinética de doble salto:

$$\begin{aligned} |\Delta_{12}| \leq |\Delta_{11}| &\leq \frac{(zt)^2}{2} \langle \delta \hat{b}_o^\dagger \delta \hat{b}_o + \delta \hat{b}_o \delta \hat{b}_o^\dagger \rangle_{\hat{H}_{eff}} \\ &= (zt)^2 \left\langle \hat{n}_o - \psi^* \hat{b}_o - \psi \hat{b}_o^\dagger + \frac{1}{2} + |\psi|^2 \right\rangle_{\hat{H}_{eff}}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

3.2.1. Algoritmo autoconsistente a $T = 0$

Con las ecuaciones de la sección anterior se obtiene el algoritmo autoconsistente de la teoría B+U, mediante el cual se puede obtener la función de hibridación Δ y el parámetro ψ a temperatura cero. Para la función de onda, se emplea el ansatz de Gutzwiller. Los pasos son:

1. Se inicializa con $\Delta_{11} = \Delta_{12} = 0$ y ψ igual al valor calculado en la aproximación de desacoplamiento.
2. Se calcula un nuevo valor de ψ a partir del Hamiltoniano efectivo (3.25) y el valor de expectación del operador de aniquilación (3.27).
3. Se minimiza el gran potencial de la ecuación (3.37) con respecto a Δ_{11} y Δ_{12} , tomando en cuenta la condición (3.40). En este cálculo se deja ψ constante.
4. Se calcula un nuevo valor de ψ con el nuevo valor de Δ a partir del (3.25) y (3.27).
5. La minimización del gran potencial y el cálculo de ψ se repiten hasta obtener convergencia en ψ .

El diagrama de flujo del algoritmo se muestra en la figura 3.2.

3.2.2. Diagrama de fases

En las figuras 3.3 y 3.4 se muestran los resultados del modelo de Bose-Hubbard bajo la aproximación B+U a temperatura cero.

La comparación de las fronteras de transición del estado de Mott al superfluido se puede ver en la figura 3.5, para la aproximación de desacoplamiento (campo medio) y la aproximación B+U.

La aproximación del B+U sigue describiendo dos fases para el modelo de Bose-Hubbard. Sin embargo, las fronteras de transición del aislante de Mott al superfluido ocurren a un mayor zt . Esto nos dice que las fluctuaciones de las densidades, despreciadas en la aproximación de desacoplamiento, son importantes al describir donde ocurre la transición de fase.

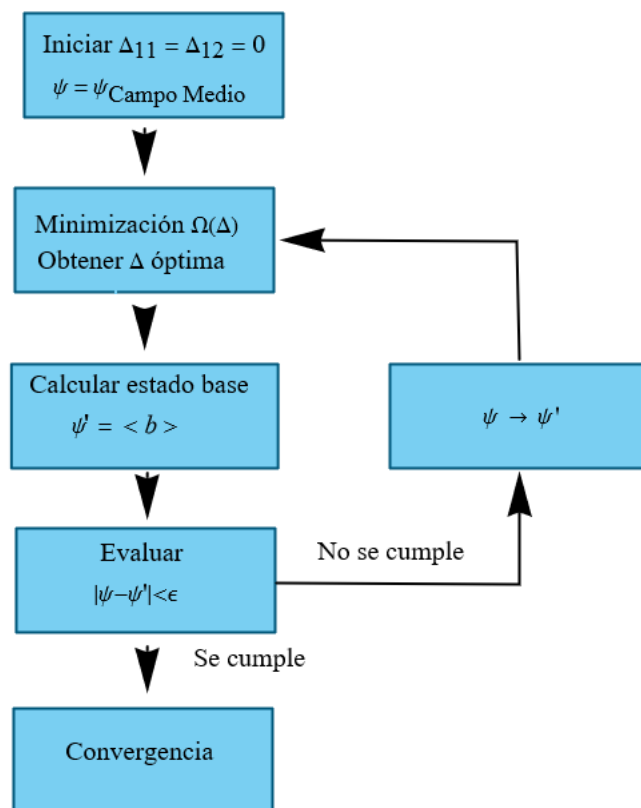


Figura 3.2: Diagrama de flujo del algoritmo B+U.

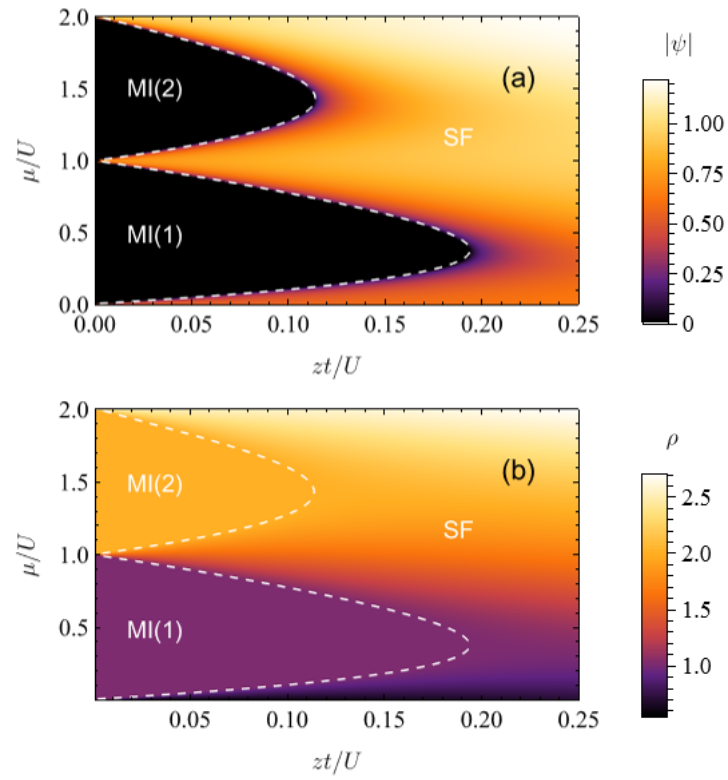


Figura 3.3: Diagrama de fases del modelo de Bose-Hubbard en la aproximación B+U. (a) Parámetro de orden superfluido. (b) Densidad por sitio.

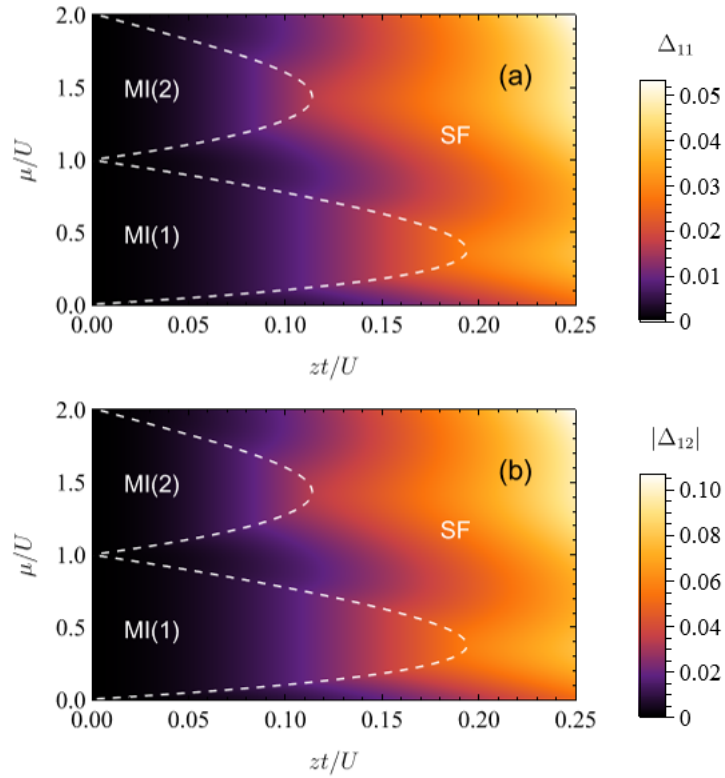


Figura 3.4: Funciones de hibridación (a) Δ_{11} y (b) Δ_{12} del modelo de Bose-Hubbard, calculadas mediante la teoría B+U.

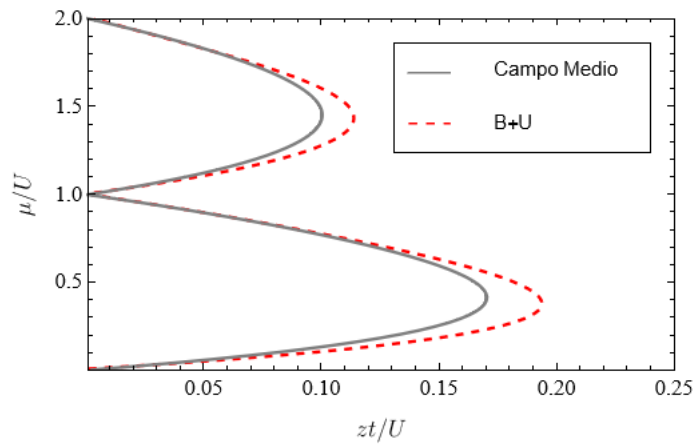


Figura 3.5: Fronteras de transición del modelo de Bose-Hubbard, utilizando la aproximación de desacoplamiento (campo medio) y la teoría B+U.

Según [4], la teoría B+U reproduce con una precisión de aproximadamente el 1 % la transición cerca de las puntas de los lóbulos, para redes en tres y dos dimensiones, mejorando la precisión en las demás zonas. Cuando las fluctuaciones en la densidad son pequeñas, la física a bajas energías es capturada correctamente, como se muestra al hacer la aproximación a segundo orden (3.21). Las funciones de hibridación mostradas en la figura 3.4 representan a las fluctuaciones de las densidades. Debido a su definición (3.23), las fluctuaciones por sitio se obtienen al hacer el cociente $\Delta/2$, lo que se debe de tomar en cuenta al calcular las cantidades observables por sitio. En el límite atómico $zt/U \rightarrow 0$, las funciones de hibridación son nulas y se recupera la teoría de campo medio. En este caso el número de átomos por sitio no fluctúa y se mantiene en un número entero. Conforme aumenta el tunelaje, las fluctuaciones incrementan de manera suave, siendo mayores en la fase superfluida, donde las densidades no están conmensuradas.

Cerca de los puntos críticos $(zt/U)_c$ a densidades $n = 1$ y $n = 2$, se obtuvo el comportamiento del parámetro de orden ψ como función de la energía de tunelaje zt . Esto se muestra en la figura 3.6, donde se hicieron los ajustes con una recta de pendiente 0.5. La concordancia entre los datos de la simulación y el ajuste indican que el coeficiente crítico β definido por $\psi \propto [(zt/U) - (zt/U)_c]^\beta$ tiene un valor de $\beta = 0.5$ en la teoría B+U, al igual que en la aproximación de desacoplamiento.

Una de las limitantes de la teoría B+U es que, al igual que la teoría BDMFT, se basa en cantidades locales. Por consiguiente, no puede capturar la física correspondiente a longitudes de onda grandes. A temperaturas diferentes de cero, la falta dependencia temporal hace que la precisión de la teoría B+U disminuya en comparación con el BDMFT, pero sigue mejorando los resultados en comparación con la aproximación de desacoplamiento.

3.3. Generalización de la teoría B+U a más de un modo

Es posible alterar la estructura de una red óptica de manera que aparezcan diferentes modos espaciales, por ejemplo, introduciendo la red óptica en una cavidad. En esta situación, los sitios quedan clasificados en diferentes modos, formándose diferentes subredes. En esta sección nosotros proponemos una extensión a las ecuaciones del B+U, para el caso en que el sistema tiene más de un modo espacial. La generalización consiste en aplicar la teoría B+U a un sitio de cada modo, sin tratar exactamente con las correlaciones entre diferentes sitios. De esta manera, los sitios de los diferentes modos interactúan mediante el campo efectivo del B+U.

Consideremos un sistema con Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_s} \hat{\mathcal{H}}_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j, \quad (3.41)$$

donde la suma sobre i es sobre los distintos N_s sitios y $\hat{\mathcal{H}}_i$ solo incluye operadores locales. Para el modelo de Bose-Hubbard, $\hat{\mathcal{H}}_i = \frac{U}{2} \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu n_i$. Haciendo la descomposición $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j = \psi_i \hat{b}_j^\dagger + \psi_j^* \hat{b}_i - \psi_i^* \psi_j + \delta \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$ y separando el Hamiltoniano en sus diferentes modos, escribimos

$$\hat{H} = \sum_{\xi=1}^R \sum_{i \in \xi} [\hat{\mathcal{H}}_{\xi,i} - zt \hat{\beta}_{\xi,i}] - t \sum_{\langle i,j \rangle} \delta \hat{b}_i^\dagger \delta \hat{b}_j, \quad (3.42)$$

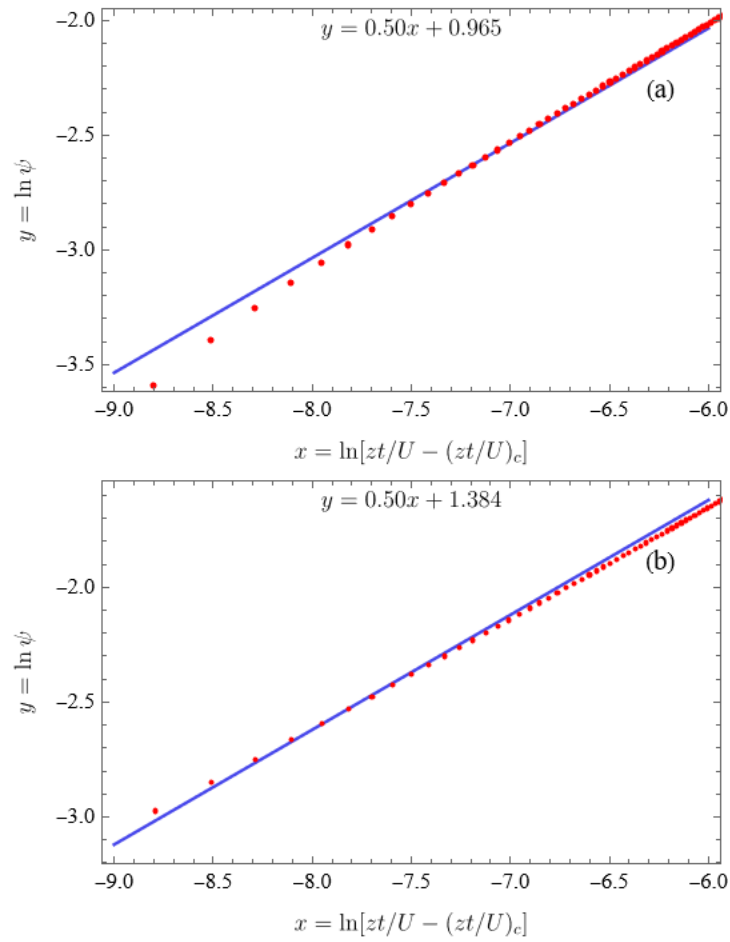


Figura 3.6: Logaritmo del parámetro de orden superfluido ψ , variando la energía de tunelaje zt/U cerca de los puntos multicríticos, para (a) $n = 1$ y (b) $n = 2$. Los puntos rojos son los datos obtenidos por la simulación, que se ajustan por una recta (azul). La pendiente de la recta da el valor del coeficiente crítico β .

donde ahora la suma sobre ξ es sobre los diferentes R modos. Los operadores quedan denotados por el subíndice i , que corresponde al sitio i , y el subíndice ξ , referente al modo. $\hat{\beta}_{\xi,i}$ contiene a los términos cinéticos y está dado por

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_{\xi,i} = & \frac{1}{2} [(\psi_{\xi+1}^* + \psi_{\xi-1}^*)\hat{b}_{\xi,i} + (\psi_{\xi+1} + \psi_{\xi-1})\hat{b}_{\xi,i}^\dagger] \\ & - \frac{1}{4} [(\psi_{\xi+1}^* + \psi_{\xi-1}^*)\psi_\xi + (\psi_{\xi+1} + \psi_{\xi-1})\psi_\xi^*]. \end{aligned} \quad (3.43)$$

En este caso, cada modo puede tener su propio parámetro de orden superfluido $\psi_\xi = \langle \hat{b}_{\xi,i} \rangle$. Por condiciones periódicas, $b_1 = b_{R+1}$. Debido a que se toman sólo los primeros vecinos, el acoplamiento de operadores del modo ξ' solo se da con operadores de $\xi' - 1$ y $\xi' + 1$.

Consideramos R sitios distintos y de diferentes modos. Los operadores de estos sitios se denotan por el subíndice primado ξ' . Notar que los subíndices ξ y ξ' corresponden al mismo modo espacial. Nuevamente se separa el sistema en $\hat{H} = \hat{H}_R + \Delta\hat{H} + \hat{H}_{ext}$, donde $\hat{H}_R = \sum_{\xi'=1}^R [\mathcal{H}_{\xi'} - zt\hat{\beta}_{\xi'}]$ incluye a los operadores locales de R sitios primados. $\Delta\hat{H}$ incluye a los términos con productos de los operadores del resto del sistema con los operadores de los sitios ξ' .

$$\begin{aligned} \Delta\hat{H} = & -\lambda t \sum_{\xi'=1}^R \sum_{\langle \xi',j \rangle} \left[\delta\hat{b}_{\xi'}^\dagger (\delta\hat{b}_{\xi+1,j} + \delta\hat{b}_{\xi-1,j}) + (\delta\hat{b}_{\xi+1,j}^\dagger + \delta\hat{b}_{\xi-1,j}^\dagger) \delta\hat{b}_{\xi'} \right] \\ = & -\lambda t \sum_{\xi'=1}^R \sum_{\langle \xi',j \rangle} (\delta\Phi_{\xi-1,j}^\dagger + \delta\Phi_{\xi+1,j}^\dagger) \delta\Phi_{\xi'}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Se recuerda la notación $\delta\Phi_i = \begin{pmatrix} \delta\hat{b}_i \\ \delta\hat{b}_i^\dagger \end{pmatrix}$. En la ecuación anterior $\lambda = \frac{1}{2}$, si $R = 2$, y $\lambda = 1$, si $R > 2$, de manera que no se cuente doble para el caso de dos modos. Por otra parte, \hat{H}_{ext} incluye el resto de los términos con operadores de sitios diferentes a los ξ' .

Realizando la separación de la función de partición $Z = Z_{ext}Z_{eff}$, se tiene

$$\begin{aligned} Z_{eff} = & \frac{Z}{Z_{ext}} \\ \approx & \text{Tr}_R [e^{-\beta\hat{H}_R} \langle e^{-\beta\Delta\hat{H}} \rangle_{\hat{H}_{ext}}], \end{aligned} \quad (3.45)$$

donde en la traza Tr_R se suma sobre los índices de los R sitios, en la base de número. Mediante una expansión en cumulantes y tomando en cuenta que $\langle \Delta\hat{H} \rangle_{\hat{H}_{ext}} = 0$, se sigue que

$$\begin{aligned} Z_{eff} = & \text{Tr}_R [e^{-\beta\hat{H}_{eff}}] \\ \approx & \text{Tr}_R \left[e^{-\beta[\hat{H}_R - \frac{\beta}{2} \langle (\Delta\hat{H})^2 \rangle_{\hat{H}_{ext}}]} \right]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Evaluando el valor de expectación en la exponencial

$$\begin{aligned}
\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle_{\hat{H}_{ext}} &= \lambda^2 t^2 \left\langle \sum_{\xi'=1}^R \sum_{\zeta'=1}^R \sum_{\langle \xi', j \rangle} \sum_{\langle \zeta', k \rangle} \left[(\delta \Phi_{\xi-1, j}^\dagger + \delta \Phi_{\xi+1, j}^\dagger) \delta \Phi_{\xi'} \right] \right. \\
&\quad \times \left. \left[(\delta \Phi_{\zeta-1, k}^\dagger + \delta \Phi_{\zeta+1, k}^\dagger) \delta \Phi_{\zeta'} \right] \right\rangle_{\hat{H}_{ext}} \\
&= \lambda^2 t^2 \sum_{\xi'=1}^R \sum_{\zeta'=1}^R \delta \Phi_{\xi'}^\dagger \\
&\quad \times \left\langle \sum_{\langle \xi', j \rangle} \sum_{\langle \zeta', k \rangle} (\delta \Phi_{\xi-1, j} + \delta \Phi_{\xi+1, j}) (\delta \Phi_{\zeta-1, k}^\dagger + \delta \Phi_{\zeta+1, k}^\dagger) \right\rangle_{\hat{H}_{ext}} \delta \Phi_{\zeta'}.
\end{aligned} \tag{3.47}$$

Por el momento se consideran R sitios que no son vecinos más cercanos. Los términos de la suma con $\xi' \neq \zeta'$ se desprecian, ya que involucran a operadores de sitios que no son primeros vecinos entre ellos. Consideramos que los sitios ξ' sólo interactúan mediante el campo medio efectivo, por lo que no se toman en cuenta las siguientes correlaciones:

$$\left\langle \sum_{\langle \xi', j \rangle} \sum_{\langle \zeta', k \rangle} (\delta \Phi_{\xi-1, j} + \delta \Phi_{\xi+1, j}) (\delta \Phi_{\zeta-1, k}^\dagger + \delta \Phi_{\zeta+1, k}^\dagger) \right\rangle_{\hat{H}_{ext}} \approx 0. \tag{3.48}$$

Por lo tanto, el Hamiltoniano del sistema efectivo queda como

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\xi'=1}^R \left\{ -z t \hat{\beta}_{\xi'} + \hat{\mathcal{H}}_{\xi'} - \frac{1}{2} \delta \Phi_{\xi'}^\dagger \Delta_{\xi'} \delta \Phi_{\xi'} \right\}, \tag{3.49}$$

con

$$\Delta_{\xi'} = \lambda^2 t^2 \beta \sum_{\langle \xi', j \rangle} \sum_{\langle \xi', i \rangle} \left\langle [\delta \Phi_{\xi'+1, j} + \delta \Phi_{\xi'-1, j}] [\delta \Phi_{\xi'+1, i}^\dagger + \delta \Phi_{\xi'-1, i}^\dagger] \right\rangle_{Z_{ext}}. \tag{3.50}$$

Se observa que (3.49) corresponde a R Hamiltonianos del B+U de un modo.

Se imponen las condiciones de autoconsistencia

$$\psi_{\xi} \equiv \langle \hat{b}_{\xi'} \rangle_{H_{eff}}, \tag{3.51}$$

$$\rho_{\xi} \equiv \langle \hat{n}_{\xi'} \rangle_{H_{eff}}. \tag{3.52}$$

para $\xi' = 1, \dots, R$ y se minimiza el gran potencial $\Omega[\Delta_{\xi'}, \psi_{\xi}]$ con respecto a las $\Delta_{\xi'}$. El potencial queda dado por

$$\Omega = \sum_{\xi'=1}^R \left\{ \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta_{\xi'_{11}}} \Delta_{\xi'_{11}} + \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta_{\xi'_{12}}} \Delta_{\xi'_{12}} + \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta_{\xi'_{12}}^*} \Delta_{\xi'_{12}}^* \right\}. \tag{3.53}$$

Las derivadas parciales se calculan mediante $\frac{\delta \Omega}{\delta \Delta_i} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}_{eff}}{\partial \Delta_i} \right\rangle_{\hat{H}_{eff}}$

Por último, se imponen las siguientes cotas en las componentes de la función de hibridación, de manera que no se exceda la energía cinética de doble salto:

$$|\Delta_{\xi_{12}}^{\xi'}| \leq |\Delta_{\xi_{11}}^{\xi'}| \leq \frac{(zt)^2}{2} \langle \delta \hat{b}_{\xi'}^\dagger \delta \hat{b}_{\xi'} + \delta \hat{b}_{\xi'} \delta \hat{b}_{\xi'}^\dagger \rangle_{H_{eff}}. \quad (3.54)$$

En la sección 4.1.2 se aplica la teoría B+U a un sistema de dos modos espaciales y se comparan los resultados con la aproximación de desacoplamiento.

4 Átomos en redes ópticas dentro de una cavidad

Colocar una red óptica con un gas ultrafrío dentro de una cavidad permite aumentar el acoplamiento entre los campos de luz y los átomos (figura 4.1). La dispersión de la luz por los átomos hacia la cavidad modifica el potencial de la red, provocando estados autoconsistentes entre la luz y la materia. En este esquema, es posible la formación de diferentes fases de la materia [5, 6, 34, 35], donde compiten procesos de corto y largo alcance. Escogiendo adecuadamente el perfil espacial de los campos inducidos por los láseres y la cavidad, es posible construir arbitrariamente estructuras de subredes y controlar de manera artificial las interacciones de muchos cuerpos entre los átomos; con esto se puede provocar el rompimiento de la simetría espacial y realizar fases moduladas espacialmente, como la onda de densidad de carga y el supersólido.

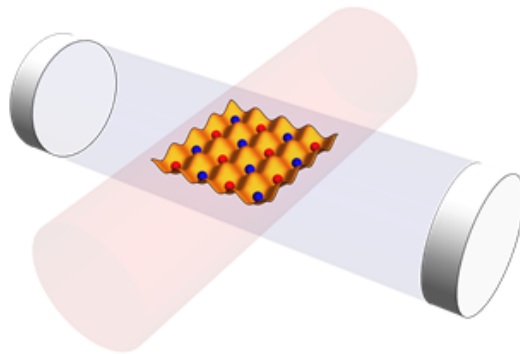


Figura 4.1: Átomos ultrafríos en una red óptica dentro de una cavidad. El acoplamiento con el campo cuántico de la luz induce diferentes modos atómicos (bolas de colores).

En el presente capítulo se estudia una posible configuración de átomos bosónicos ultrafríos dentro de una cavidad, utilizando las herramientas presentadas en los capítulos anteriores, que son la aproximación de desacoplamiento de campo medio y la teoría B+U. Como resultado principal, se muestra la modificación del diagrama de fases al aplicar la teoría B+U, con respecto a los resultados de [5].

4.1. Dispersión de luz a 90°

El modelo a considerar se toma de [5], el cual ha sido realizado experimentalmente en [36]. El láser bombea luz a 90° con respecto al eje de una cavidad de un solo modo, con los átomos localizados en los mínimos de difracción del campo de la cavidad. Esto genera una estructura de dos subredes cuadradas, con sus respectivos modos espaciales, que denotamos por O (sitios impares) y E (sitios pares).

El Hamiltoniano efectivo que describe a este sistema es [5]

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}^b + \frac{g_{eff}|J_D|^2}{N_s} \left[\sum_{\nu} (\hat{n}_{O,\nu} - \hat{n}_{E,\nu}) \right]^2, \quad (4.1)$$

con la suma de ν sobre $N_s/2$ sitios. Los operadores con subíndice O/E actúan sobre los sitios O/E . N_s es el número total de sitios y H_b es el Hamiltoniano de Bose Hubbard: $\hat{H}^b = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$. El traslape J_D está dado por $J_D = \int \omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) u_c^*(\mathbf{x}) u_p(\mathbf{x}) \omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d^n x$, con $u_c(\mathbf{x})$ y $u_p(\mathbf{x})$ los perfiles de los campos del láser de bombeo y de la cavidad, respectivamente. g_{eff} es una constante de acoplamiento efectivo.

El modelo (4.1) presenta cuatro posibles fases: el superfluido, en el que la función de onda de muchos cuerpos está distribuida por toda la red, hay coherencia de fase de largo alcance, las fluctuaciones de las densidades por sitio son grandes y el espectro es continuo; el aislante de Mott, una fase incompresible en el que el número de átomos por sitio es entero, los átomos permanecen localizados en los sitios, se suprime el tunelaje y las fluctuaciones de la densidad son pequeñas; la onda de densidad, fase que es similar al aislante de Mott, pero el sistema deja de ser homogéneo y se forma una estructura de subredes, con diferentes densidades por sitio; el supersólido, que es la combinación del superfluido con el orden de onda de densidad, es decir, se tiene un superfluido donde las densidades por sitio son diferentes en cada subred. Adicionalmente, para la fase de supersólido y onda de densidad, las diferentes densidades en las subredes forman planos de Bragg, los cuales difractan la luz hacia la cavidad, minimizando la energía del sistema.

4.1.1. Aproximación de desacoplamiento

Para desacoplar los operadores de salto del primer término de \hat{H}_b y los operadores de número de diferentes sitios, se utiliza la aproximación $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j \approx \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle \hat{b}_j + \langle \hat{b}_j \rangle \hat{b}_i^\dagger - \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle \langle \hat{b}_j \rangle$ y $\hat{n}_i \hat{n}_j \approx \langle \hat{n}_i \rangle \hat{n}_j + \langle \hat{n}_j \rangle \hat{n}_i - \langle \hat{n}_j \rangle \langle \hat{n}_i \rangle$.

Dado que en el sistema aparecen los dos modos O y E , introducimos los parámetros superfluidos $\psi_{O/E} = \langle \hat{b}_{O/E} \rangle$ y las densidades $\rho_{O/E} = \langle \hat{n}_{O/E} \rangle$, que serán determinadas autoconsistentemente.

Se obtiene el siguiente Hamiltoniano efectivo [5]:

$$\hat{H}_{eff} \approx \hat{H}_{eff}^O + \hat{H}_{eff}^E, \quad (4.2)$$

$$\hat{H}_{eff}^\xi = \frac{N_s}{2} \left[-zt\hat{\beta}_\xi - \mu_\xi n_\xi + \frac{U_\xi}{2} \hat{n}_\xi (\hat{n}_\xi - 1) - \frac{2g_{eff}|J_D|^2}{N_s} \rho_\xi \hat{n}_\xi - g_{eff} c_{D,\xi} \right], \quad (4.3)$$

$$\hat{\beta}_{O/E} = \psi_{E/O}^* \hat{b}_{O/E} + \psi_{E/O} \hat{b}_{O/E}^\dagger - \frac{1}{2}(\psi_O^* \psi_E + \psi_O \psi_E^*), \quad (4.4)$$

$$\mu_{O/E} = \mu \pm 2g_{eff}|J_D|^2 \Delta\rho, \quad (4.5)$$

$$U_{O/E} = U + \frac{2g_{eff}|J_D|^2}{N_s}, \quad (4.6)$$

con $\xi = O/E$ y $c_{D,O/E} = \pm|J_D|^2 \Delta\rho \rho_{O/E} - |J_D|^2 \rho_{O/E}^2 / N_s$. Se define el parámetro de orden de onda de densidad (DW) como $\Delta\rho = (\rho_O - \rho_E)/2$, de manera que cuando $\Delta\rho \neq 0$, las densidades atómicas adoptan un patrón de tablero de ajedrez en los sitios pares e impares. Adicionalmente, se tienen los parámetros de orden superfluidos $\psi_{O/E}$, que indican la aparición de esta fase. Estos parámetros permiten identificar cuatro diferentes fases: aislante de Mott ($\Delta\rho = 0$, $|\psi_{O/E}| = 0$), superfluido ($\Delta\rho = 0$, $|\psi_{O/E}| \neq 0$), onda de densidad ($\Delta\rho \neq 0$, $|\psi_{O/E}| = 0$) y la combinación del superfluido y la onda de densidad, el supersólido (SS) ($\Delta\rho \neq 0$, $|\psi_{O/E}| \neq 0$).

Aplicando un algoritmo autoconsistente para determinar el valor de los parámetros de orden superfluidos ψ_O , ψ_E y de las densidades ρ_O , ρ_E , se calculó el promedio de los parámetros de orden superfluido $\Sigma\psi = |\Psi_O + \Psi_E|/2$, el parámetro de orden de densidad de carga $\Delta\rho = |\rho_O - \rho_E|/2$ y el promedio de la densidad por sitio $\bar{\rho} = (\rho_O + \rho_E)/2$. Estos resultados se muestran en la figura 4.2. El algoritmo consistió en suponer un valor inicial de ψ_O , ψ_E , ρ_O y ρ_E , y calcular el estado base del Hamiltoniano con el ansatz de Gutzwiller. Posteriormente se volvieron a calcular estas cuatro cantidades a partir de sus definiciones como valores de expectación de $\hat{b}_{O/E}$ y $\hat{n}_{O/E}$. El ciclo se repitió hasta obtener convergencia.

4.1.2. Aproximación B+U

En esta sección se utiliza la aproximación que propusimos en 3.3, de la teoría B+U de un sistema de dos modos al problema de la red en la cavidad. El Hamiltoniano efectivo y

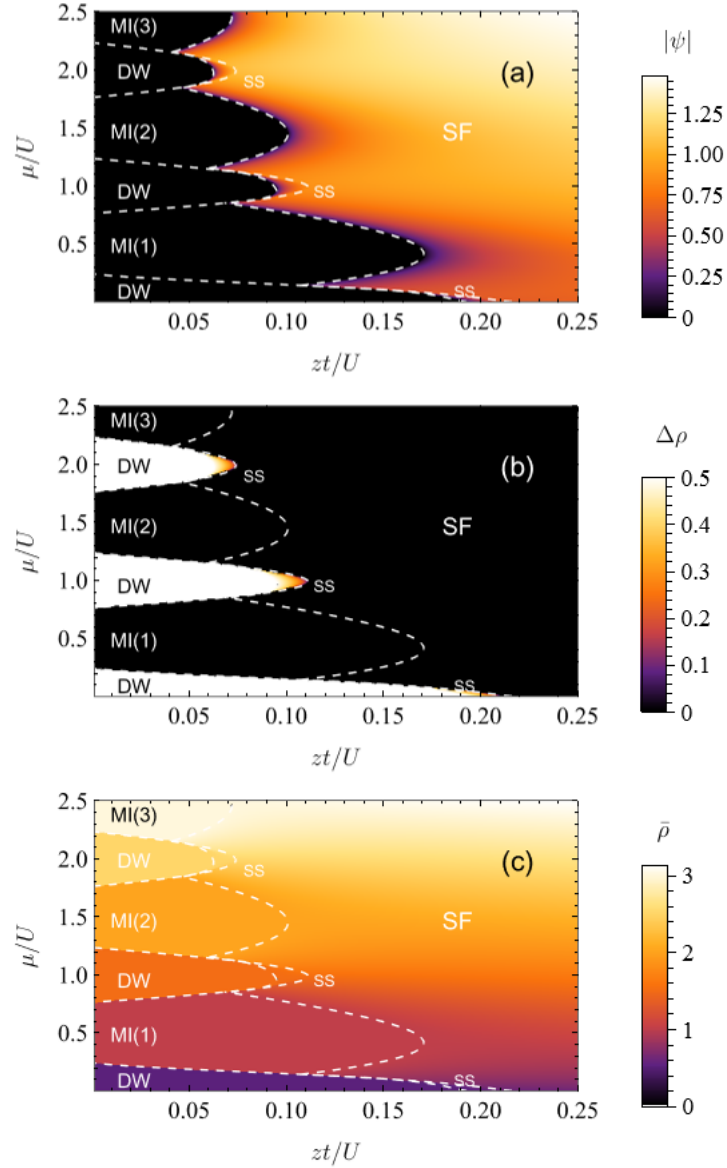


Figura 4.2: Resultados de la simulación utilizando la aproximación de campo medio, con $g_{eff} = -0.25$ y $N_s = 100$. (a) Parámetro de orden superfluido $\Sigma\psi = |\psi_O + \psi_E|/2$. (b) Parámetro de orden de la onda de densidad $\Delta\rho = |\rho_O - \rho_E|/2$. (c) Densidad promedio $\bar{\rho} = (\rho_O + \rho_E)/2$. Las líneas punteadas representan las fronteras entre las fases superfluido (SF), aislante de Mott (MI), onda de densidad (DW) y supersólido (SS).

el gran potencial presentados en la sección 3.3, quedan dados por las expresiones:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{eff} &= \sum_{\xi=O',E'} \left[-zt\hat{\beta}_\xi - \mu_\xi \hat{n}_\xi + \frac{U_\xi}{2} \hat{n}_\xi (\hat{n}_\xi - 1) - \frac{g_{eff}}{N_s} |J_D|^2 \rho_\xi \hat{n}_\xi - g_{eff} c_{D,\xi} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \left[\delta\Phi_{O'}^\dagger \Delta_{O'} \delta\Phi_{O'} + \delta\Phi_{E'}^\dagger \Delta_{E'} \delta\Phi_{E'} \right] \\
&= \sum_{\xi=O',E'} \left[-zt\hat{\beta}_\xi - \mu_\xi \hat{n}_\xi + \frac{U_\xi}{2} \hat{n}_\xi (\hat{n}_\xi - 1) - \frac{g_{eff}}{N_s} |J_D|^2 \rho_\xi \hat{n}_\xi - g_{eff} c_{D,\xi} \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \left\{ (\delta\hat{b}_{O'}^\dagger \delta\hat{b}_{O'} + \delta\hat{b}_{O'} \delta\hat{b}_{O'}^\dagger) \Delta_{O',1} + (\delta\hat{b}_{E'}^\dagger \delta\hat{b}_{E'} + \delta\hat{b}_{E'} \delta\hat{b}_{E'}^\dagger) \Delta_{E',1} \right. \\
&\quad \left. + \delta\hat{b}_{O'}^\dagger \delta\hat{b}_{O'}^\dagger \Delta_{O',2} + \delta\hat{b}_{O'} \delta\hat{b}_{O'} \Delta_{O',2}^* + \delta\hat{b}_{E'}^\dagger \delta\hat{b}_{E'}^\dagger \Delta_{E',2} + \delta\hat{b}_{E'} \delta\hat{b}_{E'} \Delta_{E',2}^* \right\} \\
&= \sum_{\xi=O',E'} \left[-zt\hat{\beta}_\xi - \mu_\xi \hat{n}_\xi + \frac{U_\xi}{2} \hat{n}_\xi (\hat{n}_\xi - 1) - \frac{g_{eff}}{N_s} |J_D|^2 \rho_\xi \hat{n}_\xi - g_{eff} c_{D,\xi} \right] \\
&\quad (\psi_O^* \hat{b}_{O'} + \psi_O \hat{b}_{O'}^\dagger - \hat{b}_{O'}^\dagger \hat{b}_{O'} - \frac{1}{2} - |\psi_O|^2) \Delta_{O',1} \\
&\quad + (\psi_E^* \hat{b}_{E'} + \psi_E \hat{b}_{E'}^\dagger - \hat{b}_{E'}^\dagger \hat{b}_{E'} - \frac{1}{2} - |\psi_E|^2) \Delta_{E',1} \\
&\quad + (\psi_O^* \hat{b}_{O'}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{b}_{O'}^\dagger \hat{b}_{O'}^\dagger - \frac{1}{2} \psi_O^{*2}) \Delta_{O',2} + (\psi_O \hat{b}_{O'} - \frac{1}{2} \hat{b}_{O'} \hat{b}_{O'} - \frac{1}{2} \psi_O^2) \Delta_{O',2}^* \\
&\quad + (\psi_E^* \hat{b}_{E'}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{b}_{E'}^\dagger \hat{b}_{E'}^\dagger - \frac{1}{2} \psi_E^{*2}) \Delta_{E',2} + (\psi_E \hat{b}_{E'} - \frac{1}{2} \hat{b}_{E'} \hat{b}_{E'} - \frac{1}{2} \psi_E^2) \Delta_{E',2}^*
\end{aligned} \tag{4.7}$$

y

$$\begin{aligned}
\Omega(\Delta_{ij}, \psi_i) &= A\Delta_{E',1} + B\Delta_{O',1} + C\Delta_{E',2} + C^* \Delta_{E',2}^* + D\Delta_{O',2} + D^* \Delta_{O',2}^* \\
&= A\Delta_{E',1} + B\Delta_{O',1} + 2|\Delta_{E',2}| \text{Re}[C e^{i \arg(\Delta_{E',2})}] + 2|\Delta_{O',2}| \text{Re}[D e^{i \arg(\Delta_{O',2})}],
\end{aligned} \tag{4.8}$$

donde

$$A \equiv \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{E',1}} = \langle \psi_E^* \hat{b}_{E'} + \psi_E \hat{b}_{E'}^\dagger - \hat{b}_{E'}^\dagger \hat{b}_{E'} - \frac{1}{2} - |\psi_E|^2 \rangle_{H_{eff}}, \tag{4.9}$$

$$B \equiv \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{O',1}} = \langle \psi_O^* \hat{b}_{O'} + \psi_O \hat{b}_{O'}^\dagger - \hat{b}_{O'}^\dagger \hat{b}_{O'} - \frac{1}{2} - |\psi_O|^2 \rangle_{H_{eff}}, \tag{4.10}$$

$$C \equiv \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{E',2}} = \langle \psi_E^* \hat{b}_{E'}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{b}_{E'}^\dagger \hat{b}_{E'}^\dagger - \frac{1}{2} \psi_E^{*2} \rangle_{H_{eff}}, \tag{4.11}$$

$$D \equiv \frac{\delta\Omega}{\delta\Delta_{O',2}} = \langle \psi_O^* \hat{b}_{O'}^\dagger - \frac{1}{2} \hat{b}_{O'}^\dagger \hat{b}_{O'}^\dagger - \frac{1}{2} \psi_O^{*2} \rangle_{H_{eff}}. \tag{4.12}$$

Para determinar los valores correctos de los parámetros de orden de densidad de carga y superfluido, se realizó un algoritmo autoconsistente análogo al caso de un solo modo, en el que en cada iteración se minimiza Ω como función de las variables Δ . Durante la

minimización, se acotan las Δ , de manera que no excedan la energía cinética de un proceso de salto doble.

$$\begin{aligned} |\Delta_{O'_{1,2}}| \leq |\Delta_{O'_{1,1}}| &\leq \frac{(zt)^2}{2} \langle \delta \hat{b}_{O'}^\dagger \delta \hat{b}_{O'} + \delta \hat{b}_{O'} \delta \hat{b}_{O'}^\dagger \rangle_{H_{eff}} \\ &= (zt)^2 \langle \hat{b}_{O'}^\dagger \hat{b}_{O'} - \psi_O^* \hat{b}_{O'} - \psi_O \hat{b}_{O'}^\dagger + \frac{1}{2} + |\psi_O|^2 \rangle_{H_{eff}}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} |\Delta_{E'_{1,2}}| \leq |\Delta_{E'_{1,1}}| &\leq \frac{(zt)^2}{2} \langle \delta \hat{b}_{E'}^\dagger \delta \hat{b}_{E'} + \delta \hat{b}_{E'} \delta \hat{b}_{E'}^\dagger \rangle_{H_{eff}} \\ &= (zt)^2 \langle \hat{b}_{E'}^\dagger \hat{b}_{E'} - \psi_E^* \hat{b}_{E'} - \psi_E \hat{b}_{E'}^\dagger + \frac{1}{2} + |\psi_E|^2 \rangle_{H_{eff}}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Los resultados de los parámetros de orden y de la densidad se muestran en la figura 4.3. Los promedios de las funciones de hibridación se muestran en la figura 4.4. La comparación de las curvas de transición de fase de la teoría B+U y la aproximación de desacoplamiento se muestra en la figura 4.5.

Los diagramas de fases aplicando la teoría B+U, sobre un sistema de dos modos espaciales, muestran que las transiciones de fase ocurren a un mayor zt/U , en comparación con los diagramas obtenidos bajo la aproximación de desacoplamiento. Esto es similar al caso de un modo espacial. De manera adicional, las fronteras de transición de la onda de densidad y del supersólido ocurren a un mayor tunelaje, ahora que se toman en cuenta las fluctuaciones locales de la densidad. Por otra parte, las funciones de hibridación se comportan de manera similar al caso de un modo. Estas optimizan el problema cuando tienen los mismos valores y son mayores en la fase superfluida, creciendo de manera continua al aumentar zt/U . Se observa además que las funciones de hibridación crecen más lento para μ/U entero.

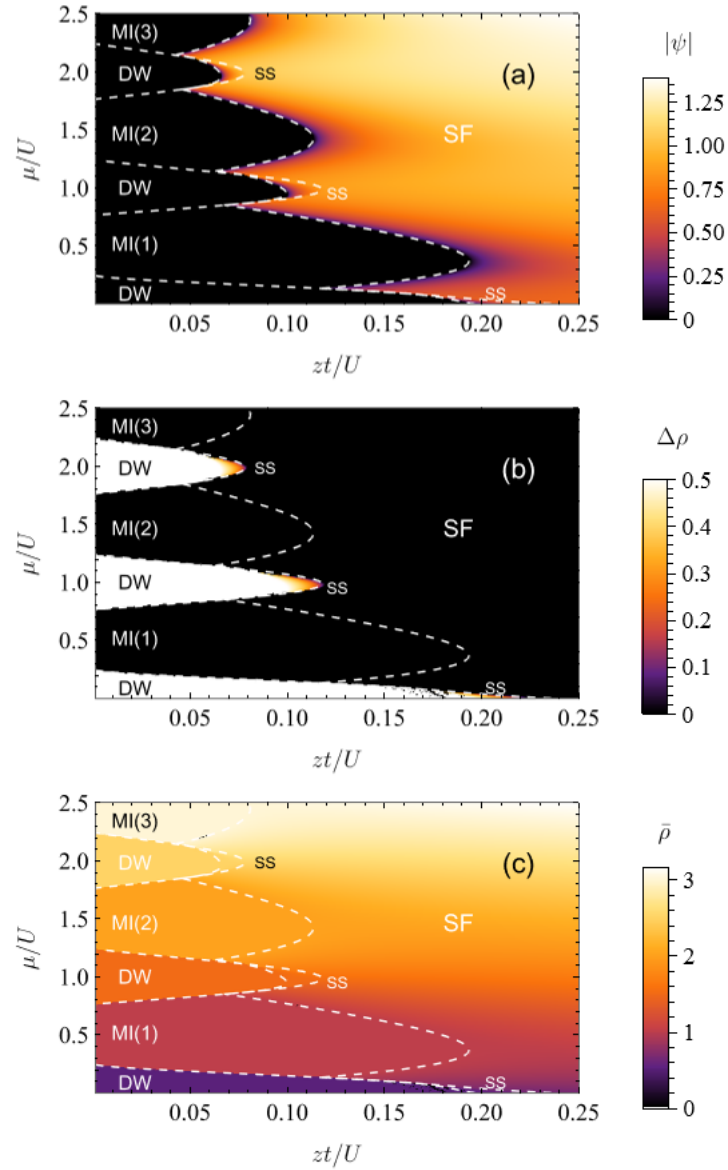


Figura 4.3: Diagrama de fases utilizando la teoría B+U, para un sistema de dos modos espaciales. Se utiliza en la simulación $g_{eff} = -0.25$ y $N_s = 100$. (a) Parámetro de orden superfluido $\Sigma\psi = |\psi_O + \psi_E|/2$. (b) Parámetro de orden de la onda de densidad $\Delta\rho = |\rho_O - \rho_E|/2$. (c) Densidad promedio $\bar{\rho} = (\rho_O + \rho_E)/2$. Las líneas punteadas representan las fronteras entre las fases superfluido (SF), aislante de Mott (MI), onda de densidad (DW) y supersólido (SS).

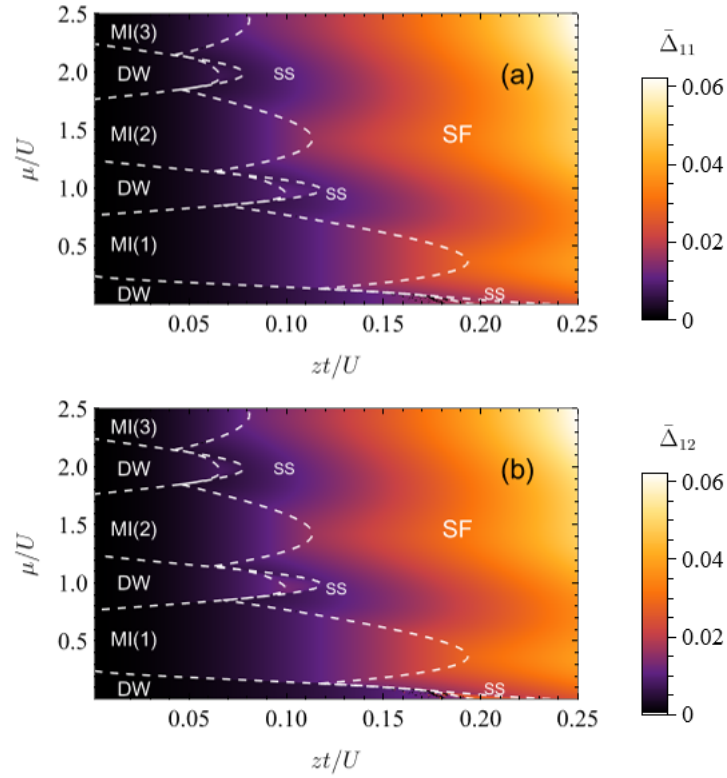


Figura 4.4: Promedio de las funciones de hibridación (a) $\bar{\Delta}_{11} = (\Delta_{O_{11}} + \Delta_{E_{11}})/2$ y (b) $\bar{\Delta}_{12} = (|\Delta_{O_{12}}| + |\Delta_{E_{12}}|)/2$ obtenidas aplicando la teoría B+U. Las líneas punteadas representan las fronteras entre las fases superfluido (SF), aislante de Mott (MI), onda de densidad (DW) y supersólido (SS).

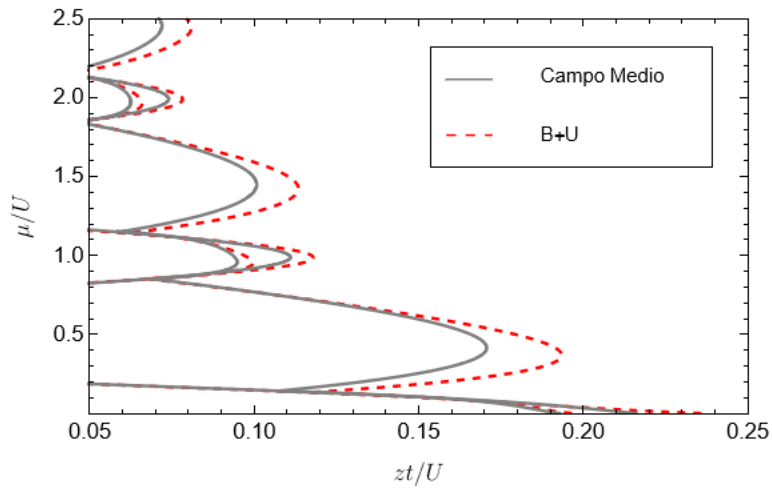


Figura 4.5: Fronteras de transición obtenidas mediante la aproximación de desacoplamiento (campo medio) y la teoría B+U.

5 Conclusiones

En el presente trabajo se estudiaron sistemas de átomos bosónicos ultrafríos sin espín dentro de redes ópticas, con y sin la presencia de una cavidad óptica. Cuando no se tiene la cavidad, el modelo que describe al sistema es el de Bose-Hubbard. Si el sistema se encuentra dentro de una o varias cavidades ópticas, ocurre un mayor acoplamiento entre la luz y la materia, siendo posible la aparición de diferentes fases. Dado la dificultad de resolver un sistema con un número grande de partículas de manera exacta, es necesario desarrollar nuevas aproximaciones y métodos que faciliten la resolución del problema, y que tomen en cuenta las simetrías y características más importantes del sistema. En la tesis, se desarrolló el formalismo B+U para el modelo de Bose-Hubbard, siguiendo trabajos previos, obteniéndose el diagrama de fases del sistema. Este fue comparado con los resultados de la aproximación de desacoplamiento.

Como resultado principal de la tesis, se extendió el formalismo B+U a sistemas de más de un modo espacial. La teoría resultante se aplicó a un sistema en presencia de una cavidad óptica, el cual presenta dos modos espaciales. A diferencia de la aproximación de desacoplamiento, en el que las fluctuaciones de segundo orden de los operadores de creación y aniquilación de partículas en un sitio se desprecian, el formalismo B+U toma en cuenta de manera efectiva estas fluctuaciones hasta orden cuártico, mapeando el sistema completo al problema de un sitio de cada modo, dentro de un baño efectivo. Como consecuencia, las transiciones entre las fases con y sin orden superfluido ocurren a una mayor energía de tunelaje. Además, este formalismo permite, mediante las funciones de hibridación, estimar las fluctuaciones de procesos de salto doble. Hay que notar que los coeficientes críticos calculados para el modelo de Bose-Hubbard en los puntos multicríticos son del tipo de una teoría de campo medio. Por el contrario, se muestra que la clase de universalidad cerca de los puntos multicríticos es la del modelo XY, por lo que el formalismo B+U no da el resultado correcto. Esto debido a que el formalismo B+U es una teoría local y en la transición de fase todas las escalas del sistema se vuelven importantes. A pesar de lo mencionado, este método presenta una primera mejora a la aproximación de desacoplamiento, haciendo uso de un bajo coste computacional.

A futuro es posible aplicar la teoría B+U multimodo a otros sistemas que presenten más de un modo espacial, lo que resultará útil para estudiar problemas dinámicos de autoorganización. No obstante, hay que tomar en cuenta que no se trataron las correlaciones entre los sitios completamente, ya que la teoría B+U solo actúa en los términos de tunelaje. Por esto, es deseable posteriormente extender el formalismo de manera que se tomen en cuenta las correlaciones entre términos adicionales, ampliando el sistema a un clúster.

A Segunda cuantización

La cuantización es el procedimiento de ir de una teoría clásica a una cuántica. En la segunda cuantización, los campos, que son tratados clásicamente en la primera cuantización, son reemplazados por operadores de creación y aniquilación. El formalismo de segunda cuantización es muy útil al tratar con problemas de muchas partículas idénticas, y se describe brevemente a continuación. El siguiente material se basa en el capítulo 6 de [25].

Se trabaja en el espacio de Fock, el cual contiene a todos los estados de muchos cuerpos que son simétricos (o antisimétricos). Denotemos el conjunto $\{|\mathbf{N}\rangle\}$ como la base de el espacio de Hilbert simétrico de N -partículas. Para determinar al vector \mathbf{N} , se colocan los número de ocupación de los estados de una sola partícula $N_{\mathbf{n},\alpha}$, donde α corresponde al estado de espín. Es decir, $\mathbf{N} = [\dots, N_{\mathbf{n},\alpha}, \dots]$. El número $N_{\mathbf{n},\alpha}$ indica el número de partículas que se encuentran en el estado de una sola partícula $|\mathbf{n}, \alpha\rangle$.

Se define el operador de aniquilación $\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}$ como

$$\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha} |\mathbf{N}\rangle = \hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha} |\dots, N_{\mathbf{n},\alpha}, \dots\rangle = (\pm 1)^{M_{\mathbf{n},\alpha}} \sqrt{N_{\mathbf{n},\alpha}} |\dots, N_{\mathbf{n},\alpha} - 1, \dots\rangle. \quad (\text{A.1})$$

El operador de creación se define como

$$\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger |\mathbf{N}\rangle = (\pm 1)^{M_{\mathbf{n},\alpha}} \sqrt{1 \pm N_{\mathbf{n},\alpha}} |\dots, N_{\mathbf{n},\alpha} + 1, \dots\rangle. \quad (\text{A.2})$$

El signo positivo (negativo) en las dos definiciones anteriores corresponde a bosones (fermiones). El factor $M_{\mathbf{n},\alpha}$ da el número de estados ocupados que están ordenados a la izquierda de $N_{\mathbf{n},\alpha}$, en el estado $|\mathbf{N}\rangle = |\dots, N_{\mathbf{n},\alpha}, \dots\rangle$. La acción de estos operadores es crear o destruir una partícula en el estado $|\mathbf{n}, \alpha\rangle$. Así mismo, el operador que cuenta el número de partículas en el estado $|\mathbf{n}, \alpha\rangle$ es $\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}$. Estos operadores cumplen las regla de conmutación:

$$[\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}, \hat{\psi}_{\mathbf{n}',\alpha'}]_{\mp} = [\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger, \hat{\psi}_{\mathbf{n}',\alpha'}^\dagger]_{\mp} = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$[\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}, \hat{\psi}_{\mathbf{n}',\alpha'}^\dagger]_{\mp} = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} \delta_{\alpha,\alpha'}. \quad (\text{A.4})$$

Se utiliza el conmutador $[A, B]_- = AB - BA$ para bosones y el anticonmutador $[A, B]_+ = AB + BA$ para fermiones. En la tesis se trabaja únicamente con bosones, por lo que se omite el subíndice del conmutador.

Consideremos el Hamiltoniano de N partículas en un campo magnético:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + V^{ext}(\hat{\mathbf{r}}_i) + \gamma \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \mathbf{B} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V(\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j). \quad (\text{A.5})$$

En el lenguaje de segunda cuantización, el Hamiltoniano se convierte en

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{n},\alpha} \varepsilon_{\mathbf{n},\alpha} \hat{\Psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger \hat{\Psi}_{\mathbf{n},\alpha} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\alpha'} \sum_{\mathbf{n},\mathbf{n}',\mathbf{m},\mathbf{m}'} V_{\mathbf{n},\mathbf{n}';\mathbf{m},\mathbf{m}'} \hat{\Psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger \hat{\Psi}_{\mathbf{n}',\alpha'}^\dagger \hat{\Psi}_{\mathbf{m}',\alpha'} \hat{\Psi}_{\mathbf{m},\alpha}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

donde

$$V_{\mathbf{n},\mathbf{n}';\mathbf{m},\mathbf{m}'} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \chi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{r}) \chi_{\mathbf{n}'}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \chi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \chi_{\mathbf{m}'}(\mathbf{r}'). \quad (\text{A.7})$$

$\varepsilon_{\mathbf{n},\alpha}$ es la energía propia del Hamiltoniano de una sola partícula. Las $\chi_n(\mathbf{r})$ son las eigenfunciones del hamiltoniano de una sola partícula, sin incluir la parte de espín.

Definimos los operadores de campo $\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r})$ y $\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r})$ como los operadores que destruyen y crean una partícula en la posición \mathbf{r} . Ambos cumplen las reglas de conmutación

$$[\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{r}')] = [\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$[\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha,\alpha'}. \quad (\text{A.9})$$

Estos pueden ser obtenidos mediante un campo de base:

$$\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} \hat{\Psi}_{\mathbf{n},\alpha} \chi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.10})$$

$$\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} \hat{\Psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger \chi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{r}). \quad (\text{A.11})$$

En término de los operadores de campo, el Hamiltoniano se convierte en

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

En este caso, ε_α es la energía debida a la interacción del campo magnético con el espín de las partículas. Estas tres formas del Hamiltoniano (A.5), (A.6) y (A.12), son equivalentes.

El estado general de N cuerpos en segunda cuantización es

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \int \left(\prod_{k=1}^N d\mathbf{r}_k \right) \Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) \hat{\Psi}_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \dots \hat{\Psi}_{\alpha_N}^\dagger(\mathbf{r}_N) |0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

donde las $\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t)$ dan las amplitudes del estado.

B Coeficientes críticos de la teoría de campo medio

Según la teoría de perturbaciones del modelo de Bose-Hubbard a orden cuártico [3] para $z\bar{t}$ pequeño, la energía E_g del estado base se escribe como

$$E_g = a_0 + a_2\psi^2 + a_4\psi^4 + O(\psi^6), \quad (\text{B.1})$$

donde $a_0 = 0$, si $\mu < 0$, y $a_0 = \frac{U}{2}g(g-1) - \mu g$, si $U(g-1) < \mu < Ug$. Sea $\bar{\mu} = \mu/U$ y $\bar{z}\bar{t} = z\bar{t}/U$. Entonces los coeficientes de la energía están dados por

$$a_2(g, \bar{\mu}, \bar{z}\bar{t}, U) = (\bar{z}\bar{t})^2 \zeta(g, \bar{\mu}, \bar{z}\bar{t}, U), \quad (\text{B.2})$$

$$a_4(g, \bar{\mu}, \bar{z}\bar{t}, U) = (\bar{z}\bar{t})^4 \beta(g, \bar{\mu}, U), \quad (\text{B.3})$$

donde

$$\zeta(g, \bar{\mu}, \bar{z}\bar{t}, U) = U \left\{ \frac{g}{(g-1) - \bar{\mu}} + \frac{g+1}{\bar{\mu} - g} + \frac{1}{\bar{z}\bar{t}} \right\}, \quad (\text{B.4})$$

$$\beta(g, \bar{\mu}, U) = U \left\{ \frac{g(g-1)}{[g-1-\bar{\mu}]^2[2g-3-2\bar{\mu}]} + \frac{(g+1)(g+2)}{(\bar{\mu}-g)^2[2\bar{\mu}-(2g+1)]} - \left(\frac{g}{g-1-\bar{\mu}} + \frac{g+1}{\bar{\mu}-g} \right) \left(\frac{g}{[g-1-\bar{\mu}]^2} + \frac{g+1}{(\bar{\mu}-g)^2} \right) \right\}. \quad (\text{B.5})$$

En la transición de fase, se tiene $a_2(g, \bar{\mu}, \bar{z}\bar{t}) = 0$, como se discutió después de la ecuación (2.40).

El valor del parámetro de orden ψ es el que minimiza la energía del estado base. Es decir, el que cumple

$$\frac{\partial E_g}{\partial \psi} = 2a_2\psi + 4a_4\psi^3 = 0. \quad (\text{B.6})$$

La solución sin superfluido es $\psi = 0$. La otra solución cumple

$$\psi = \sqrt{\frac{-a_2}{2a_4}}. \quad (\text{B.7})$$

Definamos la distancia al punto multicrítico como $|\Delta g| = |\bar{z}\bar{t} - (\bar{z}\bar{t})_c|$, tomando en cuenta que el punto multicrítico se da en las coordenadas del espacio de fase $((\bar{z}\bar{t})_c, (\bar{\mu})_c)$. Nos interesa obtener el comportamiento de ψ cerca del punto multicrítico, es decir, con $|\Delta g| \ll$

$(\bar{z}t)_c = 0.1715$. En este caso podemos escribir las siguientes expresiones, conservando solo los términos a primer orden en $|\Delta g|$:

$$(\bar{z}t)^2 \approx (\bar{z}t)_c^2 + 2(\bar{z}t)_c |\Delta g|, \quad (\text{B.8})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{(\bar{z}t)^4} &\approx \frac{1}{(\bar{z}t)_c^4 + 4(\bar{z}t)_c^3 |\Delta g|} \\ &\approx \frac{1}{(\bar{z}t)_c^4} \left(1 - 4 \frac{|\Delta g|}{(\bar{z}t)_c} \right) \\ &= \frac{1}{(\bar{z}t)_c^4} - 4 \frac{|\Delta g|}{(\bar{z}t)_c^5}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Sustituyendo las expresiones anteriores en (B.4),

$$\begin{aligned} \zeta(g, (\bar{\mu})_c, (\bar{z}t)_c + |\Delta g|, U) &= U \left\{ \frac{g}{(g-1) - \bar{\mu}} + \frac{g+1}{\bar{\mu} - g} + \frac{1}{(\bar{z}t)_c + |\Delta g|} \right\} \\ &\approx U \left\{ \frac{g}{(g-1) - \bar{\mu}} + \frac{g+1}{\bar{\mu} - g} + \frac{1}{(\bar{z}t)_c} \left(1 - \frac{|\Delta g|}{(\bar{z}t)_c} \right) \right\} \\ &= \zeta(g, (\bar{\mu})_c, (\bar{z}t)_c, U) - U \frac{|\Delta g|}{(\bar{z}t)_c^2} \\ &= -U \frac{|\Delta g|}{(\bar{z}t)_c^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

ya que $\zeta(g, (\bar{\mu})_c, (\bar{z}t)_c, U) = 0$ en el punto multicrítico. De (B.2), (B.8) y (B.10),

$$\begin{aligned} \implies a_2(g, (\bar{\mu})_c, (\bar{z}t)_c + |\Delta g|, U) &\approx -[(\bar{z}t)_c^2 + 2(\bar{z}t)_c |\Delta g|] U \frac{|\Delta g|}{(\bar{z}t)_c^2} \\ &\approx -U |\Delta g|. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Consideremos el comportamiento de ψ cerca del punto multicrítico.

$$\begin{aligned} \psi(|\Delta g|) &= \sqrt{\frac{-a_2(g, (\bar{\mu})_c, (\bar{z}t)_c + |\Delta g|)}{2a_4(g, (\bar{\mu})_c)}} \\ &= \sqrt{-\frac{1}{2\beta(g, (\bar{\mu})_c, U)} (-U|\Delta g|) \left(\frac{1}{(\bar{z}t)_c^4} - 4 \frac{|\Delta g|}{(\bar{z}t)_c^5} \right)} \\ &\approx \sqrt{\frac{U}{2(\bar{z}t)_c^4 \beta(g, (\bar{\mu})_c, U)}} |\Delta g|^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

de donde se lee el exponente crítico $\beta = 1/2$, que está definido por $\psi \propto |\Delta g|^\beta$.

Otro coeficiente crítico que podemos calcular es α , que queda definido por

$$f_s \propto |\Delta g|^{2-\alpha}, \quad (\text{B.13})$$

donde f_s es la parte singular de la energía libre o, en este caso, la energía del estado base, ya que se tiene $T = 0$. Recordando que

$$E_g = a_0 + a_2 \psi^2 + a_4 \psi^4 + O(\psi^6), \quad (\text{B.14})$$

podemos recorrer el cero de energía, tal que escribimos

$$E_g = a_2\psi^2 + a_4\psi^4 + O(\psi^6), \quad (\text{B.15})$$

Cerca de la transición $a_2(g, (\bar{\mu})_c, (\bar{z}t)_c + |\Delta g|, U) \approx -U|\Delta g|$. Utilizando $\psi \propto |\Delta g|^{1/2}$ y que $|\Delta g| \ll 1$ cerca de la transición, se tiene

$$\begin{aligned} E_g &\approx -U|\Delta g|^2 + a_4|\Delta g|^2 \\ &= (a_4 - U)|\Delta g|^2, \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

por lo que de (B.13) se obtiene $\alpha = 0$.

Para calcular los demás coeficientes críticos, se necesita de un campo no nulo h conjugado al parámetro de orden. Este lo introducimos en la energía libre de la siguiente manera:

$$E_g = a_0 + a_2\psi^2 + a_4\psi^4 - h\psi. \quad (\text{B.17})$$

Nuevamente obtenemos el valor de ψ minimizando la energía:

$$\frac{\partial E_g}{\partial \psi} = 2a_2\psi + 4a_4\psi^3 - h = 0, \quad (\text{B.18})$$

$$\implies h = 2a_2\psi + 4a_4\psi^3. \quad (\text{B.19})$$

Definimos la susceptibilidad por $\chi = \partial\psi/\partial h$, la cual define al coeficiente crítico γ mediante $\chi(h=0) \propto |\Delta g|^{-\gamma}$. Calculando,

$$\chi(h) = \frac{1}{2a_2 + 12a_4\psi^2(h)}. \quad (\text{B.20})$$

Evaluando en $h = 0$, se tienen dos casos. Si $\psi = 0$, entonces

$$\begin{aligned} \chi(h=0) &= \frac{1}{2a_2} \\ &\approx -\frac{1}{2U}|\Delta g|^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Para el otro caso con $\psi = \sqrt{-a_2/2a_4}$, Se tiene

$$\begin{aligned} \chi(h=0) &= \frac{1}{2a_2 + 12a_4\left(-\frac{a_2}{2a_4}\right)} \\ &= -\frac{1}{4a_2} \\ &\approx -\frac{1}{4U}|\Delta g|^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Por lo tanto, en ambos casos se obtiene el coeficiente $\gamma = 1$.

Por último, para el coeficiente δ se necesita evaluar $\psi(h, \Delta g = 0) \propto h^{1/\delta}$. Tenemos que $a_2(\Delta g = 0) = 0$, por lo que de (B.19),

$$h = 4a_4\psi^3 \quad (\text{B.23})$$

$$\implies \psi = \left(\frac{h}{4a_4} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{B.24})$$

Por lo tanto $\delta = 3$.

En esta aproximación de campo medio, se desprecian las correlaciones entre los operadores $\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j$. Por lo tanto no se puede definir una longitud de correlación ξ , ni el coeficiente crítico asociado ν definido por

$$\xi \propto |\Delta g|^{-\nu}. \quad (\text{B.25})$$

Para definir poder definir una longitud de correlación, se debe de tomar en cuenta la posible variación espacial del parámetro de orden ψ . Esto se hace incluyendo un término adicional a la energía libre, que queda en ausencia de campos externos como

$$F_L = \int d\mathbf{r} \left[\frac{K}{2} |\nabla \psi|^2 + a_2 \psi^2 + a_4 \psi^4 \right] \quad (\text{B.26})$$

Esta energía libre es llamada energía libre de Ginzburg-Landau [21]. Escribiendo $\phi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \bar{\psi}$, donde $\bar{\psi}$ es el valor promedio de $\psi(\mathbf{r})$, definimos la función de correlación de dos puntos como

$$G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \langle \phi(\mathbf{r}_i) \phi(\mathbf{r}_j) \rangle. \quad (\text{B.27})$$

Mediante una transformada de Fourier $\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{q}}$, la función de correlación en el espacio de \mathbf{q} tiene el valor [37]:

$$\langle \phi_{\mathbf{q}} \phi'_{\mathbf{q}} \rangle = \frac{\delta_{\mathbf{q}} \delta'_{\mathbf{q}}}{K(q^2 + \xi^{-2})} \quad (\text{B.28})$$

donde se introdujo $\xi \propto a_2^{-1/2}$, que tiene unidades de longitud. Para ver que ξ corresponde a una longitud de correlación, consideramos lo siguiente [37]. Tomemos la función de correlación en el espacio real como una transformada inversa de Fourier de (B.28). Desarrollando,

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}'} \langle \phi_{\mathbf{q}} \phi'_{\mathbf{q}'} \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{1}{K(q^2 + \xi^{-2})} \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Tomando el límite continuo $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}$, se tiene

$$G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -\frac{1}{K} I_d(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \xi), \quad (\text{B.30})$$

donde

$$I_d(\mathbf{r}, \xi) = -\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{q^2 + \xi^{-2}}. \quad (\text{B.31})$$

Para determinar I_d , notamos que cumple la ecuación diferencial

$$\nabla^2 I_d(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{\xi^2} I_d(\mathbf{r}) \quad (\text{B.32})$$

donde $\delta(\mathbf{r})$ es la función delta de Dirac. $I_d(\mathbf{r})$ debe de tener simetría esférica, por lo que es posible es escribir solo la parte radial del laplaciano de (B.32).

$$\frac{d^2}{dr^2}I_d(r) + \frac{d-1}{r} \frac{d}{dr}I_d(r) = \delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{\xi^2}I_d(\mathbf{r}) \quad (\text{B.33})$$

Como solución a (B.33), se propone

$$I_d(r) \propto \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^p}, \quad (\text{B.34})$$

de manera que $G(r)$ decae exponencialmente, con ξ la longitud característica del decaimiento. Sustituyendo (B.34) en (B.33), se tiene la igualdad

$$\frac{p(p+1)}{r^2} + \frac{2p}{r\xi} + \frac{1}{\xi^2} - \frac{p(d-1)}{r^2} - \frac{(d-1)}{r\xi} = \frac{1}{\xi^2}. \quad (\text{B.35})$$

La elección de ξ como la longitud de correlación en (B.34), permite que se cancelen los términos de ξ^{-2} en (B.35). Además, se tienen las condiciones $2p = (d-1)$ para $r \gg \xi$, y $p(p+1) = p(d-1)$ para $r \ll \xi$. La longitud de correlación ξ cumple que $\xi \propto a_2^{-1/2}$. Cerca de la transición de fase, se sigue de (2.40) que

$$\xi \propto |\Delta g|^{-1/2}, \quad (\text{B.36})$$

por lo que se llega al valor del exponente crítico $\nu = \frac{1}{2}$. Además, utilizando la relación de escalamiento $\nu(2-\eta) = \gamma$, se obtiene $\eta = 0$.

Resumiendo, para la teoría de campo medio se obtiene $\alpha = 0$, $\beta = \frac{1}{2}$, $\gamma = 1$ y $\delta = 3$. Incluyendo la posible variación espacial del parámetro de orden, se llega adicionalmente a $\nu = \frac{1}{2}$ y $\eta = 0$.

C Teoría de campo del modelo de Bose-Hubbard

C.1. Función de partición

Para poder estudiar la transición de fase cuántica en el modelo de Bose Hubbard se utiliza el formalismo de integrales de camino en estados coherentes. A continuación se deriva la integral de camino para la función de partición. Este tratamiento se puede encontrar en las referencias [20] y [25].

Los estados coherentes los definimos como un conjunto de estados $\{|\mathbf{N}\rangle\}$, etiquetados por el vector continuo \mathbf{N} . Estos estados están normalizados a la unidad,

$$\langle \mathbf{N} | \mathbf{N} \rangle = 1. \quad (\text{C.1})$$

También cumplen una relación de completez,

$$C_N \int d\mathbf{N} |\mathbf{N}\rangle \langle \mathbf{N}| = \mathbf{1}, \quad (\text{C.2})$$

donde C_N es una constante de normalización. Estos estados no son ortonormales. Dado un Hamiltoniano $H(\hat{\mathbf{S}})$, donde $\hat{\mathbf{S}}$ es un vector de operadores que no conmutan, los estados coherentes cumplen que

$$\langle \mathbf{N} | \hat{\mathbf{S}} | \mathbf{N} \rangle = \mathbf{N}. \quad (\text{C.3})$$

Las propiedades (C.1), (C.2) y (C.3) definen a los estados coherentes. En el caso del modelo de Bose-Hubbard, $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{b}_i, \hat{b}_i^*)$, donde i corre por todos los sitios. Los estados coherentes son los eigenestados del operador de aniquilación. Para ciertos casos, es posible ordenar los operadores en el Hamiltoniano, de manera que se cumpla

$$\langle \mathbf{N} | H(\hat{\mathbf{S}}) | \mathbf{N} \rangle = H(\mathbf{N}). \quad (\text{C.4})$$

Para el Hamiltoniano de Bose-Hubbard, el vector \mathbf{N} , que indexa a los estados coherentes, se denota por $\mathbf{N} = (b_i, b_i^*)$. Hay que notar que estas b_i son campos escalares, no operadores, por lo que no llevan gorro. Esto se puede ilustrar considerando el estado coherente de bosones:

$$|\mathbf{N}\rangle = e^{-\sum_{i=1}^N \frac{|b_i|^2}{2}} e^{\sum_{i=1}^N b_i \hat{b}_i^\dagger} |0\rangle, \quad (\text{C.5})$$

que cumple

$$\hat{b}_k |\mathbf{N}\rangle = b_k |\mathbf{N}\rangle. \quad (\text{C.6})$$

El Hamiltoniano que depende de los operadores de creación y aniquilación es $H(\hat{\mathbf{S}})$. El Hamiltoniano $H(\mathbf{N})$ depende de los campos (b_i, b_i^*) . También, para estos estados coherentes, el prefactor de la relación de completitud (C.2) es $C_N = 1/\pi$.

Para obtener la traza de un operador mediante los estados coherentes $|\mathbf{N}\rangle$, se sigue el siguiente desarrollo, donde se usa la relación de completitud (C.2) de los estados coherentes.

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{O} &= \sum_{\mathbf{M}} \langle \mathbf{M} | \hat{O} | \mathbf{M} \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{M}} \int d\mathbf{N} \langle \mathbf{M} | \mathbf{N} \rangle \langle \mathbf{N} | \hat{O} | \mathbf{M} \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \int d\mathbf{N} \sum_{\mathbf{M}} \langle \mathbf{N} | \hat{O} | \mathbf{M} \rangle \langle \mathbf{M} | \mathbf{N} \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \int d\mathbf{N} \langle \mathbf{N} | \hat{O} | \mathbf{N} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

La función de partición Z es

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left[e^{-\beta H(\hat{\mathbf{S}})} \right] \\ &= \text{Tr} \left[e^{-\frac{1}{\hbar} H(\hat{\mathbf{S}}) \tau} \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \int d\mathbf{N} \langle \mathbf{N} | e^{-\frac{1}{\hbar} H(\hat{\mathbf{S}}) \tau} | \mathbf{N} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

donde τ tiene unidades de tiempo y está dado por $\tau = \hbar\beta$. Se observa que la exponencial en la función de partición tiene la forma de un operador de evolución. Dividiendo el intervalo $[0, \tau]$ en M intervalos de tamaño $\Delta\tau = \hbar\beta/M$, insertando la relación de los estados coherentes entre cada exponencial mediante (C.2) y tomando el límite continuo $M \rightarrow \infty$, obtenemos

$$Z = \frac{1}{\pi} \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^M d\mathbf{N}_j \frac{1}{\pi} \langle \mathbf{N}(\tau_j) | e^{-\frac{1}{\hbar} \Delta\tau H(\hat{\mathbf{S}})} | \mathbf{N}(\tau_j - \Delta\tau) \rangle, \quad (\text{C.9})$$

con $\mathbf{N}_j = \mathbf{N}(\tau_j)$, $\tau_j = j\Delta\tau$ y la condición de frontera, $|\mathbf{N}(0)\rangle = |\mathbf{N}(\hbar\beta)\rangle = |\mathbf{N}\rangle$. En el límite continuo, τ se vuelve una variable continua, por lo que se omite el subíndice j .

Desarrollando los valores de expectación y conservando los términos de orden $\Delta\tau$, podemos calcular cada elemento de matriz como

$$\begin{aligned} &\langle \mathbf{N}(\tau) | e^{-\frac{1}{\hbar} \Delta\tau H(\hat{\mathbf{S}})} | \mathbf{N}(\tau - \Delta\tau) \rangle \\ &\approx \langle \mathbf{N}(\tau) | \left[1 - \frac{\Delta\tau}{\hbar} H(\hat{\mathbf{S}}) \right] \left(|\mathbf{N}(\tau)\rangle - \frac{d}{d\tau} |\mathbf{N}(\tau)\rangle \Delta\tau \right) \\ &\approx 1 - \frac{\Delta\tau}{\hbar} \left(\hbar \langle \mathbf{N}(\tau) | \frac{d}{d\tau} |\mathbf{N}(\tau)\rangle + H(\mathbf{N}) \right) \\ &\approx e^{-\Delta\tau \langle \mathbf{N}(\tau) | \frac{d}{d\tau} |\mathbf{N}(\tau)\rangle - \frac{\Delta\tau}{\hbar} H(\mathbf{N})} \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Por lo tanto, la integral funcional resultante para Z es

$$Z = \int_{\mathbf{N}(0)=\mathbf{N}(\hbar\beta)} \mathcal{D}[\mathbf{N}] e^{-\frac{1}{\hbar}[S_B - \int_0^{\hbar\beta} d\tau H(\mathbf{N}(\tau))]}, \quad (\text{C.11})$$

donde

$$S = \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau \langle \mathbf{N}(\tau) | \frac{d}{d\tau} | \mathbf{N}(\tau) \rangle, \quad (\text{C.12})$$

y

$$\int_{\mathbf{N}(0)=\mathbf{N}(\hbar\beta)} \mathcal{D}[\mathbf{N}] = \frac{1}{\pi} \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^M d\mathbf{N}_i \frac{1}{\pi}; \quad \mathbf{N}(0) = \mathbf{N}(\hbar\beta). \quad (\text{C.13})$$

De esta manera, la función de partición del modelo de Bose-Hubbard es

$$Z = \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] e^{-\frac{1}{\hbar}S}, \quad (\text{C.14})$$

con la acción

$$S = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\sum_i \left(\hbar b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i \right) - t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^* b_j \right], \quad (\text{C.15})$$

En (C.14) se hace explícita la integración sobre los campos b y b^* , mediante la definición $\int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] \equiv \int_{\mathbf{N}(0)=\mathbf{N}(\hbar\beta)} \mathcal{D}[\mathbf{N}]$. Es necesario notar que los campos $b_i = b_i(\tau)$ dependen de tiempo imaginario τ , pero para simplificar la notación se omitirá dicha dependencia. También, en las cuentas de la siguiente sección se toman las unidades tal que $\hbar = 1$.

C.2. Modelo efectivo

Se tiene que de (C.14),

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] e^{-S} \\ &= \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] \exp \left[- \int_0^{\beta} d\tau \sum_i \left(b_i^\dagger \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^\dagger b_i + \frac{U}{2} b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i \right) \right] \\ &\quad \times \exp \left[\lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^M \Delta\tau \sum_{\langle i,j \rangle} t b_i^\dagger b_j \right], \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

donde en el último renglón se discretizó la integral de los términos de tunelaje. A continuación se realiza una transformación de Hubbard-Stratonovich, que introduce los campos auxiliares Ψ , Ψ^* a la función de partición. La transformación se basa en usar la identidad [25]

$$\int \frac{d\mathbf{x}}{\sqrt{(2\pi)^n}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{x} \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{J} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{J} - \frac{1}{2} \text{Tr}(\log(-\mathbf{G}^{-1})) \right\}. \quad (\text{C.17})$$

Para nuestro problema, se define \mathbf{J} tal que $\mathbf{J} = \Delta\tau(b_1, b_2, \dots, b_N, b_1^*, b_2^*, \dots, b_N^*)$. También se define \mathbf{x} tal que $(\mathbf{x})_i = \Psi_i$, con Ψ_i los campos auxiliares. La matriz \mathbf{t} es tal que $(\mathbf{t})_{i,j} \equiv t_{i,j}/\Delta\tau = t/\Delta\tau$ si i y j son vecinos más cercanos, y cero en otro caso. $t_{i,j}^{-1}$ denotan los elementos de la matriz inversa de \mathbf{t} . Por último se adopta la notación que el subíndice k corresponde a la cantidad evaluada en τ_k , por ejemplo, $b_{i,k} = b_i(\tau_k)$. Las condiciones de frontera son que $\tau_1 = 0$ y $\tau_M = \beta$. Con esto, se tiene

$$\begin{aligned}
& \exp \left[\lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^M \Delta\tau \sum_{\langle i,j \rangle} t b_{i,k}^\dagger b_{j,k} \right] \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \exp \left\{ \frac{1}{2} \Delta\tau \sum_{\langle i,j \rangle} t (b_{i,k}^* b_{j,k} + b_{j,k}^* b_{i,k}) \right\} \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{J}_k \cdot (-\mathbf{t}) \cdot \mathbf{J}_k \right\} \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \left\{ \frac{1}{A^2} \int \frac{1}{(2\pi)^n} \left(\prod_i^n d\Psi_{i,k} \right) \left(\prod_j^n d\Psi_{j,k}^* \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}_k \cdot \mathbf{t}^{-1} \cdot \mathbf{x}_k + \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{x}_k \right) \right\} \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \left\{ \frac{1}{A^2} \int \frac{1}{(2\pi)^n} \left(\prod_i^n d\Psi_{i,k} \right) \left(\prod_j^n d\Psi_{j,k}^* \right) \right\} \\
&\quad * \exp \left\{ \sum_{k=1}^M \Delta\tau \left(-\sum_{i,j} \Psi_{i,k} t_{ij}^{-1} \Psi_{j,k}^* + \sum_i (\Psi_{i,k} b_{i,k}^* + \Psi_{i,k}^* b_{i,k}) \right) \right\} \\
&= \int \mathcal{D}[\Psi] \mathcal{D}[\Psi^*] \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left(\sum_{i,j} \Psi_i t_{ij}^{-1} \Psi_j^* - \sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i) \right) \right\},
\end{aligned} \tag{C.18}$$

donde el factor $A = \exp\{\frac{1}{2} \text{Tr}[\log(-\mathbf{t}^{-1})]\}$ aparece al realizar la transformación. Del tercer al cuarto renglón se utilizó la identidad (C.17) para introducir los campos auxiliares Ψ . En el último renglón se introdujeron las medidas de integración

$$\int \mathcal{D}[\Psi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \left\{ \frac{1}{A} \int \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \prod_i^n d\Psi_{i,k} \right\} \tag{C.19}$$

y

$$\int \mathcal{D}[\Psi^*] = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \left\{ \frac{1}{A} \int \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} \prod_i^n d\Psi_{i,k}^* \right\}. \tag{C.20}$$

Sustituyendo el resultado de (C.18) en la ecuación (C.16), obtenemos las ecuaciones (C.21) y (C.22).

$$Z = \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] \mathcal{D}[\Psi] \mathcal{D}[\Psi^*] \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \mathcal{L} \right\}, \tag{C.21}$$

$$\mathcal{L} = \sum_i \left(b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i - \Psi_i b_i^* - \Psi_i^* b_i \right) + \sum_{i,j} \Psi_i t_{ij}^{-1} \Psi_j^*. \quad (\text{C.22})$$

El siguiente paso es integrar los campos b_i, b_i^* . Tenemos que

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] \mathcal{D}[\Psi] \mathcal{D}[\Psi^*] \\ &\times \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_i \left(b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i \right) \right\} \\ &\times \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i) \right\} \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,j} \Psi_i t_{ij}^{-1} \Psi_j^* \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

Definimos $S[\Psi, \Psi^*]$ de manera que los campos b_i^*, b_i sean integrados en la función de partición:

$$Z = \int \mathcal{D}[\Psi] \mathcal{D}[\Psi^*] \exp \{ -S[\Psi, \Psi^*] \}. \quad (\text{C.24})$$

Por lo que

$$\begin{aligned} e^{-S[\Psi, \Psi^*]} &= \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] \\ &\times \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_i \left(b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i \right) \right\} \\ &\times \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i) \right\} \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,j} \Psi_i t_{ij}^{-1} \Psi_j^* \right\} \\ &= \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,j} \Psi_i t_{ij}^{-1} \Psi_j^* \right\} \\ &\times \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_i \left(b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i \right) \right\} \\ &\times \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Definimos la acción local $S_{loc}[b, b^*]$, que corresponde a un sistema sin interacciones entre sitios, como

$$S_{loc}[b, b^*] = \int_0^\beta d\tau \sum_i \left(b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i \right), \quad (\text{C.26})$$

por lo que la función de partición local Z_{loc} está dada por

$$Z_{loc} = \int \mathcal{D}[b] \mathcal{D}[b^*] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_i \left(b_i^* \frac{db_i}{d\tau} - \mu b_i^* b_i + \frac{U}{2} b_i^* b_i^* b_i b_i \right) \right\}. \quad (\text{C.27})$$

Sea \mathcal{F}_0 la densidad espacial de energía libre del sistema sin interacción entre sitios. Entonces se cumple $V * \mathcal{F}_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{loc}$, donde V es el volumen del sistema. Por lo que

$$Z_{loc} = \exp\{-\beta V \mathcal{F}_0\}. \quad (C.28)$$

Multiplicando el último renglón de (C.25) por $\frac{Z_{loc}}{Z_{loc}}$ y utilizando (C.28) obtenemos

$$\begin{aligned} \exp^{-S[\Psi, \Psi^*]} &= \exp\{-\beta V \mathcal{F}_0\} \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,j} \Psi_i t_{ij}^{-1} \Psi_j^*\right\} \\ &\times \left\langle \exp\left\{\int_0^\beta d\tau \sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i)\right\} \right\rangle_{Z_{loc}}, \end{aligned} \quad (C.29)$$

donde el promedio en el último factor de (C.29) es sobre la acción local. Este último puede ser expandido en cumulantes.

$$\left\langle \exp\left\{\int_0^\beta d\tau \sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i)\right\} \right\rangle_{Z_{loc}} = \exp\left\{\int_0^\beta d\tau \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} C_n \left(\sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i)\right)\right\}, \quad (C.30)$$

donde C_n son los cumulantes. Los primeros cumulantes son

$$C_1(x) = \langle x \rangle, \quad (C.31)$$

$$C_2(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad (C.32)$$

$$C_3(x) = \langle x^3 \rangle - 3 \langle x \rangle \langle x^2 \rangle + 2 \langle x \rangle^3. \quad (C.33)$$

Procedemos a calcular los primeros dos cumulantes.

$$\begin{aligned} C_1 &= \left\langle \int_0^\beta d\tau \sum_i (\Psi_i b_i^* + \Psi_i^* b_i) \right\rangle_{Z_{loc}} \\ &= \int_0^\beta d\tau \sum_i (\Psi_i \langle b_i^* \rangle_{Z_{loc}} + \Psi_i^* \langle b_i \rangle_{Z_{loc}}). \end{aligned} \quad (C.34)$$

Podemos calcular los promedios de la ecuación anterior cambiando los campos $(b(\tau), b^*(\tau))$ por los operadores $(\hat{b}(\tau), \hat{b}^\dagger(\tau))$ y cambiando la integración sobre los campos por la traza $\langle \dots \rangle = \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_{loc}} (\dots) \right] / Z_{loc}$. La dependencia temporal de los operadores queda dada en el esquema de Heisenberg. El promedio se puede calcular fácilmente en la base de número, ya que el Hamiltoniano local es diagonal.

$$\begin{aligned} \langle b(\tau) \rangle_{Z_{loc}} &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-(\beta-\tau)\hat{H}_{loc}} \hat{b} e^{-\tau\hat{H}_{loc}} | n \rangle}{Z_{loc}} \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | n-1 \rangle e^{-(\beta-\tau)\varepsilon_{n-1} - \tau\varepsilon_n}}{Z_{loc}} = 0, \end{aligned} \quad (C.35)$$

donde ε_n son las energías de \hat{H}_{loc} . De igual manera, $\langle b^\dagger \rangle_{Z_{loc}} = 0$, por lo que el primer término en la expansión de cumulantes es nulo ($C_1 = 0$). El segundo cumulante es

$$\begin{aligned}
C_2 &= \left\langle \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{i,j} [(\Psi_i(\tau)b_i^*(\tau) + \Psi_i^*(\tau)b_i(\tau))(\Psi_j(\tau')b_j^*(\tau') + \Psi_j^*(\tau')b_j(\tau'))] \right\rangle_{Z_{loc}} \\
&= \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{i,j} [\Psi_i(\tau)\Psi_j^*(\tau') \langle b_i^*(\tau)b_j(\tau') \rangle_{Z_{loc}} + \Psi_i^*(\tau)\Psi_j(\tau') \langle b_i(\tau)b_j^*(\tau') \rangle_{Z_{loc}}],
\end{aligned} \tag{C.36}$$

donde los términos $\langle b_i(\tau)b_j(\tau') \rangle$ y $\langle b_i^\dagger(\tau)b_j^\dagger(\tau') \rangle$ se terminan anulando. También se anulan los términos que son de diferentes sitios al realizar el promedio, por lo que

$$C_2 = 2 \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_i \Psi_i^*(\tau)\Psi_i(\tau') \langle b_i(\tau)b_i^*(\tau') \rangle_{Z_{loc}}. \tag{C.37}$$

Pasando al lenguaje de operadores

$$C_2 = -2 \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_i \Psi_i^*(\tau)\Psi_i(\tau') G_i(\tau - \tau'), \tag{C.38}$$

donde se introdujo la función de Green de un solo sitio $G_i(\tau - \tau') = -T_\tau \langle \hat{b}_i(\tau)\hat{b}_i^\dagger(\tau') \rangle_{Z_{loc}}$ y T_τ el operador de ordenamiento temporal. Esta puede ser fácilmente calculada. Por simetría de traslación temporal tenemos:

$$\begin{aligned}
G(\tau) &= -\langle \hat{b}_i(\tau)\hat{b}_i^\dagger(0) \rangle \\
&= -\frac{1}{Z_{loc}} \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-(\beta-\tau)\hat{H}_{loc}} \hat{b} e^{-\tau\hat{H}_{loc}} \hat{b}^\dagger | n \rangle \\
&= -\frac{1}{Z_{loc}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) e^{-(\beta-\tau)\epsilon_n - \tau\epsilon_{n+1}},
\end{aligned} \tag{C.39}$$

y es la misma para todos los sitios i . Entonces, aproximando hasta el segundo cumulante en (C.30), se sigue que (C.29) es

$$\begin{aligned}
e^{-S[\Psi, \Psi^*]} &= \exp\{-\beta V \mathcal{F}_0\} \\
&\times \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau d\tau' \left[\sum_i \Psi_i^*(\tau)\Psi_i(\tau') G(\tau - \tau') + \sum_{i,j} \Psi_i(\tau) t_{ij}^{-1} \Psi_j^*(\tau') \delta(\tau - \tau') \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{C.40}$$

Ahora utilizamos las siguientes expresiones, aprovechando que el sistema posee simetrías de traslación espacial y temporal.

$$\Psi_i(\tau) = \frac{1}{\sqrt{N_s\beta}} \sum_{\mathbf{q}, \omega} e^{-i\omega\tau - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} \Psi_{\mathbf{q}}, \tag{C.41}$$

$$G(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} e^{-i\omega(\tau - \tau')} G(i\omega), \tag{C.42}$$

$$t_{i,j}^{-1} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}_j} t_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{-1} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{\mathbf{q}}^{-1}, \quad (\text{C.43})$$

donde en (C.43) se utilizó que el término $t_{i,j}^{-1}$ depende de la diferencia $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. N_s es el número de sitios. La suma sobre ω es sobre las frecuencias de Matsubara $\omega = 2\pi n/\beta$, con n un entero. Con las relaciones anteriores, desarrollamos la acción efectiva dada por

$$S_{eff}[\Psi, \Psi^*] \equiv \int_0^\beta d\tau d\tau' \left[\sum_i \Psi_i^*(\tau) \Psi_i(\tau') G(\tau - \tau') + \sum_{i,j} \Psi_i^*(\tau) t_{ij}^{-1} \Psi_j(\tau') \delta(\tau - \tau') \right]. \quad (\text{C.44})$$

Para el primer término

$$\begin{aligned} & \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_i \Psi_i^*(\tau) \Psi_i(\tau') G(\tau - \tau') \\ &= \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_i \frac{1}{N_s \beta^2} \sum_{\mathbf{q}, \omega, \mathbf{q}', \omega'} e^{i\omega\tau} e^{-i\omega'\tau'} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\omega''(\tau-\tau')} G(i\omega'') \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}'} \\ &= \sum_{\mathbf{q}, \omega, \mathbf{q}', \omega', \omega''} \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}'} G(i\omega'') \left(\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\tau(\omega-\omega'')} \right) \left(\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau' e^{i\tau'(\omega'-\omega'')} \right) \left(\frac{1}{N_s} \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_i} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{q}, \omega, \mathbf{q}', \omega', \omega''} \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}'} G(i\omega'') \delta_{\omega, \omega''} \delta_{\omega', \omega''} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \\ &= \sum_{i, \mathbf{q}, \omega} \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}} G(i\omega). \end{aligned} \quad (\text{C.45})$$

Análogamente, para el segundo término de (C.44),

$$\begin{aligned} & \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{i,j} \Psi_i^*(\tau) t_{ij}^{-1} \delta(\tau - \tau') \Psi_j(\tau') \\ &= -\frac{1}{N_s^2 \beta} \sum_{i,j, \mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'', \omega, \omega'} \int_0^\beta d\tau d\tau' e^{i\omega\tau} e^{-i\omega'\tau'} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{q}''\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{\mathbf{q}}^{-1} \delta(\tau - \tau') \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}'} \\ &= -\sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'', \omega, \omega'} \left(\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\tau(\omega-\omega')} \right) \left(\frac{1}{N_s} \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}'')\cdot\mathbf{R}_i} \right) \left(\frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(\mathbf{q}''-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_j} \right) t_{\mathbf{q}}^{-1} \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}'} \\ &= -\sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'', \omega, \omega'} t_{\mathbf{q}}^{-1} \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}'} \delta_{\omega, \omega'} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}''} \delta_{\mathbf{q}', \mathbf{q}''} \\ &= -\sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^{-1} \Psi_{\mathbf{q}}^* \Psi_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (\text{C.46})$$

Por lo tanto, la acción efectiva de (C.44) queda en el espacio de Fourier como

$$\begin{aligned} S_{eff}[\Psi, \Psi^*] &= \sum_{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{q}}^* (-t_{\mathbf{q}}^{-1} + G(i\omega)) \Psi_{\mathbf{q}} \\ &= -\sum_{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{q}}^* \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q}) \Psi_{\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (\text{C.47})$$

donde se definió el propagador $\mathcal{G}^{-1}(q) = t_{\mathbf{q}}^{-1} - G(i\omega)$ y $q = (\mathbf{q}, i\omega)$.

La función de Green $G(i\omega)$ se calcula a partir de (C.39) como

$$\begin{aligned}
G(i\omega) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau} G(\tau) \\
&= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau} \left\{ -\frac{1}{Z_{loc}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) e^{-(\beta-\tau)\varepsilon_n - \tau\varepsilon_{n+1}} \right\} \\
&= -\frac{1}{Z_{loc}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau} e^{-(\beta-\tau)\varepsilon_n - \tau\varepsilon_{n+1}} \\
&= -\frac{1}{Z_{loc}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{e^{-\beta\varepsilon_{n+1}} - e^{-\beta\varepsilon_n}}{\varepsilon_n + i\omega - \varepsilon_{n+1}},
\end{aligned} \tag{C.48}$$

donde al realizar la integral se aprovechó que $e^{i\beta\omega} = e^{i2\pi n} = 1$. Tomando el límite $T = 0$, la función de partición tiende a $Z_{loc} \rightarrow e^{\beta\varepsilon_{n_0}}$, donde n_0 corresponde al estado base del sistema local. Entonces, considerando que $\frac{e^{-\beta\varepsilon_n}}{e^{-\beta\varepsilon_{n_0}}} = e^{-\beta(\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0})} \rightarrow 0$ para $n \neq n_0$, se tiene

$$G(i\omega) = \frac{n_0 + 1}{i\omega + \varepsilon_{n_0} - \varepsilon_{n_0+1}} - \frac{n_0}{i\omega + \varepsilon_{n_0-1} - \varepsilon_{n_0}}. \tag{C.49}$$

Sabemos que la energía del sistema local es $\varepsilon_n = \frac{U}{2}n(n-1) - \mu n$ y $\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + Un - \mu$.

$$\Rightarrow G(i\omega) = \frac{n_0 + 1}{i\omega + \mu - Un_0} - \frac{n_0}{i\omega + \mu - U(n_0 - 1)}. \tag{C.50}$$

También

$$\begin{aligned}
t_{\mathbf{q}} &= -\frac{1}{N_s} \sum_{i,j} t_{i,j} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \\
&= -t \sum_{\mathbf{a}} (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}} + e^{i\mathbf{q} \cdot (-\mathbf{a})}) \\
&= -2t \sum_{l=1}^d \cos(q_l a),
\end{aligned} \tag{C.51}$$

donde \mathbf{a} es un vector base de la red hipercúbica, que aparece por tomar solo en cuenta vecinos más cercanos en la suma, y $a = |\mathbf{a}|$. d es la dimensión del espacio. Entonces, recordando que $\mathcal{G}^{-1}(q) = t_{\mathbf{q}}^{-1} - G(i\omega)$,

$$\mathcal{G}^{-1}(q) = -\frac{1}{2t \sum_{i=1}^d \cos(q_i a_i)} + \frac{n_0 + 1}{i\omega + \mu - Un_0} - \frac{n_0}{i\omega + \mu - U(n_0 - 1)}. \tag{C.52}$$

En el caso estático $q = (0, 0)$, el propagador \mathcal{G} es

$$\mathcal{G}^{-1}(0, 0) = -\frac{1}{2td} + \frac{n_0 + 1}{\mu - Un_0} - \frac{n_0}{\mu - U(n_0 - 1)}. \tag{C.53}$$

El siguiente paso es expandir $\mathcal{G}^{-1}(q)$ alrededor de $q = (0,0)$, ya que aquí se da la transición.

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q}, \omega) \simeq & \mathcal{G}^{-1}(0,0) + \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}(0,0)}{\partial \mu}(i\omega) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{G}^{-1}(0,0)}{\partial \mu^2} \omega^2 + \nabla_{\mathbf{q}} \mathcal{G}^{-1}(0,0) \cdot \mathbf{q} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \mathcal{G}^{-1}(0,0)}{\partial q_i \partial q_j} q_i q_j. \end{aligned} \quad (\text{C.54})$$

Se usó que $\frac{\partial \mathcal{G}^{-1}(0,0)}{\partial \mu} = \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}(0,0)}{\partial i\omega}$. El término con el gradiente $\nabla_{\mathbf{q}}$ se anula, ya que al derivar el coseno, se va a tener un seno evaluado en cero. Sustituyendo el valor de la segunda derivada en \mathbf{q} , se obtiene

$$\mathcal{G}(\mathbf{q}, \omega) \simeq \mathcal{G}^{-1}(0,0) + \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}(0,0)}{\partial \mu}(i\omega) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{G}^{-1}(0,0)}{\partial \mu^2} \omega^2 + \frac{a^2}{4td^2} |\mathbf{q}|^2, \quad (\text{C.55})$$

donde d es la dimensión del espacio. Definiendo $r = -\mathcal{G}^{-1}(0,0)$ dada por (C.53), la acción efectiva se escribe como

$$S_{eff}[\Psi, \Psi^*] = \sum_{\mathbf{q}} |\Psi_{\mathbf{q}}|^2 \left(r - \frac{1}{2} \omega^2 \frac{\partial^2 r}{\partial \mu^2} - \frac{a^2 |\mathbf{q}|^2}{4td^2} + \frac{\partial r}{\partial \mu} i\omega \right). \quad (\text{C.56})$$

Transformando de vuelta al espacio de coordenadas en el límite continuo mediante $\Psi_{\mathbf{q}} = \sqrt{N_s \beta} \int d^d x d\tau e^{i\omega\tau + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \Psi(x, \tau)$, se obtiene

$$S_{eff}[\Psi, \Psi^*] = \int d^d x \int_0^\beta d\tau \left(-\frac{\partial r}{\partial \mu} \Psi^* \partial_\tau \Psi - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 r}{\partial \mu^2} |\partial_\tau \Psi|^2 - \frac{a^2}{4td^2} |\nabla \Psi|^2 + r |\Psi|^2 \right). \quad (\text{C.57})$$

El Hamiltoniano de Bose-Hubbard inicial del sistema tiene simetría global $U(1)$, por lo que la acción efectiva debe conservar la simetría $\Psi \rightarrow \Psi e^{i\phi}$, cosa que cumple. La siguiente corrección que cumple esta condición es un término de orden cuártico, que representa una interacción y el cual lo incluimos en la expansión.

$$S_{eff}[\Psi, \Psi^*] = \int d^d x \int_0^\beta d\tau \left(-\frac{\partial r}{\partial \mu} \Psi^* \partial_\tau \Psi - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 r}{\partial \mu^2} |\partial_\tau \Psi|^2 - \frac{a^2}{4td^2} |\nabla \Psi|^2 + r |\Psi|^2 + \frac{u}{2} |\Psi|^4 \right), \quad (\text{C.58})$$

donde u queda por determinar. Por lo tanto la expresión final de la función de partición es

$$Z = \int \mathcal{D}\Psi(x, \tau) \mathcal{D}\Psi^*(x, \tau) \exp(-\beta V \mathcal{F}_0 - S_{eff}[\Psi, \Psi^*]). \quad (\text{C.59})$$

Referencias

- [1] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, “Boson localization and the superfluid-insulator transition,” *Phys. Rev. B*, vol. 40, pp. 546–570, Jul 1989.
- [2] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, “Cold bosonic atoms in optical lattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, pp. 3108–3111, Oct 1998.
- [3] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. C. Stoof, “Quantum phases in an optical lattice,” *Phys. Rev. A*, vol. 63, p. 053601, Apr 2001.
- [4] D. Hügel and L. Pollet, “Thermodynamics of the bose-hubbard model in a Bogoliubov + u theory,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 224510, Jun 2015.
- [5] S. F. Caballero-Benitez, G. Mazzucchi, and I. B. Mekhov, “Quantum simulators based on the global collective light-matter interaction,” *Phys. Rev. A*, vol. 93, p. 063632, Jun 2016.
- [6] S. F. Caballero-Benitez and I. B. Mekhov, “Quantum optical lattices for emergent many-body phases of ultracold atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 115, p. 243604, Dec 2015.
- [7] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor,” *Science*, vol. 269, no. 5221, pp. 198–201, 1995.
- [8] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, “Evidence of bose-einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 1687–1690, Aug 1995.
- [9] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3969–3973, Nov 1995.
- [10] C. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. New York: Cambridge University Press, 2008.
- [11] M. Lewenstein, A. Sanpera, and A. Verónica, *Ultracold Atoms in Optical Lattices*. Oxford: Oxford University Press, 2012.

- [12] R. P. Feynman, “Simulating physics with computers,” *International Journal of Theoretical Physics*, vol. 21, pp. 467–488, Jun 1982.
- [13] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, “Quantum simulations with ultracold quantum gases,” *Nature Physics*, vol. 8, pp. 267–276, Apr 2012.
- [14] R. Blatt and C. F. Roos, “Quantum simulations with trapped ions,” *Nature Physics*, vol. 8, pp. 277–284, Apr 2012.
- [15] A. Aspuru-Guzik and P. Walther, “Photonic quantum simulators,” *Nature Physics*, vol. 8, pp. 285–291, Apr 2012.
- [16] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms,” *Nature*, vol. 415, pp. 39–44, Jan 2002.
- [17] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics. Volume II: Angular Momentum, Spin and Approximation Methods*. Weinheim: Wiley-VCH, 2020.
- [18] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, “Feshbach resonances in ultracold gases,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 1225–1286, Apr 2010.
- [19] W. Zwerger, “Mott hubbard transition of cold atoms in optical lattices,” *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, vol. 5, pp. S9–S16, apr 2003.
- [20] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. New York: Cambridge University Press, 2011.
- [21] C. Mucio, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- [22] L. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*. Austin: Wiley-VCH, 2016.
- [23] A. Atland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [24] P. Cübela, “Superfluid to mott insulator transition in the bose-hubbard model,” bachelor’s thesis, Ludwig-Maximilians-Universität München, Feb 2019.
- [25] H. T. C. Stoof, K. B. Gubbels, and D. B. M. Dickersheid, *Ultracold Quantum Fields*. Dordrecht: Springer, 2009.
- [26] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, “Critical behavior of the three-dimensional XY universality class,” *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 214503, May 2001.
- [27] J. M. Zhang and R. X. Dong, “Exact diagonalization: the bose–hubbard model as an example,” *European Journal of Physics*, vol. 31, pp. 591–602, apr 2010.

- [28] H. Q. Lin, “Exact diagonalization of quantum-spin models,” *Phys. Rev. B*, vol. 42, pp. 6561–6567, Oct 1990.
- [29] N. V. Prokof’ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupitsyn, “Exact, complete, and universal continuous-time worldline monte carlo approach to the statistics of discrete quantum systems,” *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 87, pp. 310–321, Aug 1998.
- [30] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, “Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 68, pp. 13–125, Jan 1996.
- [31] P. Anders, E. Gull, L. Pollet, M. Troyer, and P. Werner, “Dynamical mean field solution of the bose-hubbard model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 096402, Aug 2010.
- [32] P. Anders, E. Gull, L. Pollet, M. Troyer, and P. Werner, “Dynamical mean-field theory for bosons,” *New Journal of Physics*, vol. 13, p. 075013, jul 2011.
- [33] M. Snoek and W. Hofstetter, “Bosonic dynamical mean-field theory,” 2013.
- [34] H. Ritsch, P. Domokos, F. Brennecke, and T. Esslinger, “Cold atoms in cavity-generated dynamical optical potentials,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 85, pp. 553–601, Apr 2013.
- [35] P. Zupancic, D. Dreon, X. Li, A. Baumgärtner, A. Morales, W. Zheng, N. R. Cooper, T. Esslinger, and T. Donner, “ p -band induced self-organization and dynamics with repulsively driven ultracold atoms in an optical cavity,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123, p. 233601, Dec 2019.
- [36] R. Landig, L. Hruby, N. Dogra, M. Landini, R. Mottl, T. Donner, and T. Esslinger, “Quantum phases from competing short- and long-range interactions in an optical lattice,” *Nature*, vol. 532, pp. 476–479, Apr 2016.
- [37] M. Kardar, *Statistical Physics of Fields*. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.