

**ANÁLISIS DE SISTEMAS CORRELACIONADOS USANDO IONES
ATRAPADOS**

JHON MARIO CÓRDOBA PAREJA

**UNIVERSIDAD DEL CAUCA
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE LA
EDUCACIÓN
INGENIERÍA FÍSICA
POPAYÁN
2018**

**ANÁLISIS DE SISTEMAS CORRELACIONADOS USANDO IONES
ATRAPADOS**

JHON MARIO CÓRDOBA PAREJA

Trabajo de grado como requisito parcial para optar al título de
Ingeniero Físico

Director
SERVIO TULIO PEREZ MERCHANCANO Ph.D.

**UNIVERSIDAD DEL CAUCA
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE LA
EDUCACIÓN
INGENIERÍA FÍSICA
POPAYÁN
2018**

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1.	Estado de aislante Mott metaestable con interacciones atractivas [16].	14
1.2.	Átomos de rubidio atrapados en una red óptica, utilizados para exhibir una conductancia diferencial negativa [17].	16
2.1.	Modelo para dos átomos de Hidrógeno [18].	22
3.1.	Esquema de las configuraciones de estado de tres Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones repulsivas. . . .	31
3.2.	Energía de repulsión de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de tres Bosones y un Fermión en una red óptica.	32
3.3.	Esquema de las configuraciones de estado de tres Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones atractivas. . . .	33
3.4.	Energía de atracción de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de tres Bosones y un Fermión en una red óptica.	34
3.5.	Esquema de las configuraciones de estado de cuatro Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones repulsivas. . . .	35
3.6.	Energía de repulsión de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de cuatro Bosones y un Fermión en una red óptica.	36
3.7.	Esquema de las configuraciones de estado de cuatro Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones atractivas. . . .	36
3.8.	Energía de atracción de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de cuatro Bosones y un Fermión en una red óptica.	37

CONTENIDO

Resumen	6
Introducción	7
Agradecimientos	9
1. Fenómenos Emergentes en Materia Condensada	10
1.1. Resumen	10
1.2. Física de la Materia Condensada	10
1.3. Fenómenos críticos y Transiciones de Fase	11
1.3.1. Transiciones de Fase	11
1.3.2. Fenómenos críticos	12
1.4. Sistemas Fuertemente Correlacionados	13
1.4.1. Transición de Mott	13
1.5. Redes Ópticas	14
2. Sistemas atómicos fríos: Métodos y Propiedades	17
2.1. Resumen	17
2.2. Método de Enlace Fuerte	18
2.2.1. Formulación general	18
2.2.2. Funciones de Wannier	19
2.2.3. Segunda Cuantización	20
2.3. Modelo de Heisenberg	21
2.4. Modelo de Ising	24
2.5. Modelo de Hubbard	25

3. Redes Ópticas y Iones Atrapados	28
3.1. Modelo de Bose-Fermi-Hubbard	29
3.2. Configuración del Estado Fundamental	29
3.2.1. Configuración de Estado Fundamental con Cuatro Bosones y un Fermión	30
3.3. Resultados	31
3.3.1. Configuración de Estado Fundamental con Cuatro Bosones y un Fermión	34
3.4. Conclusión	37
4. Conclusiones Generales	39
A. Clasificación de las Partículas	41
A.1. Partículas idénticas	41
A.1.1. Estados Completamente Simétricos y Antisimétricos	43
A.2. Bosones	43
A.2.1. Estados, Espacio de Fock, Operadores de Creación y Aniquilación	43
A.2.2. Operador Número de Partícula	44
A.3. Fermiones	45
A.3.1. Estados, Espacio de Fock, Operadores de Creación y Aniquilación	45
B. Técnicas de Aproximación	46
B.1. Aproximación de Hartree	46
B.2. Aproximación de Hartree-Fock	48
B.3. Teoría de Campo Medio	50
B.3.1. Campo Medio	51

Resumen

En este proyecto se propone investigar sistemas fuertemente correlacionados generando para ello, estados mezclados entre pequeños grupos de fermiones y bosones los cuales se pueden permutar estando sujetos a un potencial armónico en una red óptica a bajas temperaturas. En este caso, se construye una banda de energía a través del hamiltoniano Hubbard-Fermi con el propósito de determinar la energía fundamental de las diferentes mezclas de partículas en redes ópticas.

El método que se sigue es la diagonalización matricial de diferentes estados mecánico cuánticos con el fin de observar el comportamiento de las energías del sistema en presencia de fermiones o bosones usando el hamiltoniano de Bose-Fermi-Hubbard, en el cual se tiene en cuenta la simetría de configuración del estado fundamental a través de una función de bosones y la interacción entre partículas vecinas.

El resultado que se pretende obtener es el comportamiento de la energía fundamental compuestas por iones atrapados en las redes ópticas en términos de los cambios que se susciten cuando se permutan diferentes tipos de partículas considerando las posibles correlaciones cuánticas que faciliten los diferentes procesos físicos que aquí se producen. En particular, la idea de trabajar con fermiones y bosones es también mostrar estados macroscópicos de la interacción entre las diferentes especies que se analizan a través de la teoría de campo medio.

Introducción

La materia condensada es un campo de la física que se ocupa de las características físicas de la materia. Siendo objeto de una alta investigación científica, ofrece resultados experimentales y teóricos que permiten mejorar aspectos de la tecnología actual y la convierte en una de las líneas con mayor desarrollo técnico, científico y tecnológico[1]. Como soporte fundamental de las investigaciones dentro de este campo están las redes ópticas, las cuales son herramientas creadas debido a la intersección de múltiples rayos laser en los cuales se atrapan diferentes átomos para una manipulación controlada de los mismos[2], lo cual es de gran importancia para la fabricación de diferentes materiales con características deseadas para su aplicación como: los fermiones pesados, algunos materiales orgánicos, las manganitas, los ruthenatos, los cupratos, los superconductores de hierro y muchos más.

Recientemente la investigación de sistemas fuertemente correlacionados se ha encaminado fundamentalmente en la capacidad de atrapar iones en potenciales periódicos que se crean por medio de redes ópticas. Tales sistemas permiten obtener un mayor conocimiento de fenómenos que ocurren a nivel atómico como las transiciones de fase, especialmente la transición entre superfluido y aislante de Mott[3]. En general, tales fenómenos emergentes son tan diversos y surgen de las interacciones entre sus elementos constituyentes y el entorno. El resultado de investigaciones de estos fenómenos ha generado diferentes aplicaciones de utilidad para la sociedad y ha despertado el interés en ser este campo de la física, donde saber describir de forma matemática las interacciones entre partículas es crucial[4].

Teniendo en cuenta lo anterior, se va a realizar el estudio de un sistema conformado por un anillo de tres sitios con una cantidad controlada de bosones y fermiones[26], a través del modelo Bose-Fermi-Hubbard (*BFH*)[5]. Se analizarán las configuraciones posibles de estas partículas en el estado fundamental, teniendo en cuenta que estas hacen parte de una red óptica se obtendrán las curvas de energía que describen las diferentes fases presentes[6].

Este trabajo se encuentra dividido en tres capítulos. En el primer capítulo se realiza una introducción a los fenómenos emergentes en materia condensada además de algunos elementos necesarios para la elaboración este trabajo de grado. En el segundo capítulo se presentan los métodos necesarios para describir sistemas atómicos fríos para obtener el modelo BFH. En el tercer capítulo se realiza la descripción del modelo BFH aplicado en las distintas configuraciones de las partículas en el estado fundamental, y así obtener las curvas de energías para analizar la estructura del estado fundamental al igual que las fases presentes en el sistema.

Agradecimientos

Este trabajo fue desarrollado gracias a la motivación académica que realizó el profesor Jereson Silva Valencia del Departamento de Física de la Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá en el área física de sistemas ultrafríos.

Agradezco infinitamente a mi Alma Máter, la Universidad del Cauca, por su apoyo decidido, generoso y desinteresado durante mis estudios de pregrado y en muchas otras ocasiones a través de sus múltiples instancias.

Al Departamento de Física y al programa de Ingeniería Física. En particular al jefe de departamento Dr. Carlos Rincón y al coordinador del programa Msc. Luis Fernando Echeverri, por su constante ayuda durante mis años de permanencia en el programa de Ingeniería Física.

Al Grupo de Semiconductores y Nuevos Materiales, lugar donde estude y realice mi trabajo de grado. Particularmente a los profesores Dr. Servio Tulio Pérez, Dra. Luz Elena Bolívar, Msc. Pablo Salazar y demás integrantes del grupo de investigación por su ayuda en la perspectiva de mi trabajo de grado.

A mi asesor de tesis el Dr. Servio Tulio Pérez Merchancano. Quiero expresar el agradecimiento especial por su apoyo incesante, motivación y ayuda que me brindo para la realización de este trabajo de grado.

A toda la planta docente de la Facultad de Ciencias Naturales Exactas y de la Educación. En particular a los docentes del programa de Ingeniería Física que me enseñaron tanto de la profesión como de la vida, impulsándome siempre a seguir adelante.

Al jurado del examen de grado integrado por: Dra. Alejandra Isabel Guerrero y Msc. Jorge Washington Coronel.

1. Fenómenos Emergentes en Materia Condensada

1.1. Resumen

En este trabajo se explora la interacción entre sistemas de baja dimensionalidad, correlaciones fuertes y fluctuaciones cuánticas que dan lugar a nuevos estados emergentes de la materia en sistemas cuánticos de la materia condensada. Por “fenómenos emergentes”, se hace referencia a un sistema de muchos cuerpos cuyos miembros interactúan entre sí produciendo un comportamiento colectivo complejo, el cual es cualitativamente diferente del comportamiento de las partes constituyentes al cambiar las escalas de energía. El análisis teórico del acoplamiento entre fermiones y bosones en redes ópticas por ejemplo, es en la actualidad un trabajo desafiante ya que muestra interacciones entre partículas que hacen posible el estudio de correlaciones entre ellas, generando restricciones de tipo geométrico y energético, lo cual limita el nivel de predicción de fenómenos críticos debido a las diferentes fluctuaciones cuánticas a muy bajas temperaturas.

1.2. Física de la Materia Condensada

La materia condensada es un campo de la física, de alta investigación científica y desafío intelectual que toca, los fundamentos de la mecánica cuántica, mecánica estadística, ingeniería y ciencia de materiales, ofreciendo resultados teóricos y experimentales, proyectando un aumento de velocidades de procesamiento y capacidad de almacenamiento de información, en la tecnología actual; convirtiéndola en una de las líneas con mayor desarrollo técnico, científico y tecnológico.

En materia condensada los fenómenos emergentes involucran interacciones entre quarks y leptones, formando átomos y moléculas en enormes cantidades, responsables de modelar la denominada materia a escala macroscópica. Este tipo de sustancia existe en varios estados. Los estados más comunes son el estado sólido, líquido y gaseoso.

La fase condensada se refiere a átomos y otras partículas microscópicas en posiciones muy cercanas y experimentan importantes efectos de interacciones de corto alcance, por tal razón el estado gaseoso no pertenece a la materia condensada. Además de las fases líquidas y sólidas existen otro tipo de fases exóticas, en las cuales se destacan las fases a bajas temperaturas como: el condensado de Bose-Einstein, gas de Fermi, líquido de Fermi, condensado fermiónico, líquido de Luttinger y superfluido [7, 8]. Actualmente, la investigación en esta área se ha encaminado al estudio de atrapamiento de gases ultrafríos degenerados cuánticamente en potenciales periódicos creados por redes ópticas, que han abierto el camino a la realización de nuevos sistemas en materia condensada. Tales sistemas, permiten obtener un mayor conocimiento de los problemas fundamentales de la física de muchos cuerpos más allá del acoplamiento débil involucrando el régimen de campo medio y la transición entre superfluido y aislante de Mott en el formalismo de los sistemas fuertemente correlacionados, del cual surgen nuevos fenómenos, como el magnetismo cuántico.[3] En general, estos fenómenos emergentes pertenecen a las transiciones de fase cuántica y sus mecanismos dependen fuertemente de la geometría de red y de la interacción entre los átomos atrapados [2]. El interés del estudio experimental y teórico de estos efectos se concentra en múltiples aplicaciones tecnológicas. Por ejemplo, los sistemas nanoscópicos fuertemente correlacionados pueden utilizarse en el proceso de preparación y manipulación controlada de diferentes estados cuánticos usados en la actualidad en la información cuántica, al igual que en sistemas de nanoelectromecánica, microscopía de resonancia magnética, transporte del calor en sistemas nanoscópicos y transporte del espín.[9, 4]

1.3. Fenómenos críticos y Transiciones de Fase

1.3.1. Transiciones de Fase

En materia condensada existe una rica variedad de procesos físicos descritos y examinados a través de transiciones de fase influenciadas por la temperatura, densidad, presión y campos externos. El interés por entender dichas transiciones, se debe a que este es un fenómeno en el que se produce un cambio drástico entre los diferentes estados termodinámicos generando una caracterización de las propiedades macroscópicas analizadas teóricamente como el surgimiento de una discontinuidad en funciones que representan cantidades físicas como la energía interna (E) y la entropía (S) del sistema.[10]

Conforme a la taxonomía de las transiciones de fase es referida al grado de singularidad. Cuando la derivada de primer orden de la energía libre (F) muestra una discontinuidad, la transición es de primer orden. En la práctica, las transiciones de

primer orden se identifican por estar asociadas con un calor latente o entalpia de transformación. La transición se llama continua, si las derivadas de segundo u orden superior de la energía libre muestran una discontinuidad. Por ejemplo, las Transiciones de fase de segundo orden son continuas en la primera derivada, pero exhiben discontinuidad en una segunda derivada de la energía libre [11, 10].

1.3.2. Fenómenos críticos

Durante los últimos 30 años, el área de fenómenos críticos se ha convertido en una de las ramas de la física de la materia condensada que ha despertado el interés científico, debido a su influencia en las transiciones de fase ocurridas en la naturaleza facilitando el estudio de sistemas, en particular a muy bajas temperaturas donde el término de fenómenos críticos se refiere a las propiedades termodinámicas cercanas a una temperatura critica T_C de una transición de fase de segundo orden como la ocurrida de aislante a conductor.[12]

El comportamiento de magnitudes físicas con la temperatura en las proximidades de las transiciones de fase se puede explicar mediante exponentes críticos descriptores de la naturaleza de las singularidades, en varias cantidades mensurables. Tales cantidades son seis, comúnmente denotados por letras griegas: $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \nu$ [14, 13]. A continuación, se muestra la dependencia de capacidad calorífica (C), magnetización (M), susceptibilidad (χ) y la ecuación de estado con los exponentes críticos[12]:

$$\begin{aligned} C &\sim |t|^{-\alpha}, \\ M &\sim |t|^\beta, \\ \chi &\sim |t|^{-\gamma}, \\ M &\sim H^{-\frac{1}{\delta}}. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Donde t es una temperatura reducida dada por:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C}. \tag{1.2}$$

En el límite $t \rightarrow 0$, cualquier cantidad termodinámica se puede descomponer en una parte “regular”, que permanece finita, más una parte “singular” que puede ser divergente o tener derivadas divergentes. La parte singular se supone que es proporcional a cierta potencia de t , generalmente fraccional[12]. Los dos últimos exponentes, se refieren a la función de correlación ($\Gamma(r)$), que tiene la forma de Ornstein-Zernike[13]

$$\Gamma(r) \xrightarrow{t \rightarrow 0} r^{-p} e^{-\frac{r}{\xi}}, \tag{1.3}$$

entonces, η y ν , se definen a partir de la longitud de correlación (ξ) y la decadencia de la ley de orden (p)

$$\begin{aligned}\xi &\sim |t|^\nu, \\ p &= d - 2 + \eta.\end{aligned}\tag{1.4}$$

Donde d es la dimensionalidad del espacio.[13]

1.4. Sistemas Fuertemente Correlacionados

Los sistemas fuertemente correlacionados son aquellos donde la interacción entre las partículas no se puede despreciar lo que hace que el problema sea muy difícil de resolver puesto que no se puede simplificar a una teoría efectiva de una partícula como en los metales descritos por la teoría del líquido de Fermi. Un ejemplo de ellos es el aislante de Mott.[3]

1.4.1. Transición de Mott

Las transiciones entre fases metálicas y aislante pueden interpretarse en algunos casos en la representación de bandas. Para ello se considera un metal simple con un número par de electrones por átomo, dado que el número de estados en cualquier banda es el doble del número de las celdas unitarias, los materiales que poseen un número par de electrones por átomo y que cristalizan en una estructura con una celda unitaria monoatómica deberían tener bandas completamente llenas o vacías a menos que las bandas se superpongan. Los niveles de energía atómica se recuperan en el límite de grandes distancias cuando los átomos se independizan. La superposición entre bandas desaparece a un valor crítico de la distancia interatómica. Si la banda inferior está completamente llena y la banda superior está vacía, el sistema se vuelve aislante. Es decir, un sólido cristalino hay bandas de energía con estados cuánticos en el espacio de Fourier permitidos y otros prohibidos (*gap*). Si todos los estados cuánticos de la última banda ocupada están llenos, obtenemos un aislante y, si está parcialmente llena, tenemos un metal. Para los parámetros de red más pequeños, el material es metálico. En este tipo de transición de metales a no metales se conoce como la superposición de bandas o transición de Wilson. Los aislantes se conocen como sistemas de Bloch-Wilson[3]. En la figura (1.1) se observa una representación de un aislante de Mott en una red óptica donde se observa interacciones atractivas entre átomos ultrafríos de gran importancia para la caracterización de simuladores cuánticos.

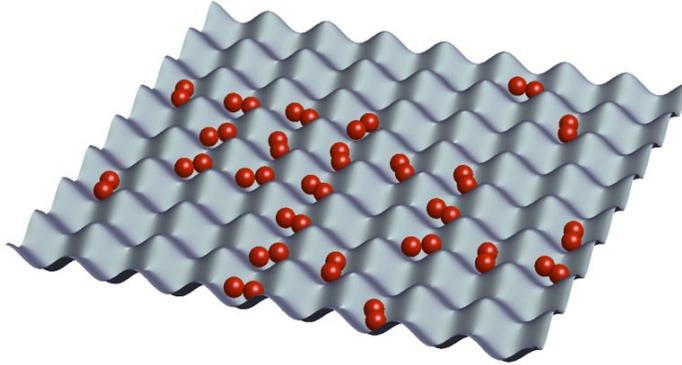


Figura 1.1: Estado de aislante Mott metaestable con interacciones atractivas [16].

Teniendo en cuenta lo anterior, en un cristal constituido de átomos monovalentes¹ los electrones fuera de la coraza forman una banda media llena y el sistema es metálico incluso si la distancia entre átomos es tan grande que la superposición de las funciones de onda es exponencialmente pequeña y la probabilidad de que un electrón salte a sitios vecinos es casi insignificante. Esto se debe a que las interacciones electrón-electrón no se tienen en cuenta en los cálculos de la estructura de la banda. Si la función de onda de la banda media llena descrita en términos de funciones extendidas de Bloch o en estados de Wannier localizados, genera una energía mucho más alta que las configuraciones con un electrón en la que actúa la repulsión de Coulomb intra atómica que crea una banda suficientemente estrecha, las fluctuaciones de carga se bloquean y los electrones se localizan. De esta forma, Mott sugirió que el factor dominante que determina si un sistema de electrones es metálico o no metálico es la competencia entre la energía cinética y la energía de Coulomb que tiende a unir los electrones a los átomos.[3, 15, 18]

1.5. Redes Ópticas

La interacción de partículas fuertemente correlacionadas ha despertado mucho interés a la comunidad científica durante la última década, debido a las potenciales aplicaciones en sistemas fríos tales como redes ópticas las cuales presentan diferentes tipos de transiciones. Estas transiciones se pueden detectar a partir del estudio de las energías del estado fundamental para determinados potenciales y un número controlado de fermiones y bosones. Permitiendo estudiar el comportamiento de energías del estado fundamental en términos de potenciales de interacción controlando el número

¹Átomos monovalentes son aquellos que tienen valencia o número de oxidación igual a uno.

de fermiones y bosones. [19]

Una red óptica se genera superponiendo dos rayos láser en contrapropagación. Debido a la interferencia entre los dos rayos láser se forma una onda estacionaria óptica con período $\frac{\lambda}{2}$, en la cual los átomos pueden quedar atrapados. En la figura (1.2) observamos una representación en tres dimensiones de una red óptica con átomos de rubidio atrapados los cuales se observa una conductancia. De manera más general, al elegir los dos rayos láser para interferir bajo un ángulo inferior a 180° , también se pueden fabricar potenciales periódicos con un ciclo más largo. El potencial óptico más simple posible se forma superponiendo dos haces contrapropagantes, esto genera un potencial de captura de la forma:

$$V(r, z) = -V_0 \cdot e^{-2r^2/w^2(z)} \cdot \sin^2(kz), \quad (1.5)$$

donde el vector de onda de la luz láser es $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, V_0 la profundidad máxima del potencial de red que es cuatro veces mayor que el potencial de atrapamiento, z es la dirección de propagación, r es la distancia entre cada pozo de potencial y $w(z)$ es el ancho de cada pozo [2]. Así mismo, los potenciales periódicos en dos dimensiones pueden formarse superponiendo dos ondas estacionarias a lo largo de direcciones ortogonales. El potencial óptico resultante en el centro de la trampa, es entonces una suma simple de un potencial puramente sinusoidal en ambas direcciones. Para la creación de una red óptica tridimensional, tres ondas estacionarias ortogonales deben superponerse. El caso más simple de ondas estacionarias independientes, sin interferencia cruzada entre rayos láser de diferentes ondas estacionarias, se puede realizar eligiendo vectores de polarización ortogonales y también utilizando longitudes de onda ligeramente diferentes para las tres ondas estacionarias.[9] De manera semejante se utiliza un confinamiento magnético, que también debe tenerse en cuenta para el confinamiento armónico total de la nube atómica.

Las principales ventajas que ofrecen las redes ópticas son:

- i)* Los átomos se mueven en un potencial que puede ser controlado dinámicamente. La profundidad del potencial puede cambiarse controlando las intensidades de los rayos ópticos, haciendo que las interacciones entre los átomos puedan también ser cambiadas. Además, eligiendo frecuencias ligeramente diferentes de los haces involucrados, es posible hacer una red móvil donde los diferentes sitios (o trampas) se mueven con una cierta velocidad manejable.[2]
- ii)* Se puede elegir la geometría y la constante de la red.[20]
- iii)* En una red óptica la dimensión del gas cuántico se puede cambiar de $3D$ a $1D$ o $2D$.[20]

Esencialmente, las investigaciones se han centrado en iones atrapados, que consisten en aislar átomos individuales en un entorno controlado, de forma que no exista

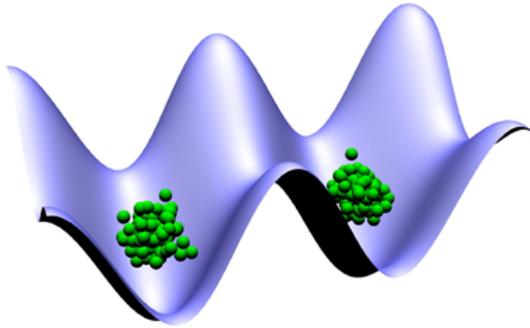


Figura 1.2: Átomos de rubidio atrapados en una red óptica, utilizados para exhibir una conductancia diferencial negativa [17].

ninguna interferencia con el entorno. Además de atrapar átomos, las redes ópticas se han utilizado ampliamente para cristales fotónicos. También son útiles para clasificar partículas microscópicas. Los átomos en una red óptica proporcionan un sistema cuántico ideal donde todos los parámetros se pueden manipular. Por lo tanto, pueden usarse para estudiar efectos que son difíciles de observar en cristales reales. Los mejores relojes atómicos del mundo usan átomos atrapados en redes ópticas, para obtener líneas espectrales estrechas que no se ven afectadas por el efecto Doppler y el retroceso.[1, 8]

2. Sistemas atómicos fríos: Métodos y Propiedades

2.1. Resumen

La materia formada por iones pesados hacen parte de los sistemas complejos que presentan un amplio rango de comportamientos colectivos, dentro de los cuales se pueden ennumerar la superconductividad, la superfluidez y el magnetismo cuántico; el entendimiento y control de la naturaleza de la materia ha generado avances tecnológicos que han transformado de manera trascendental y en múltiples aspectos, la vida cotidiana así como la concepción del entorno. Desde un punto de vista básico y fundamental, estos avances se resumen en haber alcanzado un control sin precedentes de los estados cuánticos de sistemas ópticos y materiales en muchos de sus grados de libertad. Los átomos y moléculas a temperaturas extremadamente bajas mantienen un acoplamiento coherente tanto con otros átomos que los rodean como con el campo electromagnético al que están sujetos. Estos sistemas pueden mantener su coherencia cuántica al evolucionar ante campos magnéticos y ópticos controlados. El control cuántico permite el desarrollo de protocolos útiles para la ingeniería y la física fundamental. Por ejemplo, se puede implementar lo que se llama un “simulador cuántico” que corresponde a la realización de sistemas efectivos que simulan con alta precisión estados entrelazados útiles para el entendimiento de la materia condensada. En este contexto, es fundamental el análisis de primeros principios que rigen el estudio de sistemas colectivos de baja dimensionalidad y su aplicación en nanociencia y nanotecnología. A continuación se mencionan dichos fundamentos para el estudio de redes ópticas y iones atrapados que es la base fundamental de este trabajo de grado.

2.2. Método de Enlace Fuerte

2.2.1. Formulación general

El método de enlace fuerte analiza los estados propios atómicos que se localizan en pozos individuales y permite que se generen estados microscópicos de manera colectiva a primeros vecinos facilitando una probabilidad finita de que el electrón se encuentre en un pozo vecino. En la vecindad de cada punto, se puede considerar un hamiltoniano completo del cristal periódico, H , que puede ser aproximado por el de un solo átomo situado en un punto determinado, (H_{at}) [15]. Además asumiendo que los niveles enlazados (Ψ_n) del hamiltoniano atómico están bien localizados se puede determinar la ecuación de Schrödinger para un átomo en el origen:

$$H_{at}\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad (2.1)$$

en donde se necesita que la función de onda $\Psi_n(r)$ sea muy pequeña cuando r exceda una distancia del orden de la constante de red[15]. Considerado lo anterior, se conforma un hamiltoniano del cristal (H) como

$$H = H_{at} + \Delta U(r), \quad (2.2)$$

en el cual $\Delta U(r)$ contiene todas las correcciones al potencial atómico requerido para producir el potencial completo del cristal.¹ A través de la descripción de Bloch se desarrolla las funciones propias para el hamiltoniano (2.2), para las cuales se debe encontrar las N combinaciones lineales de las funciones de onda degeneradas que satisfacen la condición de Bloch², en donde las combinaciones lineales son:

$$\Psi_{nK}(r) = \sum_R e^{iK \cdot R} \Psi_n(r - R), \quad (2.3)$$

donde el vector de onda K varía a través de los N valores en la primera zona de Brillouin y el vector R en la red de Bravais [15]. La función de onda (2.3) satisface la condición de Bloch con el vector K , mientras que continua mostrando el carácter atómico de los niveles. Del mismo modo, las bandas de energía tienen poca estructura, entonces para remediar esta deficiencia $\Psi_n(r)$ se vuelve más pequeña, pero no exactamente cero, antes de que $\Delta U(r)$ sea apreciable. Esto sugiere una solución a la ecuación completa del cristal que conserve la forma general de la ecuación (2.3):

$$\Psi(r) = \sum_R e^{iK \cdot R} \phi(r - R), \quad (2.4)$$

¹Ver apéndice B. Técnicas de Aproximación.

²La condición de Bloch o teorema de Bloch describe el movimiento de los electrones en un sólido, basándose en la idea de que un sólido posee una estructura microscópica periódica, es decir: $\Psi(r + R) = e^{iK \cdot R} \Psi(r)$, para cada R en la red de Bravais.

donde $\phi(r - R)$ son las funciones de Wannier que se estudian en la sección 2.2.2. Si el producto $\Delta U(r) \Psi_n(r)$, diferente de cero, es excesivamente pequeño, se puede esperar que la función $\phi(r)$ este muy cerca de la función de onda atómica [15],

$$\phi(r) = \sum_n b_n \Psi_n(r), \quad (2.5)$$

en el cual b_n son coeficientes. La ecuación de Schrödinger del cristal es:

$$H\Psi(r) = (H_{at} + \Delta U(r)) \Psi(r) = \varepsilon(K)\Psi(r). \quad (2.6)$$

Si se considera la función de onda atómica Ψ_m^* (donde el subíndice m indica un nivel específico) ésta se integra sobre todos los r usando el hecho de que,

$$\int \Psi_m^* H_{at} \Psi(r) dr = \int (H_{at} \Psi_m(r))^* \Psi(r) dr = E_m \int \Psi_m^*(r) \Psi(r) dr. \quad (2.7)$$

De esta forma se determina que [15]:

$$(\varepsilon(K) - E_m) \int \Psi_m^*(r) \Psi(r) dr = \int \Psi_m^*(r) \Delta U(r) \Psi(r) dr, \quad (2.8)$$

y usando la ortonormalidad de las funciones de onda atómica,

$$\int \Psi_m^*(r) \Psi_n(r) dr = \delta_{nm}, \quad (2.9)$$

se llega a una ecuación de valores propios que especifica los coeficientes $b_n(K)$ y las energías propias de Bloch $\varepsilon(K)$ [15]:

$$\begin{aligned} (\varepsilon(K) - E_m) b_m = & -(\varepsilon(K) - E_m) \sum_n \left(\sum_{R \neq 0} \int \Psi_m^*(r) \Psi_n(r - R) e^{iK \cdot R} dr \right) b_n \\ & + \sum_n \left(\int \Psi_m^*(r) \Delta U(r) \Psi_n(r) dr \right) b_n \\ & + \sum_n \left(\sum_{R \neq 0} \int \Psi_m^*(r) \Delta U(r) \Psi_n(r - R) e^{iK \cdot R} dr \right) b_n. \end{aligned} \quad (2.10)$$

La ecuación (2.10) nos describe la estructura de las bandas en un sólido.

2.2.2. Funciones de Wannier

Las funciones de Bloch para cualquier banda pueden escribirse en la forma (2.3) en la que se basa la aproximación de enlace fuerte. Las funciones ϕ desempeñan el

papel de las funciones de onda atómica que se conocen como funciones de Wannier. Para establecer que cualquier función de Bloch $\Psi_{nK}(r)$ se pueda escribir en la forma (2.3), primero se escribe como función de vector K para un r fijo [15]. Si $\Psi_{nK}(r)$ es periódica en la red recíproca, se puede realizar una expansión en series de Fourier de ondas planas con vectores de onda en la red directa. Así, para cualquier r fijo, se puede escribir:

$$\Psi_{nK}(r) = \sum_R f_n(R, r) e^{iR \cdot K}, \quad (2.11)$$

donde los coeficientes en la suma dependen de r , así como de los vectores de onda, ya que para cada r se genera una función diferente de K que se está expandiendo.[18] La ecuación (2.11) es de la forma de la ecuación (2.3), siempre que la función $f_n(R, r)$ dependa de r y R . Pero si r y R son desplazados por el vector de red R_0 , entonces f no tiene cambios como una consecuencia directa de la ecuación (2.11). Así $f_n(R, r)$ tiene la forma:

$$f_n(R, r) = \phi_n(r - R), \quad (2.12)$$

que es la nueva función de Wannier [15].

2.2.3. Segunda Cuantización

Adecuar un formalismo físico y matemático construido a partir de una base de estados localizados $\{|i\rangle\}$ en cada i -ésimo átomo facilita que el hamiltoniano de interacción de enlace fuerte se pueda analizar de manera más sencilla eligiendo un conjunto de estados que estudie la interacción colectiva. Tal elección, depende de la medida de los estados atómicos originales que se superponen con sus vecinos.[21]

Considerando C_i^\dagger el operador de creación y C_i el operador de aniquilación de un electrón en el estado $|\phi_i\rangle$, se forma el hamiltoniano aproximado \hat{H}_{tb} para un electrón en una colección de pozos de potencial de la forma³

$$\hat{H}_{tb} = \sum_i U_i C_i^\dagger C_i, \quad (2.13)$$

donde U_i es la energía del estado ligado en el sitio i . Para un electrón en el estado $|\phi_j\rangle$ se generan funciones de onda que se extienden hacia los pozos vecinos, dando al electrón una amplitud finita para saltar a un sitio adyacente [21]. A esta amplitud de salto t , se le añade un efecto en términos de los operadores de creación y aniquilación como: $-tC_1^\dagger C_0$. Haciendo esto para todos los sitios y teniendo en cuenta solo los vecinos más cercanos, se tiene el modelo completo de enlace fuerte en una

³Ver apéndice A. Clasificación de las Partículas.

dimensión[21]:

$$\hat{H}_{tb} = \sum_i -t\{C_i^\dagger C_{i+1} + C_{i+1}^\dagger C_i\} + \sum_i U_i C_i^\dagger C_i. \quad (2.14)$$

El término de superposición entre los orbitales vecinos se denomina amplitud de salto y está dada de la forma:

$$t = - \int dr \phi^*(r - \rho) \hat{H} \phi(r), \quad (2.15)$$

donde ϕ son las funciones de Wannier. Los estados propios deben obedecer el teorema de Bloch, así que teniendo una combinación lineal de orbitales atómicos como soluciones estimadas para los estados propios del hamiltoniano completo del cristal, se puede llegar a:

$$|K\rangle = \Psi_{nK}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{iK \cdot R} \phi_n(r - R), \quad (2.16)$$

donde R son los vectores reticulares y N es el número de celdas en el cristal.[21]

2.3. Modelo de Heisenberg

El modelo de Heisenberg es un modelo mecánico cuántico de muchos cuerpos que ayuda al estudio de fenómenos colectivos entre los conocidos se destacan tanto los fenómenos críticos como las transiciones de fase y las interacciones magnéticas, de común acuerdo con otros modelos como el de Ising e involucra también los efectos de espín. En esta sección se describe dicho modelo para un conjunto de partículas que indican un modelo colectivo trivial.

Considerando dos átomos de Hidrógeno separados por una distancia R como se muestra en la figura (2.1), donde a y b representan los núcleos, 1 y 2 simbolizan los electrones, r_{a_1} y r_{b_2} son las distancia del núcleo al electrón, r_{a_2} y r_{b_1} las distancias del nucleo al electron vecino y r_{12} la distancia entre los electrones [18, 3]. Los átomos de Hidrógeno en el estado fundamental, son descritos por los hamiltonianos:

$$H_0^a(1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{a_1}} \quad y \quad H_0^b(2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{b_2}}. \quad (2.17)$$

Sean $\Psi_a(1)$ y $\Psi_b(2)$ las funciones de onda espaciales del estado fundamental, es decir:

$$H_0^a \Psi_a(1) = E_0 \Psi_a(1), \quad H_0^b \Psi_b(2) = E_0 \Psi_b(2), \quad (2.18)$$

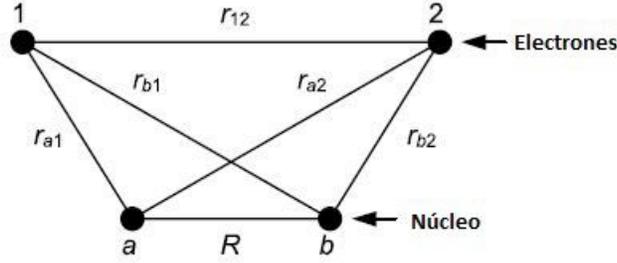


Figura 2.1: Modelo para dos átomos de Hidrógeno [18].

donde E_0 es la energía del estado fundamental del átomo de Hidrógeno. Las funciones de onda moleculares del Hidrógeno de orden cero pueden escribirse como[18]:

$$\Psi_{\pm} = \Psi_a(1)\Psi_b(2) \pm \Psi_a(2)\Psi_b(1). \quad (2.19)$$

Tomando la aproximación de Heitler-London⁴ para las funciones de onda no normalizadas, se obtiene que:

$$E_{\pm} \cong \frac{\int \Psi_{\pm} H \Psi_{\pm} d\tau_1 d\tau_2}{\int \Psi_{\pm}^2 d\tau_1 d\tau_2}, HH \quad (2.20)$$

en donde $\tau_i = dx_i dy_i dz_i$. Utilizando las funciones de onda reales para estados estacionarios, se generan los correspondientes valores propios normalizados[18]:

$$\Psi_{\pm}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S)}} [\psi_1(1, 2) \pm \psi_2(1, 2)], \quad (2.21)$$

en el cual, S es la integral de solapamiento⁵ y,

$$\begin{aligned} \Psi_1(1, 2) &= \Psi_a(1)\Psi_b(2), \\ \Psi_2(1, 2) &= \Psi_a(2)\Psi_b(1). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Sea Ψ_+ una función simétrica en el intercambio de coordenadas 1 y 2, y Ψ_- es una función antisimétrica en el intercambio de coordenadas⁶ 1 y 2 [18]. Así, la función de onda total Ψ_T es una superposición de ambas funciones. Denotando $\alpha(i)$ como la función de onda del electrón i con “espín hacia arriba” y $\beta(j)$ como la función

⁴La aproximación de Heitler-London es también conocida como método de enlace de valencia y es empleada para determinar la variación energética cuando dos átomos, cada uno con un electrón se acercan y forman una molécula.

⁵La integral de solapamiento está definida como: $S = \int \Psi_1(1, 1)\Psi_2(1, 2)d\tau_1 d\tau_2$

⁶ver apéndice A. Clasificación de las Partículas

de onda del electrón j con “espín hacia abajo”, entonces la función de onda total se puede escribir como[18]:

$$\begin{aligned} \Psi_T^+ &= \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\Psi_1 + \Psi_2) \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] , \\ \Psi_T^- &= \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\Psi_1 - \Psi_2) \begin{cases} \alpha(1)\alpha(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] \\ \beta(1)\beta(2). \end{cases} \end{aligned} \quad (2.23)$$

La función Ψ_T^+ tiene espín total igual a 0, es decir, que es un estado singlete que corresponde a espines antiparalelos y la función Ψ_T^- tiene espín total igual a 1, se refiere a un estado triplete que corresponde a espines paralelos. Tomando este caso de dos partículas se escribe un hamiltoniano efectivo de espín [7]. Sea \mathbb{S}_1 y \mathbb{S}_2 los operadores de espín para las partículas 1 y 2. Entonces:

$$(\mathbb{S}_1 + \mathbb{S}_2)^2 = \mathbb{S}_1^2 + \mathbb{S}_2^2 + 2\mathbb{S}_1 \cdot \mathbb{S}_2, \quad (2.24)$$

puesto que los valores propios de \mathbb{S}_1^2 y \mathbb{S}_2^2 son $\frac{3\hbar^2}{4}$, se puede escribir para un ϕ apropiado⁷,

$$\mathbb{S}_1 \cdot \mathbb{S}_2 \phi = \frac{1}{2} [(\mathbb{S}_1 + \mathbb{S}_2)^2 - \frac{3\hbar^2}{2}] \phi. \quad (2.25)$$

El hamiltoniano efectivo de espín para dos electrones en los átomos diferentes se denota como

$$H = -2J\mathbb{S}_1 \cdot \mathbb{S}_2, \quad (2.26)$$

donde J se llama la constante de intercambio y $J = J(R)$ es dependiente de la separación de los átomos[7]. Si hay varios electrones en el mismo átomo y si J es la constante para todos los electrones en el mismo átomo, se expresa por

$$H = - \sum_{\alpha, \beta} J_{\alpha, \beta} \mathbb{S}_\alpha \cdot \mathbb{S}_\beta. \quad (2.27)$$

en donde \mathbb{S}_k y \mathbb{S}_l se refiere a los operadores de espín asociados con los átomos k y l . Esta última expresión se denomina como hamiltoniano de Heisenberg para un sistema de espines interactivos.[7]

⁷Las funciones ϕ son de la forma de ecuación (2.23), dependiendo si los espines son paralelos o antiparalelos.

2.4. Modelo de Ising

Uno de los fenómenos más interesantes en la física del estado sólido es el ferromagnetismo. En algunos metales, una fracción finita de los espines de los átomos se polariza espontáneamente en la misma dirección, dando lugar a un campo magnético macroscópico. Esto ocurre, sin embargo, solo cuando la temperatura es inferior a una temperatura característica conocida como la temperatura de Curie. Por encima de la temperatura de Curie los espines se orientan al azar, entonces no producen ningún campo magnético neto. El modelo de Ising es un intento crudo de simular la estructura de una sustancia ferromagnética.[12, 24]

En este modelo, el sistema considerado es una matriz de N puntos fijos llamados sitios de red, que forman una red periódica n -dimensional ($n = 1, 2, 3$). Asociado con cada sitio de la red se determina una variable de espín \mathbb{S}_i ($i = 1, \dots, N$) que se le asigna $+1$ o -1 . Si $\mathbb{S}_i = +1$ se dice que el i -ésimo sitio tiene “espín hacia arriba” y si $\mathbb{S}_i = -1$, se dice que tiene “espín hacia abajo” [12]. Un conjunto dado de números $\{S_i\}$ especifica una configuración de todo el sistema y la energía de configuración dada por $\{S_i\}$, se define como

$$E_I\{S_i\} = - \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon_{ij} \mathbb{S}_i \mathbb{S}_j - H \sum_{i=1}^N \mathbb{S}_i, \quad (2.28)$$

donde el subíndice I representa Ising, ϵ_{ij} es la energía de interacción, H es el campo externo y el símbolo $\langle ij \rangle$ denota un par de espines de vecinos más cercanos. No hay distinción entre $\langle ij \rangle$ y $\langle ji \rangle$. No hay distinción entre $\langle ij \rangle$ y $\langle ji \rangle$. Así, la suma sobre $\langle ij \rangle$ contiene $\frac{\gamma N}{2}$, donde γ es el número de vecinos más próximos de cualquier sitio dado [12], por ejemplo:

$$\gamma = \begin{cases} 4, & \text{Red bidimensional cuadrada} \\ 6, & \text{Red cúbica simple} \\ 8, & \text{Red cúbica centrada en el cuerpo.} \end{cases} \quad (2.29)$$

La energía de interacción ϵ_{ij} y el campo magnético externo H , son constantes. La geometría de la red se tiene en cuenta en el problema a través de γ y ϵ_{ij} [12]. Para simplificar, se especializa el modelo en el caso de las interacciones isotrópicas, de modo que todos los ϵ_{ij} sean iguales a un número dado ϵ . Así, la energía se tomara como

$$E_T\{S_i\} = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} \mathbb{S}_i \mathbb{S}_j - H \sum_{i=1}^N \mathbb{S}_i. \quad (2.30)$$

El caso $\epsilon > 0$ corresponde al ferromagnetismo y el caso $\epsilon < 0$ corresponde al antiferromagnetismo [12].

2.5. Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard⁸ se introduce para modelar correlaciones electrónicas en bandas estrechas de energía con una serie de tratamientos aproximados. Un sólido consiste en iones y electrones condensados en una estructura cristalina, dado que los iones son mucho más pesados que los electrones, se puede considerar que los iones forman una red estática[5]. En esta aproximación, la dinámica de los electrones es gobernada por el hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbb{P}_i^2}{2m} + V_I(\mathbb{X}) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_c(\mathbb{X}_i - \mathbb{X}_j), \quad (2.31)$$

donde N es el número de electrones, $V_i(\mathbb{X})$ es el potencial periódico de los iones y,

$$V_c(\mathbb{X}) = \frac{e^2}{\|\mathbb{X}\|}, \quad (2.32)$$

es la repulsión de Coulomb entre electrones [5]. A pesar de la aproximación drástica suponiendo una red estática, el hamiltoniano (2.31) es demasiado complicado para ser resuelto exactamente. Este hamiltoniano tiene todas dificultades de un sistema de muchos cuerpos. Por esta razón se usan aproximaciones como lo es campo medio⁹, que es aplicada a la ecuación (2.31)[9]. Esta aproximación se transforma en función del potencial auxiliar $V_A(\mathbb{X})$ como

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbb{P}_i^2}{2m} + V(\mathbb{X}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} U(\mathbb{X}_i, \mathbb{X}_j), \quad (2.33)$$

donde se introdujo unos potenciales efectivos de uno y dos cuerpos, $V(\mathbb{X})$ y $U(\mathbb{X}, \mathbb{Y})$ como[5]:

$$\begin{aligned} V(\mathbb{X}) &= V_I(\mathbb{X}) + V_A(\mathbb{X}), \\ U(\mathbb{X}, \mathbb{Y}) &= V_c(\mathbb{X} - \mathbb{Y}) - \frac{1}{N-1} (V_A(\mathbb{X}) + V_A(\mathbb{Y})). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Las aproximaciones de campo medio a H se reducen a simplemente fijar $U(\mathbb{X}, \mathbb{Y})$ igual a cero. Para esto, el potencial auxiliar debe ser elegido de tal manera que los elementos de matriz del potencial efectivo de dos cuerpos $U(\mathbb{X}, \mathbb{Y})$ entre los estados propios del hamiltoniano de una partícula se vuelvan pequeños [5],

$$h_1(\mathbb{X}, \mathbb{P}) = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + V(\mathbb{X}). \quad (2.35)$$

⁸Lleva el nombre en honor a John Hubbard, quien en una serie de artículos propuso una serie de tratamientos aproximados asociados al problema de muchos cuerpos.

⁹Ver apéndice B. Técnicas de Aproximación.

Dado que el potencial de un cuerpo $V(\mathbb{X})$ el cual es periódico, las funciones propias de h_1 son funciones de Bloch, es decir, son de la forma:

$$\varphi_{\alpha k}(\mathbb{X}) = e^{i\mathbb{K}\cdot\mathbb{X}}U_{\alpha k}(\mathbb{X}), \quad (2.36)$$

aquí $U_{\alpha,k}(\mathbb{X})$ tiene la periodicidad de la red, k es el cuasimomento y α el índice de la banda [5]. El vector de cuasimomento k corre sobre la primera zona de Brillouin. Siendo las funciones propias del hamiltoniano de una partícula h_1 ,

$$h_1\varphi_{\alpha k}(\mathbb{X}) = \varepsilon_{\alpha k}\varphi_{\alpha k}(\mathbb{X}), \quad (2.37)$$

las funciones $\varphi_{\alpha,k}(\mathbb{X})$ constituyen la base de estados de una partícula[5]. Una base de una partícula complementaria es proporcionada por las funciones de Wannier $\phi_\alpha(\mathbb{X} - \mathbb{R}_i)$, donde \mathbb{R}_i es un vector de red y $\phi_\alpha(\mathbb{X})$ se define como:

$$\phi_\alpha(\mathbb{X}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k \varphi_{\alpha k}(\mathbb{X}), \quad (2.38)$$

aquí L denota el número de iones [5]. Las funciones de Bloch se expresan en términos de las funciones de Wannier por medio de la inversa de Fourier,

$$\varphi_{\alpha k}(\mathbb{X}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{i\mathbb{K}\cdot\mathbb{R}_i} \phi_\alpha(\mathbb{X} - \mathbb{R}_i). \quad (2.39)$$

Introduciendo los operadores de creación $C_{\alpha k}^\dagger$ de electrones de espín a , en estados de Bloch¹⁰ e introduciendo las transformadas de Fourier, se tiene que[21]:

$$C_{\alpha i, a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-i\mathbb{K}\cdot\mathbb{R}_i} C_{\alpha k, a}^\dagger. \quad (2.40)$$

Usando la ecuación (2.39), se puede expresar el operador de campo, que crea un electrón de espín a en la posición \mathbb{X} , de dos maneras diferentes,

$$\Psi_a^\dagger(\mathbb{X}) = \sum_{\alpha k} \Psi_{\alpha k}^*(\mathbb{X}) C_{\alpha k, a}^\dagger = \sum_{\alpha i} \phi_\alpha^*(\mathbb{X} - \mathbb{R}_i) C_{\alpha i, a}^\dagger. \quad (2.41)$$

La fórmula general que relación los formalismos cuantificados es [5]:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{a=\uparrow, \downarrow} \int dx^3 \Psi_a^\dagger(\mathbb{X}) h_1 \Psi_a(\mathbb{X}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{a, b=\uparrow, \downarrow} \int dx^3 dy^3 \Psi_a^\dagger(\mathbb{X}) \Psi_b^\dagger(\mathbb{Y}) U(\mathbb{X}, \mathbb{Y}) \Psi_b(\mathbb{Y}) \Psi_a(\mathbb{X}). \end{aligned} \quad (2.42)$$

¹⁰Ver apéndice A. Clasificación de las Partículas.

Expresando el hamiltoniano (2.31) en segunda cuantización en la base de los estado de Wannier, se tiene que[5]:

$$H = \sum_{\alpha, i, j, a} t_{ij}^{\alpha} C_{\alpha i, a}^{\dagger} C_{\alpha j, a} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma, \delta \\ i, j, k, l}} U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha i, a}^{\dagger} C_{\beta j, b}^{\dagger} C_{\gamma k, b} C_{\delta l, a}, \quad (2.43)$$

aquí los elementos de la matriz de salto t_{ij}^{α} están dados por:

$$t_{ij}^{\alpha} = \int dx^3 \phi_{\alpha}^*(\mathbb{X} - \mathbb{R}_i) h_1 \phi_{\alpha}(\mathbb{X} - \mathbb{R}_j) = \frac{1}{L} \sum_k e^{i\mathbb{K} \cdot (\mathbb{R}_i - \mathbb{R}_j)} \varepsilon_{\alpha k}, \quad (2.44)$$

del mismo modo, el parámetro de interacción $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ se expresan como integrales de superposición,

$$U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \int dx^3 dy^3 \phi_{\alpha}^*(\mathbb{X} - \mathbb{R}_i) \phi_{\beta}^*(\mathbb{Y} - \mathbb{R}_j) U(\mathbb{X}, \mathbb{Y}) \phi_{\gamma}(\mathbb{Y} - \mathbb{R}_k) \phi_{\delta}(\mathbb{X} - \mathbb{R}_l). \quad (2.45)$$

Luego, introduciendo los operadores de número de partículas $n_{i\uparrow} = C_{i\uparrow}^{\dagger} C_{i\uparrow}$ y $n_{i\downarrow} = C_{i\downarrow}^{\dagger} C_{i\downarrow}$, al igual que la consideración de una sola banda en donde $\alpha = 1$, el hamiltoniano se reduce a [21]:

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle} C_{i, a}^{\dagger} C_{j, a} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (2.46)$$

Aquí el símbolo $\langle i, j \rangle$ denota la suma sobre pares ordenados de vecinos más cercanos [21, 5].

3. Redes Ópticas y Iones Atrapados

Una red óptica está formada por la superposición de múltiples rayos láser proporcionando un patrón de onda estacionaria. En esta interacción, los átomos interactúan con el láser y el campo eléctrico del mismo inducen un momento dipolar en los átomos que a su vez se relaciona con el sistema. Esta interacción modifica la energía de los átomos de una manera que depende tanto de la intensidad de la luz como de la frecuencia del láser. A medida que los haces interactúan entre sí, se crean regiones con mayor y menor intensidad de luz donde los átomos colocados en la red tenderán a buscar los puntos de intensidad mínima o máxima dependiendo de la frecuencia del láser, que permite aislar átomos individuales en un entorno controlado, de forma que no exista ninguna interferencia con el ambiente.

Esta es una herramienta muy importante en el campo de la ciencia, al igual que el campo tecnológico, cuyo estudio está lleno de fenómenos fascinantes que permiten ampliar la frontera del conocimiento, suministrando mejoras tecnológicas que han demostrado ser útiles en numerosas aplicaciones como la detección cuántica, que explica cómo la interacción radiación-materia optimiza el tránsito de la información [2]. Así mismo, las redes ópticas de iones atrapados posibilitan la fabricación de relojes de alta precisión y su aplicación a sistemas de posicionamiento global [33]. De manera semejante, tales redes facilitan la producción de circuitos integrados capaces de realizar operaciones binarias aumentando la velocidad de los elementos electrónicos [32]. Otras aplicaciones importantes de estos dispositivos mecánico cuánticos está en el campo de la salud, por ejemplo, en los espectrómetros de masas que son utilizados para detección de enfermedades infecciosas que causan una elevada mortalidad y morbilidad [34]. En este contexto, es fundamental el análisis de redes ópticas con iones atrapados para el estudio de sistemas colectivos de baja dimensionalidad con potencial aplicación a la industria de la nanotecnología. A continuación se presenta una base formal para el estudio de redes ópticas con bosones y fermiones en estado fundamental para observar sus propiedades y una aplicación en el entorno de este trabajo de grado.

3.1. Modelo de Bose-Fermi-Hubbard

Una vez realizada la descripción preliminar del comportamiento de partículas con espín y sus interacciones a corto alcance en un dispositivo mecánico cuántico usando los diferentes modelos teóricos previamente descritos, se pretende realizar el estudio de sistemas fuertemente correlacionados en materia condensada a través de redes ópticas que tienen en cuenta la interacción de bosones y fermiones [5, 6]. La descripción formal de esta observación, se realiza a través del modelo Bose-Fermi-Hubbard (*BFH*) que optimiza el análisis físico de la dinámica de las partículas entre los átomos de los sólidos que tiene en cuenta bosones y fermiones. Dicho hamiltoniano se expresa como [6]:

$$H = H_b + H_f + H_{bb} + H_{bf}, \quad (3.1)$$

donde H_b es el hamiltoniano para los bosones, H_f es el hamiltoniano de los fermiones, H_{bb} es el hamiltoniano de la interacción bosón-bosón y H_{bf} el hamiltoniano de la interacción bosón-fermión, que son descritos como

$$\begin{aligned} H_\xi &= -T_\xi \sum_{\langle l,m \rangle} \left(\hat{\xi}_l^\dagger \hat{\xi}_m + \hat{\xi}_m^\dagger \hat{\xi}_l \right), \quad \hat{\xi} \in \{b, f\} \\ H_{bb} &= \frac{U_{bb}}{2} \sum_{l=1}^3 \hat{n}_l^b (\hat{n}_l^b - 1), \\ H_{bf} &= U_{bf} \sum_{l=1}^3 \hat{n}_l^b \hat{n}_l^f. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Aquí, \hat{b}^\dagger (\hat{b}) son los operadores de creación (aniquilación) para los bosones y \hat{f}^\dagger (\hat{f}) son los operadores de creación (aniquilación) para fermiones¹; los operadores número de uso de regular en mecánica cuántica son $\hat{n}^\xi = \hat{\xi}^\dagger \hat{\xi}$ donde $\hat{\xi} \in \{b, f\}$ [6]. El término T_ξ es el coeficiente de tunelamiento entre próximos vecinos. La interacción intra e inter especies es controlada por $U_{bb} > 0$ y U_{bf} respectivamente, donde U_{bb} es el potencial de interacción entre bosones y U_{bf} es el potencial de interacción entre bosones y fermiones, cuyo valor se establece más adelante.[6]

3.2. Configuración del Estado Fundamental

El estado fundamental de un sistema compuesto de iones atrapados representa el nivel de menor energía posible el cual se simboliza a través de un vector en notación

¹Ver apéndice A. Clasificación de las Partículas.

de Dirac que contiene toda la configuración del sistema de la siguiente manera [6]:

$$|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_f \otimes |\Psi\rangle_b = \left|n_1^f, n_2^f, n_3^f\right\rangle_f \otimes \left|n_1^b, n_2^b, n_3^b\right\rangle_b, \quad (3.3)$$

para el cual se debe verificar que,

$$n_1^f + n_2^f + n_3^f = N_f \quad y \quad n_1^b + n_2^b + n_3^b = N_b, \quad (3.4)$$

en donde, N_f es el número de fermiones y N_b es el número de bosones. En una configuración de tres bosones y un fermión en una red óptica se observa dos casos específicos en relación con la interacción entre bosones (b) y fermiones (f) [6]. El primer caso corresponde a una interacción repulsiva y un número de fermiones constante, ($N_f = 1$), donde los vectores de estado correspondientes a los niveles más bajos de energía tienen la siguiente forma [6]:

$$\begin{aligned} |1\rangle_+ &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |0, 3, 0\rangle_b, \\ |2\rangle_+ &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |0, 1, 2\rangle_b, \\ |3\rangle_+ &\rightarrow |0, 0, 1\rangle_f \otimes |0, 2, 1\rangle_b, \\ |4\rangle_+ &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |1, 1, 1\rangle_b. \end{aligned} \quad (3.5)$$

En el segundo caso, se consideran las interacciones atractivas entre bosones y fermiones manteniendo constante el número de fermiones ($N_f = 1$) y los vectores de estado correspondientes a los niveles más bajo de energía tienen la siguiente forma [6]:

$$\begin{aligned} |1\rangle_- &\rightarrow |0, 0, 1\rangle_f \otimes |0, 0, 3\rangle_b, \\ |2\rangle_- &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |2, 0, 1\rangle_b, \\ |3\rangle_- &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |1, 0, 2\rangle_b, \\ |4\rangle_- &\rightarrow |0, 1, 0\rangle_f \otimes |1, 1, 1\rangle_b. \end{aligned} \quad (3.6)$$

3.2.1. Configuración de Estado Fundamental con Cuatro Bosones y un Fermión

Considerando ahora la configuración de tres sitios, cuatro bosones y un fermión en la red óptica, se observa dos casos específicos en relación con la interacción entre los bosones (b) y fermiones (f). El primer caso corresponde a una interacción repulsiva para el cual se conforma unos vectores de estado idóneos para los niveles de más baja energía de la siguientes forma [6]:

$$\begin{aligned} |1\rangle_+ &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |0, 2, 2\rangle_b, \\ |2\rangle_+ &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |0, 1, 3\rangle_b, \\ |3\rangle_+ &\rightarrow |0, 0, 1\rangle_f \otimes |2, 1, 1\rangle_b, \\ |4\rangle_+ &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |2, 1, 1\rangle_b. \end{aligned} \quad (3.7)$$

En el segundo caso, describe las interacciones atractivas entre bosones y fermiones que se representan a través de vectores de estado de los niveles de menor energía así:

$$\begin{aligned}
|1\rangle_- &\rightarrow |0, 0, 1\rangle_f \otimes |0, 0, 4\rangle_b, \\
|2\rangle_- &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |3, 0, 1\rangle_b, \\
|3\rangle_- &\rightarrow |1, 0, 0\rangle_f \otimes |1, 2, 1\rangle_b, \\
|4\rangle_- &\rightarrow |0, 1, 0\rangle_f \otimes |1, 2, 1\rangle_b.
\end{aligned}
\tag{3.8}$$

3.3. Resultados

El estudio del estado fundamental de un sistema de un anillo de tres sitios con una mezcla de Bose-Fermi para una pequeña cantidad de átomos se realiza a través del modelo *BFH*. El sistema inicialmente se encuentra con tres bosones y un fermión sin la presencia de ningún campo externo, al mismo tiempo se mantiene fija la interacción entre bosones y fermiones a un valor de $|U_{bf}| = 10$ [6]. De las propiedades del potencial de interacción bosón-fermión se evidencia dos regiones, específicamente para $U_{bf} > 0$ que indica la interacción repulsiva, en el caso contrario para $U_{bf} < 0$ corresponde a la interacción atractiva, correspondientes a la interacción bosón-fermión. En el primer caso ($U_{bf} > 0$), los vectores correspondientes que describen este comportamiento son de la forma de la ecuación (3.5), a los cuales se les asigna un esquema adecuado dado por la figura (3.1) que representa la organización de cada bosón y fermión presente en el sistema.

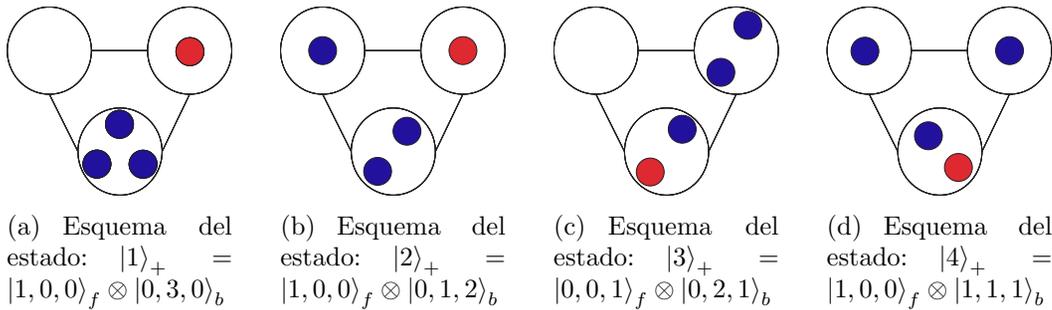


Figura 3.1: Esquema de las configuraciones de estado de tres Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones repulsivas.

En la figura (3.1) se observa cómo evolucionan los estados desde una configuración inicial hasta una configuración con menor energía y mayor estabilidad, dada por distribución de las diferentes partículas. Principalmente se realiza un análisis de las energías de cada estado para la determinación del estado fundamental, a través del

hamiltoniano BFH dado en la ecuación (3.1), el cual se aplica a los vectores de estado (3.5), obteniendo unas curvas de energía representadas en la figura (3.2) donde se aprecia que a medida que cambia la intensidad de la interacción bosónica, el estado fundamental modifica su simetría al igual que transforma su estructura desde una mezcla de estados $|1\rangle_+$ y $|2\rangle_+$ para pequeños valores de U_{bb} hasta el estado $|4\rangle_+$ para valores grandes de U_{bb} .

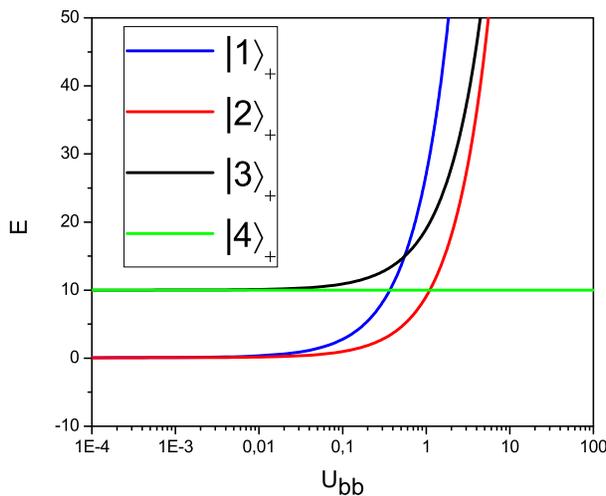


Figura 3.2: Energía de repulsión de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de tres Bosones y un Fermión en una red óptica.

Se observa claramente que el estado fundamental en esta región es la superposición de los estados $|1\rangle_+$ y $|2\rangle_+$ para valores U_{bb} pequeños que evoluciona hasta alcanzar el estado $|4\rangle_+$ para valores grandes de U_{bb} . De la figura (3.2) se examina que no se consigue un único estado de mínima energía, debido a las interacciones entre bosones y fermiones imposibilitan alcanzar dicho estado principalmente por la competencia entre bosones y fermiones por dominar el sistema. Al igual se observa de la figura (3.2) que para pequeñas cantidades de potencial de interacción bosón-bosón (U_{bb}) se exhibe un estado de superfluidez dado por los estados $|1\rangle_+$ y $|2\rangle_+$ en contraposición con la región aislante que aparece para valores de interacción bosón-bosón más grandes la cual se encuentra dominada por el estado $|2\rangle_+$ y cambia hacia el estado $|4\rangle_+$. En la región entre ($10^{-1} - 10^0$) se encuentra un punto crítico donde hay una transición de la fase de superfluido hacia un aislante. Con respecto al estado $|3\rangle_+$ se observa que es muy inestable debido a la configuración de cada uno

de los bosones y el fermión que se observa en la figura (3.1). Además, también se analiza en la curva de energía del estado $|3\rangle_+$ de la figura (3.2) que a medida que se aumenta la interacción bosón-bosón se aumenta la energía del estado con una tendencia hacia una superposición con el estado $|2\rangle_+$. Así mismo se nota una brecha de energía entre la superposición de estados $|1\rangle_+$ y $|2\rangle_+$ con respecto a los estados $|4\rangle_+$ y $|3\rangle_+$ debido a la fuerte repulsión del bosón en relación con otros bosones y el fermión.

En el segundo caso, ($U_{bf} < 0$) correspondiente a la interacción atractiva entre bosones y fermiones, donde los vectores correspondientes que describen este comportamiento son de la forma (3.6), para los cuales se asigna un esquema de configuración adecuado dado por la figura (3.3) que representa la organización de cada bosón y fermión en el anillo de tres sitios.

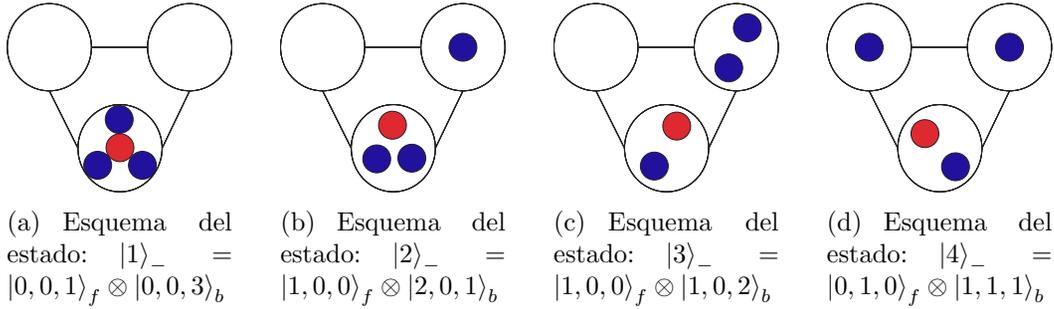


Figura 3.3: Esquema de las configuraciones de estado de tres Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones atractivas.

Al igual que en el anterior caso, en la figura (3.3) se observa cómo evolucionan los estados desde una configuración inicial hasta alcanzar una configuración con menor energía y mayor estabilidad. Básicamente se realiza un análisis de las energías de cada estado para la determinación del estado fundamental lo cual se alcanza a través del hamiltoniano BFH el cual se aplica a los vectores de estado (3.6) obteniendo unas curvas de energía representadas en la figura (3.4) donde se aprecia el cambio la intensidad de la interacción bosónica. El estado fundamental cambia desde el estado $|1\rangle_-$ hasta $|2\rangle_-$ para valores de U_{bb} pequeño cambiando hasta el estado $|4\rangle_-$ para valores de U_{bb} grandes. En este caso aparece una fase aislante correspondiente al estado fundamental $|1\rangle_-$, la cual es dominante en el sistema para una menor fuerza de interacción entre bosones. Ello permite determinar una fase aislante inducida por las interacciones y la ocupación bosónica de los sitios del anillo que está fuertemente desequilibrada. A medida que se aumenta la interacción entre bosones, aparece una nueva región de superfluido y luego el estado fundamental del sistema vuelve a estar dominado por el estado aislante que corresponde a $|4\rangle_-$. Con la interacción

entre bosones cada vez mayor, la región del superfluido se rompe en varios filamentos separados por el estado aislante $|2\rangle_-$ que aparece debido a la interacción entre bosones y fermiones. Este cambio en la estructura del estado fundamental se sigue en la figura (3.4), al igual se observa un punto crítico en (10^0) en donde ocurre la transición de fase de aislante a superfluido. Este estado es muy inestable, semejante al estado $|3\rangle_+$, debido a la fuertes interacciones entre bosones. En la figura (3.4) se observa una brecha de energía o gap entre los diferentes estados debido a las diversas configuraciones para los bosones y fermiones en el anillo que se ven reflejadas en las fuerzas de interacción entre las partículas.

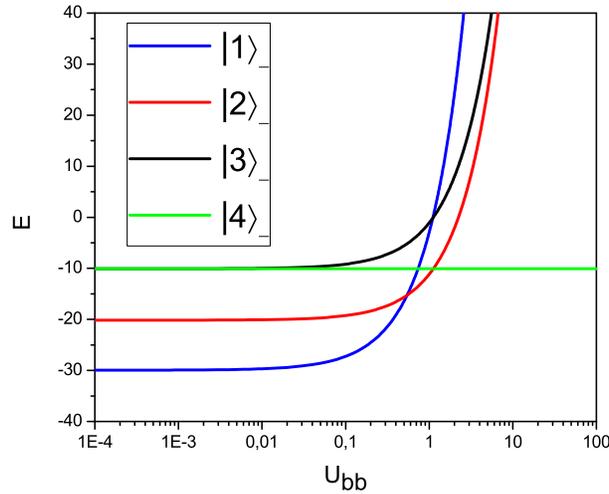


Figura 3.4: Energía de atracción de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de tres Bosones y un Fermión en una red óptica.

3.3.1. Configuración de Estado Fundamental con Cuatro Bosones y un Fermión

El estudio del estado fundamental de un sistema de un anillo de tres sitios con una mezcla de Bose-Fermi con cuatro bosones y un fermión se analiza a través del modelo *BFH*. El sistema inicialmente no está afectado por campos externos, al mismo tiempo se mantiene fija la interacción entre bosones y fermiones a un valor de $|U_{bf}| = 10$.

En este caso también se evidencian dos regiones para la interacción entre bosones y fermiones, para $U_{bf} > 0$ que indica una interacción repulsiva y para $U_{bf} < 0$ correspondiente a una interacción atractiva.

En el primer caso, ($U_{bf} > 0$) los vectores que describen este comportamiento son de la forma (3.7), a los cuales se les asigna un esquema adecuado dado por la figura (3.5) que representa la organización de cada bosón y fermión presente en el sistema.

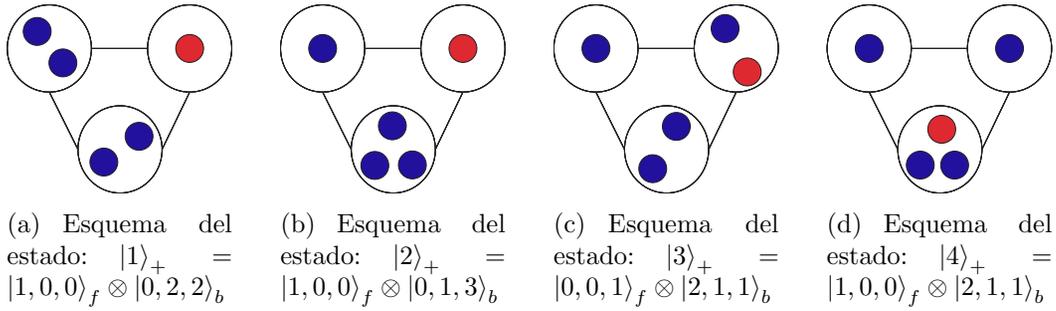


Figura 3.5: Esquema de las configuraciones de estado de cuatro Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones repulsivas.

En la figura (3.5), las configuraciones de los diferentes estados evolucionan en busca del estado de mínima energía donde el estado $|4\rangle_+$ aquí se observa que hay una interacción entre bosones y fermiones considerable debido a la adición del bosón adicional con respecto a la figura (3.1). Para conseguir las propiedades del estado fundamental se utiliza el hamiltoniano BFH para obtener la energía del sistema sobre los vectores de estado (3.7) representados en la figura (3.5). Las curvas de energía que describen este estado se muestran en la figura (3.6), ellas presentan la evolución del estado fundamental desde una mezcla de estados $|1\rangle_+$ y $|2\rangle_+$ a $|3\rangle_+$ hasta una mezcla de estados $|3\rangle_+$ y $|4\rangle_+$. Estos resultados comparados con el caso anterior muestran cambios significativos en la energía que dependen esencialmente de la interacción bosón-bosón.

En interacción repulsiva entre bosones y fermiones, se suprime la fase aislante para valores muy grandes del potencial de interacción bosón-bosón. En el sistema bosónico con cuatro bosones se encuentra presente una pequeña fracción de fase superfluida observada en la figura (3.6), por lo tanto, no puede ocurrir un estado aislante en su totalidad, debido a que las fases aislantes ocurren solo en la presencia de fermiones, con una fuerza de interacción entre bosones y fermiones diferentes de cero. En este caso el sistema con el fermión posee poca movilidad, debido al aumento de bosones que se ve reflejada en la figura (3.5). Esta poca movilidad del fermión provoca la

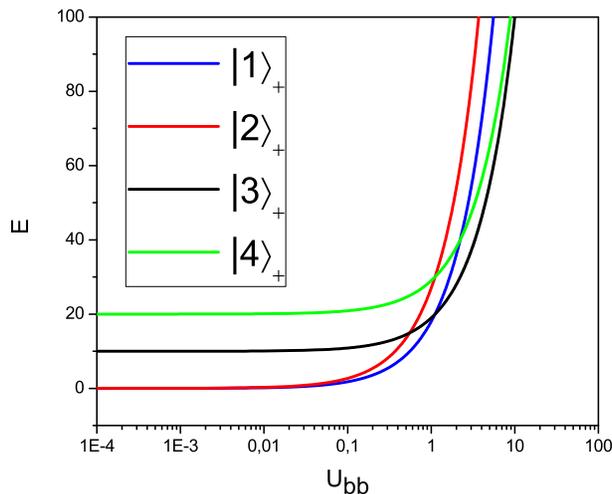
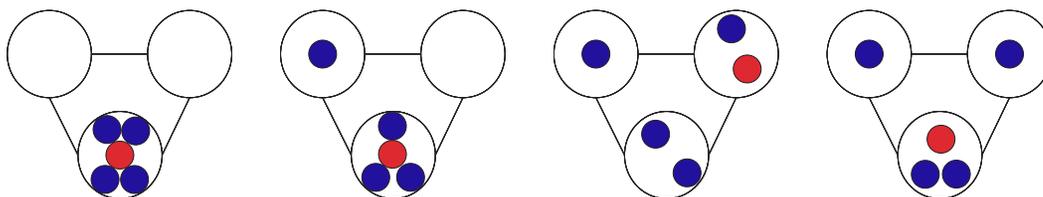


Figura 3.6: Energía de repulsión de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de cuatro Bosones y un Fermión en una red óptica.

anulación de la fase aislante observada en la figura (3.6).

El segundo caso, ($U_{bf} < 0$) corresponde a la interacción atractiva entre bosones y fermiones representadas a través de los esquemas de las configuraciones dadas por la figura (3.7).



(a) Esquema del estado: $|1\rangle_- = |0, 0, 1\rangle_f \otimes |0, 0, 4\rangle_b$ (b) Esquema del estado: $|2\rangle_- = |1, 0, 0\rangle_f \otimes |3, 0, 1\rangle_b$ (c) Esquema del estado: $|3\rangle_- = |1, 0, 0\rangle_f \otimes |1, 2, 1\rangle_b$ (d) Esquema del estado: $|4\rangle_- = |0, 1, 0\rangle_f \otimes |1, 2, 1\rangle_b$

Figura 3.7: Esquema de las configuraciones de estado de cuatro Bosones (círculos azules) y un Fermión (círculo rojo) para interacciones atractivas.

En la figura (3.8) se observa la estructura del estado fundamental cambia desde una mezcla de estados dados por $|1\rangle_-$ y $|2\rangle_-$ hasta una mezcla de estados $|3\rangle_-$ y

$|4\rangle_-$, en donde la interacción entre bosones y fermiones anula la región aislante como consecuencia de la poca movilidad del fermión en el sistema, por lo cual la fase superfluida es la dominante en la configuración con cuatro bosones y un fermión. En general, en un sistema de tres sitios, los límites de las regiones aislantes son llevados a valores de interacción entre bosones más grandes a medida que se aumenta la cantidad de los bosones. En la interacción repulsiva, ($U_{bf} > 0$), el fermión gana movilidad cuando se incrementa la fuerza de interacción entre bosones U_{bb} , provocando que salte a sitios con menor número de ocupación permitiendo la presencia de la fase aislante en el sistema. En el caso de interacción atractiva, ($U_{bf} < 0$), el fermión está anclado a un sitio con el mayor número ocupación de bosones suprimiendo por completo la fase aislante.

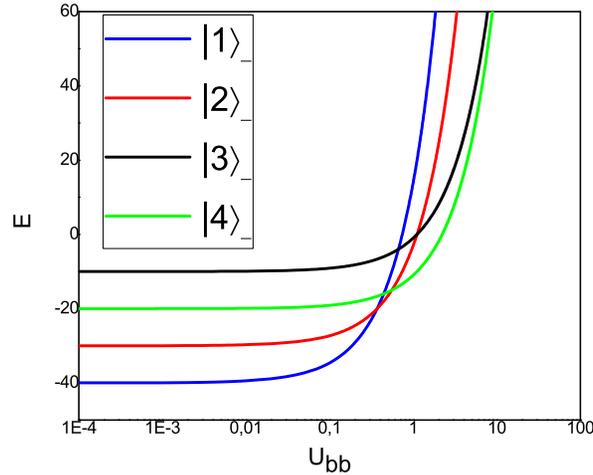


Figura 3.8: Energía de atracción de los estados (E) en función del potencial de interacción Bosón-Bosón (U_{bb}) para un sistema de cuatro Bosones y un Fermión en una red óptica.

3.4. Conclusión

En este capítulo se presenta un análisis del estado fundamental de un sistema a pequeña escala de una mezcla de Bose-Fermi en una configuración de tres sitios, empleando el hamiltoniano BFH para determinar la energía de un red óptica cuando se involucran fermiones y bosones y las interacciones entre ellos. Los diferentes

resultados que se muestran en este capítulo permiten determinar que el sistema admite dos fases: una aislante y una superfluida. En las diferentes configuraciones se trabajó variando la cantidad de bosones y una cantidad constante de fermiones, con el propósito de determinar si la manipulación de las partículas permite controlar el tipo de fase en el mecanismo cuántico. Aquí preliminarmente se trabaja con tres bosones para las cuales hay una presencia fuerte de las fases antes mencionadas. Cuando se realiza la adición de un bosón se anula casi por completo la fase aislante quedando el sistema dominado por la fase superfluida. Este comportamiento es útil en la información cuántica debido a que se generan prototipos a través de los cuales se realiza control cuántico con la manipulación de las interacciones entre los portadores y se analiza su respuesta como un colectivo por medio de la inyección de una cantidad controlada de átomos donde las redes ópticas proporcionan un medio para el desarrollo de la información cuántica.

4. Conclusiones Generales

En este trabajo se obtuvo el comportamiento de la energía del estado fundamental dada las interacciones fuertemente correlacionadas en una red óptica. En los diferentes casos que se mostraron previamente, se evidencian cambios relevantes en el comportamiento de la energía cuando se cambia o se controla el número de fermiones o bosones. Estas modificaciones que se suceden evidencian diferentes cambios de estados como superfluido y aislante cuando el potencial de interacción bosón-bosón aumenta dejando ver potenciales transiciones de fase en la red óptica cuando diferentes partículas interactúan en el sistema. El formalismo usado para el análisis de la energía del estado fundamental en este mecanismo cuántico de estudio, es el modelo Bose-Fermi-Hubbard (*BFH*) que describe el comportamiento de las partículas en la red óptica usando el formalismo de segunda cuantización y operadores de creación y destrucción para bosones y fermiones.

En la red óptica de este trabajo, se analiza una mezcla de Bose-Fermi considerando un esquema de configuración de tres sitios con una cantidad específica de bosones y fermiones establecida en la literatura para cada esquema de anillos, donde las partículas se permutan hasta alcanzar el nivel de energía más estable el cual se representa a través de las curvas de energía del estado fundamental. Los valores de potencial de interacción bosón-bosón U_{bb} , recorren un rango de valores de 10^{-4} a 10^2 en donde cada permutación tiene una respuesta específica con respecto a dicho potencial de interacción, permitiendo determinar fases aislantes y superfluida que ocurren en el modelo prototipo.

En los diferentes casos, las curvas muestran brechas de energía entre cada estado generadas por las interacciones repulsivas y atractivas entre bosones y fermiones provocando un cambio en la organización del estado fundamental a medida que varía el potencial de interacción bosón-bosón. Los diferentes comportamientos de las energías fundamentales en cada anillo estudiado, permiten analizar el comportamiento del sistema en función de la adición controlada de bosones que reorganiza cada esquema de configuración, mostrando así una fase dominante que determina las propiedades del cada estado. De igual forma, usando la teoría de fenómenos críticos y sistemas

fuertemente correlacionados se logra determinar el punto crítico donde se realizan las diferentes transiciones de estado en la red óptica fabricadas a través de nuevos materiales. En general todo este análisis y resultados contribuyen al entendimiento físico y facilita la creación de nuevos nanodispositivos como circuitos electrónicos de más alta precisión aplicables a la información y computación cuántica.

Apéndice A. Clasificación de las Partículas

A.1. Partículas idénticas

En nanociencia y nanotecnología, al igual que en materia condensada el estudio de las partículas juegan un papel indispensable para el entendimiento de una gran variedad de procesos físicos, entre los que se destacan el transporte cuántico, la superconductividad los efectos de sistemas fuertemente correlacionados y redes ópticas. En este contexto, diferentes fenómenos emergentes que ocurren en nanodispositivos también son de capital importancia; para los cuales el análisis de las partículas idénticas son una herramienta fundamental. Las partículas idénticas son objetos o corpúsculos que tienen las mismas masas, cargas, tamaños y de manera general las mismas propiedades físicas. En mecánica cuántica, las cantidades medibles de un sistema mecánico cuántico estacionario son los valores esperados de los operadores que representan los observables del sistema. Si el sistema consiste en partículas idénticas, estos valores esperados no deben cambiar cuando las coordenadas de dos partículas se intercambian en la función de onda. Por tanto, se requiere que para cualquier estado posible Ψ del sistema y para todos los observables \hat{B} se cumpla que¹:

$$\int d^N x \Psi^*(x_1, \dots, x_j, \dots, x_k, \dots, x_N) \hat{B} \Psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_k, \dots, x_N) = \int d^N x \Psi^*(x_1, \dots, x_k, \dots, x_j, \dots, x_N) \hat{B} \Psi(x_1, \dots, x_k, \dots, x_j, \dots, x_N), \quad (\text{A.1})$$

para todos los pares (j, k) . Aquí las coordenadas $x \equiv (r, S)$, denotan la posición y los grados de libertad de las partículas. Utilizando la notación:

$$\int dx = \sum_S \int d^3 r \quad y \quad \int d^N x = \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_N, \quad (\text{A.2})$$

en cierta medida, la ecuación (A.1) define un sistema de partículas idénticas. Usando la ecuación (A.1), se generan las propiedades de la función de onda y de los operadores

¹Gross e at. ref [23], página 4

que describen un sistema de partículas idénticas. Al hacerlo, solo se necesita que los valores esperados permanezcan sin cambio alguno cuando se intercambian dos partículas, ya que cada permutación posible de las partículas puede expresarse como una secuencia de transposiciones. En términos matemáticos, cada permutación P se expresa como un producto de las transposiciones P_{jk} :

$$P = \prod P_{jk}. \quad (\text{A.3})$$

Los operadores que corresponden a transposiciones de partículas son autoadjuntos y unitarios, por lo tanto:

$$\hat{P}_{jk}^{-1} = \hat{P}_{jk} = \hat{P}_{jk}^\dagger. \quad (\text{A.4})$$

En particular, los operadores de permutación conmutan con el hamiltoniano de un sistema considerado, de tal forma²:

$$\left[\hat{H}, \hat{P}_{jk} \right] = 0, \quad \text{para todo } (j, k). \quad (\text{A.5})$$

Las transposiciones P_{jk} se expresan como operadores con la acción sobre una función de onda de muchas partículas:

$$\hat{P}_{jk}\Psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_k, \dots, x_N) \equiv \Psi(x_1, \dots, x_k, \dots, x_j, \dots, x_N). \quad (\text{A.6})$$

La “identidad” de las partículas está ligada a la simetría de los estados mecanocuánticos tras el intercambio de las partículas. Esto da lugar a definir:

- i*) Si $\hat{P}_{jk}\Psi = +\Psi$, para todo (j, k) , entonces la función Ψ es simétrica.
- ii*) Si $\hat{P}_{jk}\Psi = -\Psi$, para todo (j, k) , entonces la función Ψ es antisimétrica.³

Así, la función de estado de un sistema de partículas idénticas debe ser simétrica o antisimétrica. Si Ψ_S es simétrica y Ψ_A es antisimétrica, está claro que para cualquier posible permutación \hat{P} , se tiene que:

$$\begin{aligned} \hat{P}\Psi_S &= +\Psi_S, \\ \hat{P}\Psi_A &= \text{sgn}(P)\Psi_A, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

donde $\text{sgn}(P) = +1$, si \hat{P} contiene un número par de transposiciones y $\text{sgn}(P) = -1$, si \hat{P} contiene un número impar de transposiciones. Operando con el operador de transposiciones se obtiene:

$$\hat{P}_{jk}\Psi_S = \Psi_S \quad \text{y} \quad \hat{P}_{jk}\Psi_A = -\Psi_A, \quad \text{para todos los } (j, k). \quad (\text{A.8})$$

Donde las funciones simétricas con respecto al intercambio de partículas idénticas describe una colección de bosones, mientras que las funciones antisimétricas especifican una colección de fermiones.⁴

²Gross e at. ref [23], página 7

³Gross e at. ref [23], página 6

⁴Gross e at. ref [23], página 7

A.1.1. Estados Completamente Simétricos y Antisimétricos

Comenzando con los estados de partículas individuales $|i\rangle : |1\rangle, |2\rangle, \dots$. Los estados de partículas individuales de las partículas $1, 2, \dots, \alpha, \dots, N$ se denotan por $|i\rangle_1, |i\rangle_2, \dots, |i\rangle_\alpha, \dots, |i\rangle_N$. Esto permite escribir los estados básicos de un sistema de N -partículas como

$$|i_1, \dots, i_\alpha, \dots, i_N\rangle = |i_1\rangle_1 \dots |i_\alpha\rangle_\alpha \dots |i_N\rangle_N, \quad (\text{A.9})$$

donde la “partícula 1” está en el estado $|i_1\rangle_1$ y al “partícula α ” en el estado $|i_\alpha\rangle_\alpha$. Siempre que $|i\rangle$ forme un conjunto ortonormal completo, los estados del producto definidos anteriormente también representan un sistema ortonormal completo en el espacio de los estados de N -partículas. Los estados básicos simétricos y antisimétricos se definen como

$$S_\pm |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm 1)^P P |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle, \quad (\text{A.10})$$

en otras palabras, se aplica todos los $N!$ elementos del grupo de permutación S_N de N objetos y para fermiones se multiplica por (-1) cuando P es una permutación impar, en consecuencia, los estados definidos en (A.10) son de dos tipos: Completamente simétricos y completamente antisimétricos⁵.

A.2. Bosones

A.2.1. Estados, Espacio de Fock, Operadores de Creación y Aniquilación

Para bosones se especifica completamente los números de ocupación los cuales se denotan como

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = S_+ |i_1, i_2, \dots, i_N, i_N\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}, \quad (\text{A.11})$$

aquí, n_1 es la cantidad de veces que ocurre el “estado 1”, n_2 el número de veces que ocurre el “estado 2” Alternativamente: n_1 es el número de partículas en el estado 1, n_2 es el número de partículas en el estado 2, La suma de todos los números de ocupación no debe ser igual a la cantidad total de partículas:

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N. \quad (\text{A.12})$$

Aparte de esta restricción, n_i puede tomar cualquiera de los valores $0, 1, 2, \dots$. El factor $(n_1! n_2! \dots)^{-1/2}$, junto con el factor $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ contenido en S_+ , tiene el efecto de

⁵Franz Schwabl. ref [26], páginas 8-10

normalización $|n_1, n_2, \dots\rangle$. Estos estados forman un conjunto completo de estados de N -partículas completamente simétricos. Estos espacios extendidos son conocidos como el espacio de Fock.

Ahora definiendo operadores de creación y aniquilación que conducen desde el espacio de estados de N -partículas al espacio de estado de $N + 1$ partículas:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^+ |\dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_{i+1}, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i |\dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle,\end{aligned}\quad \text{para } n_i \geq 1. \quad (\text{A.13})$$

Las relaciones anteriores de los estados dan lugar a las relaciones de conmutación de Bose:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad , \quad [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0 \quad , \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}. \quad (\text{A.14})$$

El estado general de muchas partículas es:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots |0\rangle. \quad (\text{A.15})$$

Normalización⁶:

$$\begin{aligned}\hat{a}^+ |n - 1\rangle &= \sqrt{n} |n\rangle, \\ \|\hat{a}^+ |n - 1\rangle\| &= \sqrt{n}, \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ |n - 1\rangle.\end{aligned}\quad (\text{A.16})$$

A.2.2. Operador Número de Partícula

El operador se define como:

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i. \quad (\text{A.17})$$

El operador para el número total de partículas está dado por:

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i, \quad (\text{A.18})$$

aplicando este operador a los estados $|\dots, \hat{n}_i, \dots\rangle$, se produce⁷:

$$\hat{N} |n_1, n_2, \dots\rangle = \left(\sum_i \hat{n}_i \right) |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (\text{A.19})$$

⁶Franz Schwabl. ref [26], páginas 10-13

⁷Franz Schwabl. ref [26], página 13

A.3. Fermiones

A.3.1. Estados, Espacio de Fock, Operadores de Creación y Aniquilación

Para fermiones, se consideran los estados $S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle$ definidos en (A.10) que también se representan en la forma de un determinante:

$$S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |i_1\rangle_1 & |i_1\rangle_2 & \dots & |i_1\rangle_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |i_N\rangle_1 & |i_N\rangle_2 & \dots & |i_N\rangle_N \end{vmatrix}. \quad (\text{A.20})$$

El determinante de estados de una partícula se llama determinante de Slater. Si alguno de los estados de una sola partícula en (A.20) es el mismo, el resultado es cero. Esta es una afirmación del principio de Pauli: Dos fermiones idénticos no deben ocupar el mismo estado.

Ahora introduciendo el operador de creación \hat{a}_i^\dagger se define de tal manera que al aplicarlo dos veces sobre un estado sea igual a cero, para lo cual se tiene:

$$\begin{aligned} S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle &= \hat{a}_{i_1}^+ \hat{a}_{i_2}^+ \dots \hat{a}_{i_N}^+ |0\rangle, \\ S_- |i_2, i_1, \dots, i_N\rangle &= \hat{a}_{i_2}^+ \hat{a}_{i_1}^+ \dots \hat{a}_{i_N}^+ |0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

dado que estos estados son iguales excepto en signo, se define el anticonmutador como:

$$[\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0. \quad (\text{A.22})$$

El anticonmutador encontrado en (A.22), se obtiene el conmutador de los operadores A y B que están definidos por:

$$\begin{aligned} [A, B] &= [A, B]_+ = AB + BA \\ [A, B] &= [A, B]_- = AB - BA. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

En resumen, los efectos de los operadores de creación y aniquilación son:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ |\dots, n_i, \dots\rangle &= (1 - n_i)(-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i |\dots, n_i, \dots\rangle &= n_i(-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

para los cuales se definen las siguientes reglas de anticonmutación para fermiones⁸:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad , \quad [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+]_+ = 0 \quad , \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+]_+ = \delta_{ij}. \quad (\text{A.25})$$

⁸Franz Schwabl. ref [26], páginas 16-19

Apéndice B. Técnicas de Aproximación

B.1. Aproximación de Hartree

El análisis de sistemas físicos que trabajan con muchas partículas e interacciones usando métodos de aproximación, es fundamental al momento de describir propiedades físicas, tal como ocurre en sistemas de baja dimensionalidad o fuertemente correlacionados como las redes ópticas que interactúan con bosones y fermiones. La reducción de dimensiones y el contacto con diferentes medios juegan un papel básico en nanociencia y en nanotecnología donde los métodos de aproximación son los fundamentos más apropiados para su estudio detallado. Así por ejemplo, se puede citar el estudio de fenómenos críticos y transiciones de fase. En 1929 D.R. Hartree propuso un enfoque mediante el cual se puede definir un potencial autoconsistente, en donde se asume que el sistema de electrones está caracterizado por la densidad numérica $n_e(r)$ y los electrones no experimentan interacciones uno a otro, solo a través del potencial de Coulomb creado por la densidad de carga $\rho(r) = -en_e(r)$. El potencial de Coulomb en el punto r es:

$$\varphi_{e-e}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} = -\frac{e}{4\pi\epsilon} \int dr' \frac{n_e}{|r-r'|}, \quad (\text{B.1})$$

y por lo tanto, el potencial eficaz de Hartree de una partícula es:

$$V_H(r) = -e\varphi_{e-e}(r) = \tilde{e}^2 \int dr' \frac{n_e}{|r-r'|}, \quad \text{donde } \tilde{e}^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}. \quad (\text{B.2})$$

Para una interacción general de dos partículas el potencial de Hartree se expresa como

$$V_H(r) = \int dr' U(r-r') n_e(r'). \quad (\text{B.3})$$

El potencial efectivo total $V_{eff}(r)$ que actúa sobre los electrones incluyen el potencial externo $V_{ion}(r)$ debido a los iones, tiene la siguiente forma:

$$V_{eff} = V_{ion}(r) + V_H(r). \quad (\text{B.4})$$

La densidad numérica tiene que ser calculada autoconsistentemente a partir de la función de onda de estado fundamental Ψ del sistema de muchos electrones como el valor de esperado del operador de densidad numérica $n(r)$ definido:

$$n_e(r) = \langle n(r) \rangle = \langle \Psi | \sum_{i=1}^{N_e} \delta(r - r_i) | \Psi \rangle. \quad (\text{B.5})$$

La función de onda del sistema de muchos cuerpos se construye a partir de las soluciones de la ecuación de Schrödinger de una partícula:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \phi_\lambda(r) + V_{eff}(r) \phi_\lambda(r) = \varepsilon_\lambda \phi_\lambda(r), \quad (\text{B.6})$$

donde se calcula el conjunto ortonormal completo de funciones propias de una sola partícula y las energías correspondientes. En la aproximación de Hartree, la función de onda de muchos cuerpos Ψ_H se escribe como un producto de las funciones de onda de los estados ocupados de una sola partícula:

$$\Psi_H = \phi_{\lambda_1, \sigma_1}(r_1, S_1) \phi_{\lambda_2, \sigma_2}(r_2, S_2) \cdots \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}(r_{N_e}, S_{N_e}), \quad (\text{B.7})$$

donde la función de onda $\phi_{\lambda_i, \sigma_i}(r_i, S_i)$ denota el producto de las funciones espaciales y de espín. Al sustituir esta función de onda en (B.5), el requisito de autoconsistencia para la densidad conduce a:

$$\begin{aligned} n_e(r) &= \sum_{i=1}^{N_e} \int d\xi_1 \int d\xi_2 \cdots \int d\xi_{N_e} \phi_{\lambda_1, \sigma_1}^*(\xi_1) \phi_{\lambda_2, \sigma_2}^*(\xi_2) \cdots \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}^*(\xi_{N_e}) \\ &\quad \times \delta(r - r_i) \phi_{\lambda_1, \sigma_1}(\xi_1) \phi_{\lambda_2, \sigma_2}(\xi_2) \cdots \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}(\xi_{N_e}), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

en donde ξ_i es una notación para r_i y S_i . Las funciones de espín, se obtienen fácilmente que para una cantidad independiente del espín como la densidad electrónica el producto de las funciones de espín en (B.8) da la unidad. La integración sobre las variables espaciales puede realizarse utilizando la ortonormalidad de las funciones de onda de una sola partícula. Entonces:

$$\begin{aligned} n_e(r) &= \sum_{i=1}^{N_e} \int dr_1 \int dr_2 \cdots \int dr_{N_e} \phi_{\lambda_1, \sigma_1}^*(r_1) \phi_{\lambda_2, \sigma_2}^*(r_2) \cdots \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}^*(r_{N_e}) \\ &\quad \times \delta(r - r_i) \phi_{\lambda_1, \sigma_1}(r_1) \phi_{\lambda_2, \sigma_2}(r_2) \cdots \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}(r_{N_e}) \\ &= \sum_{i=1}^{N_e} |\phi_{\lambda_i}(r)|^2. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Un electrón en el estado λ_i siente solo los potenciales generados por otros electrones $N_e - 1$, es decir, el potencial efectivo que actúa sobre ese electrón es:

$$V_{eff}(r) = V_{ion}(r) + \tilde{e}^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} \int dr' \frac{|\phi_{\lambda_j}(r')|^2}{|r - r'|}, \quad (\text{B.10})$$

y las funciones de onda de una sola partícula tienen que calcularse a partir de las ecuaciones:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \phi_{\lambda_i}(r) + V_{ion}(r) \phi_{\lambda_i}(r) + \tilde{e}^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} \int dr' \frac{|\phi_{\lambda_j}(r')|^2}{|r - r'|} \phi_{\lambda_i}(r) = \varepsilon_{\lambda_i} \phi_{\lambda_i}(r), \quad (\text{B.11})$$

conocidas como las ecuaciones de Hartree. Para una integración general de dos partículas, tiene la forma¹:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \phi_{\lambda_i}(r) + V_{ion}(r) \phi_{\lambda_i}(r) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} \int dr' U(r - r') |\phi_{\lambda_j}(r')|^2 \phi_{\lambda_i}(r) = \varepsilon_{\lambda_i} \phi_{\lambda_i}(r). \quad (\text{B.12})$$

B.2. Aproximación de Hartree-Fock

El efecto de los electrones que se tiene en cuenta en la aproximación de Hartree es simple, principalmente en el manejo del espín y el cumplimiento del principio de exclusión de Pauli, para lo cual se logra una mejor aproximación asumiendo una mejor forma para la función de onda. Dado que los electrones son fermiones, la función de onda total tiene que ser completamente antisimétrica, es decir, tiene que cambiar de signo siempre que las variables espaciales y de espín de cualquier dos electrones se intercambian:

$$\Psi(\dots, r_i, S_i, \dots, r_j, S_j, \dots) = -\Psi(\dots, r_j, S_j, \dots, r_i, S_i, \dots). \quad (\text{B.13})$$

La función de onda que satisface este requisito puede escribirse en forma compacta como determinante de Slater:

$$\Psi_{HF} = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \phi_{\lambda_1, \sigma_1}(r_1, S_1) & \phi_{\lambda_1, \sigma_1}(r_2, S_2) & \dots & \phi_{\lambda_1, \sigma_1}(r_{N_e}, S_{N_e}) \\ \phi_{\lambda_2, \sigma_2}(r_1, S_1) & \phi_{\lambda_2, \sigma_2}(r_2, S_2) & \dots & \phi_{\lambda_2, \sigma_2}(r_{N_e}, S_{N_e}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}(r_1, S_1) & \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}(r_2, S_2) & \dots & \phi_{\lambda_{N_e}, \sigma_{N_e}}(r_{N_e}, S_{N_e}) \end{vmatrix}. \quad (\text{B.14})$$

¹Jenő Sólyom. ref [3], páginas 18-20

Evaluando el valor esperado de la energía con esta función de onda, se obtiene:

$$\begin{aligned}
E_{HF} = \langle H \rangle &= \sum_{i=1}^{N_e} \int dr \phi_{\lambda_i}^*(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} + V_{ion}(r) \right] \phi_{\lambda_i}(r) \\
&+ \frac{\tilde{e}^2}{2} \sum_{i,j=1}^{N_e} \int dr \int dr' \frac{|\phi_{\lambda_i}(r')|^2}{|r-r'|} |\phi_{\lambda_i}(r)|^2 \\
&- \frac{\tilde{e}^2}{2} \sum_{i,j=1}^{N_e} \int dr \int dr' \frac{1}{|r-r'|} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \phi_{\lambda_i}^*(r) \phi_{\lambda_j}^*(r') \phi_{\lambda_i}(r') \phi_{\lambda_j}(r).
\end{aligned} \tag{B.15}$$

A diferencia de la aproximación de Hartree, no hay necesidad de imponer la restricción $j \neq i$, puesto que las contribuciones procedentes de los términos $j = i$ se anulan entre sí en los dos últimos términos. Para obtener las funciones de onda óptima que al mismo tiempo satisfacen la condición de ortogonalidad, las restricciones son reforzadas por el método de los multiplicadores de Lagrange². La variación independiente con respecto a ϕ_{λ_i} y $\phi_{\lambda_i}^*$ conduce a:

$$\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \phi_{\lambda_i}(r) + V_{ion}(r) \phi_{\lambda_i}(r) + \tilde{e}^2 \sum_{j=1}^{N_e} \int dr' \frac{|\phi_{\lambda_i}(r')|^2}{|r-r'|} \phi_{\lambda_i}(r) \\
&- \tilde{e}^2 \sum_{j=1}^{N_e} \int dr' \frac{\phi_{\lambda_i}^*(r') \phi_{\lambda_j}(r')}{|r-r'|} \phi_{\lambda_j}(r) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} = \tilde{\xi}_{\lambda_i} \phi_{\lambda_i}(r).
\end{aligned} \tag{B.16}$$

Como en la aproximación de Hartree, los valores de los multiplicadores de Lagrange en el mínimo dan los valores propios energéticos y se les denota por $\tilde{\xi}_{\lambda_i}$ para distinguirlos de las energías obtenidas en la aproximación de Hartree. El factor $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ aparece porque solo pueden intercambiar partículas con idénticos espines. Por supuesto, similar a las ecuaciones de Hartree, estas ecuaciones tienen que ser resueltas de manera consistente. El potencial de Hartree local introducido en la ecuación (B.3) se escribe en términos de las funciones de onda de una sola partícula en la forma:

$$V_H = \sum_{j=1}^{N_e} \int dr' U(r-r') |\phi_{\lambda_j}(r')|^2, \tag{B.17}$$

en contraste con el término de Hartree, el término de intercambio solo se escribe en términos de un potencial de intercambio no local $V_x(r, r')$ definido por:

$$-\sum_{j=1}^{N_e} \int dr' U(r-r') \phi_{\lambda_j}^*(r') \phi_{\lambda_j}(r) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \phi_{\lambda_i}(r') = \int V_x(r, r') \phi_{\lambda_i}(r') dr'. \tag{B.18}$$

²El método de los multiplicadores de Lagrange, es un procedimiento para encontrar los máximos y mínimos de funciones de múltiples variables sujetas a restricciones.

Las ecuaciones de Hartree-Fock son entonces equivalentes a las ecuaciones de Schrödinger no locales son³:

$$\int H_{HF}^{(1)}(r, r') \phi_{\lambda_i}(r') dr' = \tilde{\epsilon}_{\lambda_i} \phi_{\lambda_i}(r), \quad (\text{B.19})$$

donde,

$$H_{HF}^{(1)} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{ion}(r) + V_H \right) \delta(r - r') + V_x(r, r'). \quad (\text{B.20})$$

B.3. Teoría de Campo Medio

En materia condensada, la teoría de campo medio estudia el comportamiento de grandes y complejos diseños estocásticos de un modelo determinado. Tales modelos consideran un gran número de componentes individuales que interactúan entre ellos. El efecto de un elemento en cualquier otro es aproximado a un solo resultado esperado, convirtiendo un problema de muchos cuerpos en un problema de un solo cuerpo, lo que proporciona una herramienta para el estudio de las interacciones entre las diferentes especies. Considerando un modelo ferromagnético; por ejemplo, cada espín de un electrón está en un campo magnético local h' , que es el campo externo h (que se supone que es muy pequeño), más el campo proporcionado por los espines vecinos. El valor medio m de un espín en el campo h' debe seguir la ley de Curie, es decir, debe ser proporcional a h' e inversamente proporcional a T :

$$m = \frac{ch'}{T}, \quad (\text{B.21})$$

donde c es una constante. La teoría de campo medio asume que el campo debido a los espines vecinos es una función del promedio de todos los espines, a saber, m . Si m es muy pequeño, este campo es lineal en m . Así, se tiene que:

$$h' = h + am, \quad (\text{B.22})$$

donde a es una constante. Se puede combinar (B.21) y (B.22) para obtener:

$$m = \frac{c(h + am)}{T} \Rightarrow m = \frac{1}{T}(hc + acm), \quad (\text{B.23})$$

sabiendo que $T_C = ac$,

$$\begin{aligned} mT &= hc + mT_C \Rightarrow m(T - T_C) = hc \\ &\Rightarrow m = \frac{hc}{T - T_C}, \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

³Jenő Sólyom. ref [3], páginas 24-26

y

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial T} \propto \frac{1}{(T - T_C)}. \quad (\text{B.25})$$

La ecuación (B.25) es la ley de Curie-Weiss⁴.

B.3.1. Campo Medio

Considerando el siguiente Hamiltoniano⁵:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i. \quad (\text{B.26})$$

La dificultad en el tratamiento radica en la presencia de la interacción $\sigma_i \sigma_j$. Observando la ecuación (B.26), se notara que el termino $\sigma_i \sigma_j$ se escribe en la forma:

$$- \sum_i \left(\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_j \right) \sigma_i. \quad (\text{B.27})$$

Evidentemente, el termino entre el paréntesis de (B.27) actúa sobre la variable σ_i como un campo interno (molecular) dependiente de i creado por la interacciones de los $j(\neq i)$ -espines con el i -ésimo. Sin embargo, el campo interno depende de los estados microscópicos locales en los sitios i , es decir, en la configuración σ_{jnn}^i . La construcción de un campo interno que actúe como un campo externo sería inútil, a menos que se libere de la dependencia σ_i . Una elección apropiada para el campo molecular será el valor más probable de la suma entre paréntesis en (B.27), es decir,

$$-\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} J_{ij} \langle \sigma_j \rangle. \quad (\text{B.28})$$

Esta es la aproximación conocida del campo medio para el campo molecular. En donde se aplicara el procedimiento de campo medio (MF) de forma más consistente escribiendo la variables de Ising σ_i ;

$$\sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + \delta \sigma_i, \quad (\text{B.29})$$

donde $\delta \sigma_i$ es la salida de σ_i del valor medio $\langle \sigma_i \rangle$. El término $\sigma_i \sigma_j$ en (B.26), se convierte en:

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \langle \sigma_i \rangle \sigma_j - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + \delta \sigma_i \delta \sigma_j. \quad (\text{B.30})$$

⁴Shang-Keng Ma. ref [13], páginas 34-38

⁵Este Hamiltoniano es conocido como el Hamiltoniano de Ising, que pertenece al modelo de Ising. (Este modelo se puede observar en el capítulo 2. Sistemas Atómicos Fríos: Métodos y Propiedades).

En esta etapa se descuidara el término de la fluctuación $\delta\sigma_i\delta\sigma_j$ en la ecuación (B.30). Además, reemplazando la interacción $\sigma_i\sigma_j$ con los tres primeros términos de la ecuación (B.30). El hamiltoniano (B.26) se escribe en la forma reducida⁶,

$$H = - \sum_i h_i^{eff} \sigma_i - A(\langle\sigma\rangle), \quad (\text{B.31})$$

donde,

$$h_i^{eff} = h_i + h_i^{MF}, \quad (\text{B.32})$$

con el MF ,

$$h_i^{MF} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} (J_{ij}) \langle\sigma_j\rangle \langle\sigma_i\rangle, \quad (\text{B.33})$$

y

$$A = \sum_i A_i, \quad A_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} J_{ij} \langle\sigma_j\rangle \langle\sigma_i\rangle. \quad (\text{B.34})$$

⁶D.I. Uzunov. ref [14], páginas 176-177

Bibliografía

- [1] Inguscio, Massimo and Fallani, Fallani. *Atomic Physics: Precise Measurements and Ultracold Matter*. Oxford University Press, 1st edition, 2013.
- [2] Bloch, I.; Dalibard, J. and Zwerger, W. *Many-Body Physics With Ultracold Gases*. Rev. Mod. Phys. 80:885, 2008.
- [3] Jenő Sólyom. *Fundamentals of the Physics of Solids (Vol. I-III)*. Springer, 1st edition, 2007.
- [4] Lewenstein, Maciej; Sanpera, Anna and Ahufinger, Veronica. *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Many-Body*. Oxford University Press, Reprint edition, 2017.
- [5] Essler, F.; Halger, F. and Göhmann, F. *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, 1st edition, 2005.
- [6] Caballero-Benítez, Santiago F. and Ostrovskaya, Elena A. Ground State Properties of a Three-site Bose-Fermi Ring With a Small Number of Atoms. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 44(135301), 2011.
- [7] Stephen Blundell. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press, 1st edition, 2001.
- [8] Pethick, C.J. and Smith, H. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2nd edition, 2008.
- [9] André Eckardt. Atomic Quantum Gases in Periodically Driven Optical Lattices. *Rev. Mod. Phys.*, 89(011004), 2017.
- [10] Nishimori, H. and Ortiz, G. *Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, Reprint edition, 2015.
- [11] Daniel J. Amit. *Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena*. World Scientific Publishing Company, Revised Second edition, 2008.

- [12] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 1st edition, 1987.
- [13] Shang-Keng Ma. *Modern Theory of Critical Phenomena*. Westview Press, 1st edition, 2000.
- [14] D.I. Uzunov. *Introduction to the Theory of Critical Phenomena: Mean Field, Fluctuations and Renormalization*. World Scientific Pub Co Inc, 1st edition, 1992.
- [15] Ashcroft, N. and Mermin, D. *Solid State Physics*. Brooks/cole, 1st edition, 1975.
- [16] University of Strathclyde. (4 de Enero de 2012). *Realisation of a Metastable Mott-Insulator*. Glasgow, Reino Unido: Quantum Optics and Quantum Many-body Systems. <http://qoqms.phys.strath.ac.uk>.
- [17] Andrew J. Daley. (27 de Julio de 2015). *Viewpoint: Towards an Atomtronic Diode*. Glasgow, Reino Unido: American Physical Society. <http://physics.aps.org/articles/v8/72>.
- [18] Patterson, J. and Bailey, B. *Introduction to the theory Solid-State Physics*. Springer, 2nd edition, 2007.
- [19] Duchon, Eric; Yen Lee Loh and Trivedi, Nandini. Optical Lattice Emulators: Bose and Fermi Hubbard Models. Chapter in Novel Superfluids, Vol. 2, 75 pages, 2013.
- [20] Anders, Peter; Gull, Emanuel; Pollet, Lode; Troyer, Matthias and Werner, Philipp. Dynamical Mean Field Solution of the Bose-Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.*, 105(096402), 2010.
- [21] David Broun. *Introduction to Solid State Physics*. Canadian Institute For Advanced Research, 1st edition, 2015.
- [22] A.L. Fetter and J.D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Dover Publications, 2003.
- [23] E.K.U. Gross, E. Runge and O. Heinonen. *Many-Particle Theory*. Adam Hilger, 1st edition, 1991.
- [24] Franz Schwabl. *Statistical Mechanics*. Springer, 2nd edition, 2006.
- [25] Pathria,R.K. and Beale, Paul D. *Statistical Mechanics*. Academic Press, third edition, 2011.
- [26] Franz Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. Springer, 4th edition, 2008.

- [27] Cohen-Tannoudji, Claude et al. *Quantum Mechanics Vol. I*. Hermann and John Wiley & Sons, 1st edition, 1977.
- [28] Cohen-Tannoudji, Claude et al. *Quantum Mechanics Vol. II*. Hermann and John Wiley & Sons, 1st edition, 1977.
- [29] Naoto Nagaosa. *Quantum Field Theory In strongly Correlated Electronic Systems*. Springer, 1st edition, 1999.
- [30] Carr, L.D. and Holland, M.J. Quantum Phase Transitions in the Fermi-Bose Hubbard model. *Phys. Rev. A*, 72(031604), 2005.
- [31] Bukov, Marin and Pollet, Lode. Mean-Field Phase Diagram of the Bose-Fermi Hubbard Model. *Phys. Rev. B*, 89(094502), 2014.
- [32] Caballero-Benitez, Santiago F. et al. Quantum Measurement-induced Dynamics of Many-Body Ultracold Bosonic and Fermionic Systems in Optical Lattices. *Phys. Rev. A*, 93(023632), 2016.
- [33] Schwarz, R. et al. Lattice-induced photon scattering in an optical lattice clock. *Physikalisch-Technische Bundesanstalt*, 100(38116), 2018.
- [34] Fläschner, N. et al. High precision spectroscopy of ultracold atoms in optical lattices. *cornell university library*, 1801.05614, 2018.