

ENTREVERAMIENTO EN REDES BOSONICAS UNIDIMENSIONALES

Carlos Alberto Ávila Palacios

Director: Jereson Silva Valencia, Ph.D

Tesis de grado presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ciencias Física

Director:
Ph.D., Jereson Silva Valencia

GRUPO DE SISTEMAS CORRELACIONADOS

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física.
Junio 2011

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar quiero agradecer a mi director de tesis, el Profesor Jerson Silva Valencia, por todo el apoyo brindado en el transcurso de mi maestría, en el desarrollo de mi tesis, por el tiempo dedicado y por los conocimientos impartidos.

Al profesor Roberto Franco por el apoyo brindado.

A mi familia por todo el apoyo incondicional que me han brindado desde el pregrado. Para ellos muchas gracias por toda su apoyo e infinita paciencia.

A mi abuelita Rosa y a mi abuelita Candelaria por sus sabios consejos.

A mis amigos Fabian, Jonathan, Manuel, David, Oscar y Hector que siempre estan a mi lado brindandome ánimos en las buenas y en las malas.

A mi gran amiga Tatiana, en especial por su valiosa amistad, por estar a mi lado en las buenas y en las malas, por todos los consejos que me ha brindado y por todos sus mensajes de apoyo y de animo, aún desde el otro lado del mundo.

A Juan Jose Arenas por su ayuda en la implementación del código.

Agradezco también el apoyo financiero por parte de la Universidad Nacional de Colombia por medio de los proyectos DIB-8003357, DIB-8003353 y DIB-8003409.

Por último agradezco a Dios.

Contenido

Tabla de Contenidos	v
Lista de Figuras	vii
1 Modelo de Bose-Hubbard	9
1.1 Modelo de Hubbard [5]	10
1.1.1 Materiales Reales	11
1.1.2 Transición Metal-Aislante de Mott	12
1.2 Modelo de Bose-Hubbard	12
1.2.1 Interacción débil. Límite $U = 0$.	14
1.2.2 Interacción Fuerte. Límite $t = 0$.	16
1.2.3 Solución de Campo Medio [8]	18
1.2.4 Fase Onda de Densidad de Carga	21
2 Entrelazamiento	25
2.1 Estados Entrelazados	26
2.1.1 Entrelazamiento Bipartita	26
2.2 Criterio de Separabilidad	27
2.2.1 Separabilidad de Estados Puros	27
2.3 Medidas de Entrelazamiento	28
2.3.1 Entrelazamiento Bipartita	29
3 Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad	31
3.1 Grupo de Renormalización	31
3.2 DMRG	32
3.2.1 Algoritmo infinito	34
3.2.2 Algoritmo Finito	35
4 Resultados y Discusión	37
4.1 Sistema con Densidad Entera	37
4.1.1 Caso $\rho = 1$	37
4.1.2 Caso $\rho = 2$	42
4.2 Densidades semi-enteras	45

5 Conclusiones

53

Bibliography

55

Lista de Figuras

1	(a) fase superfluida para $7E_r$ paso de potencial, (b) fase aislante Mott para $20E_r$, (c) Diminución de potencial a $7E_r$, obteniendo de nuevo la fase superfluida. Tomado de [3].	8
1.1	(a) Esquemas del modelo de Bose-Hubbard. (b) Caso límite $t \gg U$. (c) Caso límite $U \gg t$. Tomado de [7], el parámetro J presente en esta figura es equivalente al parámetro t del Hamiltoniano del modelo de Bose-Hubbard.	14
1.2	Espectro de excitación para el estado de aislante de Mott. Los estados excitados forman las bandas de Hubbard que se encuentran separadas por la energía de interacción U , los pares partícula-hueco se muestran en cada banda. Tomado de [7].	18
1.3	Diagrama de fases para diferentes valores de la densidad g . Se observa como la fase Superfluida rodea a la fase aislante de Mott, la cual a medida que crece la densidad el lóbulo aislante se va haciendo menor.	20
1.4	Diagrama de Fases del Modelos Bose-Hubbard con interacción Coulombiana a primeros vecinos. Tomado de [9].	22
1.5	(a). Potencial químico en función del tamaño del sistema para la fase Aislante de Mott (MI) (\bullet) con $\rho = 1$ y $V = 0$ y para la fase Onda de Densidad de Carga (CDW) ($*$) con $\rho = 1/2$ y $V = 0.4$. (b). Potencial químico en función del tamaño del sistema para la fase Superfluida (SF) (\blacktriangle) con $\rho = 3/4$ y $V = 0$. Los índices p y h hacen referencia a la energía necesaria para adicionar una partícula y un hueco, respectivamente. El parámetro de hopping trabajado para las diferentes fases fue $t = 0.1$	23
3.1	Crecimiento de la cadena para el método de grupo de renormalización. Extraído de [18])	32
3.2	Esquema del superbloque para la configuración del algoritmo DMRG. Extraído de [14])	33
3.3	Esquema algoritmo infinito para el método DMRG. Extraído de [19]).	35
3.4	Esquema algoritmo infinito para el método DMRG. Extraído de [19]).	36
4.1	Entropía de un sitio para $\rho = 1$ y $V = 0$	38
4.2	Entropía de dos sitios para $\rho = 1$ y $V = 0$	38

4.3	Entropía de bloque para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 1$	39
4.4	Gap de energía en función de $1/L$. (a) Fase superfluida con $t = 0.33$. (b) Fase aislante de Mott con $t = 0.10$	40
4.5	Entropía de bloque para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 1$ en función de la longitud logarítmica conforme.	41
4.6	Entropía de Bloque para $L = 256$ con $t = 0.30$ junto con su respectivo ajuste de acuerdo a la ecuación (2.11).	41
4.7	Entropía de un sitio para $\rho = 2$ y $V = 0$	42
4.8	Entropía de dos sitios para $\rho = 2$ y $V = 0$	43
4.9	Entropía de bloque para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 2$	44
4.10	Entropía de bloque en función de la Longitud Logarítmica Conforme para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 2$	44
4.11	Entropía de bloque para $L = 256$ con $t=0.18$ junto a su respectivo ajuste dado por la ecuación (2.11).	45
4.12	Entropía de un sitio para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$	46
4.13	Entropía de un sitio para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$	47
4.14	Entropía de un sitio para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$	47
4.15	Entropía dos sitios para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$	48
4.16	Entropía de bloque para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$	49
4.17	Entropía de bloque en función de la longitud conforme para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$	49
4.18	Zoom $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$	50
4.19	Punto de transición.	50

Resumen

Nosotros estudiamos los puntos críticos cuánticos del modelo de Bose-Hubbard en una cadena unidimensional implementando la entropía de von Neumann de bloque, de un sitio y dos sitios mediante el método de Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad, para densidades con valor entero -sin interacción a primeros vecinos- y semientero -con interacción a primeros vecinos-. Para todos los casos el valor de la interacción Coulombiana en un sitio se mantuvo constante e igual a $U = 1$ y se realizó un barrido sobre el parámetro t , el cual representa la energía cinética de los bosones. Asimismo, para todos los casos se mantuvo el número de bosones constante y el modelo fue analizado con condiciones de frontera abiertas. Para sistemas con densidades de $\rho = 1$ y $\rho = 2$ se observó que la entropía de von Neumann de bloque muestra un cambio en su comportamiento a medida que el parámetro t se incrementa, indicándonos una transición de fase entre la fase Aislante de Mott y la fase Superfluida. Para $\rho = 1$ se encontró un valor crítico en $t_c = 0.30$ con una diferencia del 2.4%, 4.3% y 1.6% con respecto a los valores reportados por Kuhner y colaboradores [9], Lauchli y colaboradores [13] y Ejima y colaboradores [25], y para el caso $\rho = 2$ se encontró un valor crítico en $t_c = 0.18$, igualando al valor reportado por Ejima y colaboradores [25]. En los casos anteriores la entropía von Neumann de un sitio y de dos sitios no dan información de la transición de fase. Cuando el sistema tiene una densidad de $\rho = 1/2$ se observó que tanto la entropía de bloque como la entropía de un sitio dan información acerca de la transición de fase entre la fase Onda Densidad de Carga y la fase Superfluida, obteniéndose por medio de la primera medida, un valor crítico de $t_c = 0.127$ el cual difiere un 1.6% del valor reportado por Kuhner y colaboradores en [9]. La entropía de dos sitios no da información de la transición de fase cuántica. Lo observado por nosotros muestra que la entropía de von Neumann de bloque puede ser una pista como medida útil y como indicador de los puntos de transición de fase, ya que está mostró los puntos críticos para los dos casos estudiados.

Palabras Clave: Modelo de Bose-Hubbard, Transiciones de fase cuánticas, DMRG, Entreveramiento.

Abstract

We studied the quantum critical points of the Bose-Hubbard model in a one-dimensional chain, implementing the von Neumann entropy by means of the Density Matrix Renormalization Group (DMRG) for integer value densities -without first neighbor interaction-. For all the cases the Coulombian interaction value in a site U was remained constant and equal to 1. A swept was done over the t parameter, which represents the bosons kinetic energy. The number of bosons was remained constant as well and the model was analyzed with open boundary conditions. For systems with densities $\rho = 1$ and $\rho = 2$ it was observed that the block von Neumann entropy shows a change in its behavior as the t parameter increases, indicating a phase transition between Mott Insulator phase and Superfluid phase. For $\rho = 1$ it was found a critical value at $t_0.30$ with a difference of 2.4%, 4.3% and 1.6% with respect to the values reported by Kuhner et. al. [9], Lauchli et. al. [13] and Ejima et. al. [25]. For the $\rho = 2$, it was found a critical value at $t_c = 0.18$, the same value reported by Ejima et. al. [25]. For the systems with integer densities, the one-site and two-site von Neumann entropy, do not give any information about the phase transition. When the system has a density of $\rho = 1/2$ it was observed that the block entropy as well as the one-site entropy did give information about the phase transition about the phase transition between the Charge Density Wave phase and superfluid phase, obtaining by means of the first measurement a critical value of $t_c = 0.127$ which differs a 1.6% from the value reported by Kuhner et. al. in [9]. The two-site entropy did not give information about the quantum phase transition. What we observed is that the block von Neumann entropy could be a useful measurement and an indicator of the phase transition because it showed the critical points for the cases studied.

Keys words: Bose-Hubbard model, Quantum Phase Transitions, DMRG, Entanglement.

Congresos y Artículos

Parte del trabajo desarrollado en esta tesis se ha presentado en los siguientes eventos:

- Participación en el IX Latin American Workshop on Magnetism, Magnetic Materials and their Applications (LAW3M2010) que se realizó en la Universidad Nacional de Colombia sede Manizález del 25 al 29 de Julio de 2010, con la presentación en la modalidad de poster del trabajo titulado *von Neumann entropy of the Bose-Hubbard Model*.
- Participación en workshop At the Frontiers of Condensed Matter V, que se realizó en la ciudad de Buenos Aires, Argentina, del 6 al 10 de Diciembre de 2010, con la presentación en la modalidad de poster del trabajo titulado *von Neumann entropy of the Bose -Hubbard model at half-integer densities*.

Estos artículos se encuentran sometidos a publicación:

- von Neumann entropy of the Bose-Hubbard Model.
- von Neumann entropy of the Bose-Hubbard model at half-integer densities.

Introducción

Las herramientas de la información cuántica han tenido un gran impacto en diferentes áreas de la física -entre ellas la materia condensada-, donde sus métodos son útiles en el análisis de sistemas de muchos cuerpos. A $T = 0$ estos sistemas están a menudo descritos por estados base complejos los cuales contienen todas las correlaciones que dan lugar a las diferentes fases de la materia. Por tanto, el estudio de estos estados base por medio de los métodos desarrollados por la información cuántica, nos pueden mostrar una nueva forma en la detección de los puntos críticos en los cuales ocurren las transiciones de fase y además, la observación de nuevas propiedades [11].

Las medidas de entreveramiento han sido implementadas en diversos sistemas cuánticos por Amico, Fazio, Osterloh y Vedral en [11] estudiando modelos de spin $1/2$ con interacciones de corto y largo alcance, modelos bosónicos, modelos fermiónicos fuertemente correlacionados y redes armónicas, observando sus respectivos diagramas de fase.

A temperatura cero se ha encontrado que los sistemas bosónicos presentan una transición de fase entre una fase aislante y una fase superfluida, donde el modelo más apropiado para su estudio es el modelo de Bose-Hubbard, el cual contiene toda la información física de bosones interactuando fuertemente [2].

Los puntos críticos en los cuales ocurre la transición de fase para el modelo de Bose-Hubbard han sido ampliamente estudiados por diferentes métodos. Kunher, White y Monien en [9] implementaron el método DMRG para hallar el estado base en una cadena unidimensional bosónica con interacciones a primeros vecinos obteniendo el respectivo diagrama de fases, el cual presenta dos transiciones de fase. Para cuando el sistema tiene una densidad entera la transición de fase se da entre las fases aislante de Mott y superfluida, mientras para cuando el sistema posee una densidad semientera la transición de fase se da entre la fase Onda Densidad de Carga y la fase superfluida. Igualmente Lauchli y Kollath en [13] hallaron el punto crítico de una cadena unidimensional bosónica con densidad $\rho = 1$ implementando el método DMRG y realizando medidas de entreveramiento de entropía de von Neumann de bloque. Recientemente Ejima, Fehske y Gebhard en [25] estudiaron las propiedades del estado base mediante el método DMRG obteniendo el parámetro Tomonaga-Luttinger, el cual determina el comportamiento asintótico de las funciones de correlación en la fase

superfluida.

El modelo de Bose-Hubbard también ha sido estudiado experimentalmente por Greiner y colaboradores en [1,3] utilizando allí una red óptica tridimensional y empleando un gas de átomos fríos con interacciones repulsivas atrapados en un potencial periódico. Ellos observaron que el sistema pasa de una fase en la cual los átomos están dispersos por toda la red, los cuales muestran un patrón de interferencia con picos discretos y estrechos (ver figura 1a), a una fase en donde los bosones están localizados en cada sitio de la red, donde el sistema muestra múltiples patrones de interferencia debido a que los estados de Fock formados sobre cada sitio lleva a que la fase macroscópica tenga máxima incertidumbre y los picos de interferencia no sean visibles (ver figura 1b). Igualmente, se observó que la transición de fase es reversible como se observa en la figura 1c, para la cual se partió de la fase aislante y mediante la disminución del potencial se vuelve a obtener la fase superfluida.

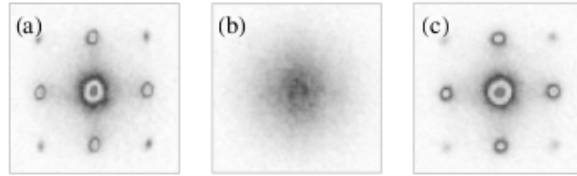


Figura 1 (a) fase superfluida para $7E_r$ paso de potencial, (b) fase aislante Mott para $20E_r$, (c) Diminución de potencial a $7E_r$, obteniendo de nuevo la fase superfluida. Tomado de [3].

Motivados por lo anterior, nosotros estudiamos los puntos de transición de fase para el modelo de Bose-Hubbard en una cadena unidimensional mediante las medidas de entrelazamiento de la Entropía de von Neumann de bloque, de un sitio y de dos sitios con condiciones de frontera abiertas, investigando sistemas con densidades enteras y semienteras. Para ello nosotros implementamos el método de Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad, el cual nos permitió encontrar los valores y vectores propios para sistemas de gran tamaño. Una vez realizada nuestra implementación nosotros reproducimos satisfactoriamente los resultados obtenidos por Lauchli y colaboradores para una densidad de $\rho = 1$ y exploramos las densidades $\rho = 2$ y $\rho = 0.5$.

Capítulo 1

Modelo de Bose-Hubbard

Un sistema que experimenta una transición de fase está cambiando sus propiedades físicas fundamentales, donde los cambios macroscópicos que refleja son debidos a fluctuaciones microscópicas; pero cuando la temperatura del sistema es cero todas las fluctuaciones térmicas desaparecen y no se puede dar una transición de fase por medios clásicos. Para sistemas cuánticos el comportamiento es fundamentalmente diferente ya que existen fluctuaciones a temperatura cero dadas por el principio de incertidumbre de Heiseberg. Estas fluctuaciones cuánticas pueden dar lugar a transiciones de fase brindando una cambio macroscópico del sistema [1]. Un modelo de gran interés en donde se ha observado transiciones de fase cuánticas es el modelo de Bose-Hubbard, el cual experimenta una transición de fase entre una fase aislante y una fase superfluida. La transición entre la fase Aislante de Mott y la fase Superfluida -que este modelo experimenta- ha sido estudiada teóricamente por P. Fisher y colaboradores en [2] y observada experimentalmente por Greiner y colaboradores en [1,3], donde estos últimos emplearon un gas Ultra-frio de átomos con interacciones repulsivas atrapados en un potencial periódico. La idea que se sigue es considerar el gas Ultra-fío de átomos bosónicos a una temperatura suficientemente baja generando un condensado de Bose-Einstein, el cual se encuentra en un estado superfluido y es sometido a un potencial; que al ser activado suavemente el sistema permanece en la fase superfluida siempre y cuando la interacciones entre átomos sean pequeñas comparadas con el término de tunelamiento. El estado superfluido se encuentra en un régimen en el que una función de onda deslocalizada minimiza la energía del sistema de muchos cuerpos. Cuando la interacción repulsiva entre átomos es mayor comparada con el acoplamiento de tunelamiento la energía se minimiza en cada sitio de la red, donde cada uno de ellos posee el mismo número de átomos. La reducción de las fluctuaciones en el número de bosones en cada sitio del sistema incrementa las fluctuaciones en la fase y en adición aparece un gap de energía en el espectro de excitación. En sistemas cuánticos la competencia entre la energía cinética y la energía de interacción es fundamental para la transición de fase cuántica, la cual se diferencia de las transiciones clásicas que están direccionadas por la competencia entre la energía interna y la entropía [1].

Así el modelo de Bose-Hubbard proporciona la física básica de bosones interactuando fuertemente en una red. Este es un modelo de muchas partículas bosónicas que no puede ser reducido a un modelo de una sola partícula y se encuentra basado en el modelo Hubbard [4], el cual muestra las interacciones básicas presentes en una red fermiónica.

1.1 Modelo de Hubbard [5]

El modelo de Hubbard contiene todos los términos principales para describir las propiedades de sistemas electrónicos correlacionados, cuyo Hamiltoniano se encuentra expresado por

$$H = \sum_{\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_2, \sigma} t(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) c_{\mathbf{R}_1, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}_2, \sigma} + U \sum_{\mathbf{R}} n_{\mathbf{R}, \uparrow} n_{\mathbf{R}, \downarrow}, \quad (1.1)$$

con

$$t(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) = \begin{cases} -t & \text{si } \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 = \tau \\ 0 & \text{para lo demás,} \end{cases}$$

donde τ denota todos los vectores de los primeros vecinos de la red, $c_{\mathbf{R}_i, \sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{R}_i, \sigma}$) es el operador creación (destrucción) de un electrón con spin σ y $n_{\mathbf{R}}$ el operador número.

Los sistemas fermiónicos descritos por el modelo de Hubbard y estudiados en los casos límites $U = 0$, $t = 0$ entre otros, presentan grandes diferencias en sus propiedades tal y como se muestra los siguientes ejemplos:

Límite Gas de Fermi. La solución completa es posible desvaneciendo todas las interacciones locales ($U = 0$) permaneciendo únicamente solo su componente que representa la energía cinética. Este modelo describe un gas libre de Fermi el cual tiene un comportamiento metálico.

Límite Atómico. El modelo de Hubbard también se puede solucionar en el límite atómico ($t = 0$), donde cada sitio de la red puede estar ocupado por uno o dos electrones o por ninguno. El estado base y todos los estados excitados están altamente degenerados con respecto al spin y por tanto los sitios de la red no se comunican unos con otros, comportándose el sistema como un aislante.

Límite de interacciones fuertes ($U \rightarrow \infty$). En este caso a pesar de que U tiende al infinito existe un acoplamiento finito entre los sitios de la red, contrario al caso anterior. En este sistema el potencial químico es discontinuo en $N = L$, con N es el número de electrones y L es número de sitios, debido a que la destrucción de un

electrón requiere una energía finita mientras que la creación de un electrón requiere una energía $\mu^+ \rightarrow \infty$. Para $n_\uparrow + n_\downarrow = n = 1$ y $U = \infty$ se tiene que el sistema en el estado base se comporta como un aislante.

Límite $U \gg 0$. En este caso se tiene que el modelo de Hubbard en medio llenado y describe un aislante antiferromagnético en todas las dimensiones.

1.1.1 Materiales Reales

El modelo de Hubbard es útil en la descripción de algunos materiales reales como:

Polímeros

Los polímeros son un importante ejemplo unidimensional para sistemas de electrones correlacionados. Este sistema unidimensional sufre una distorsión Peierls y el modelo original de Hubbard tiene que ser extendido al modelo Peierls-Hubbard, el cual permite el acoplamiento de los electrones y distorsiones en la red. Las correlaciones de los electrones son encontradas para reforzar la distorsión Peierls del estado base y influencia fuertemente el espectro de excitaciones para polímeros. Igualmente en esta clase de materiales también se han observado excitaciones que indican una repulsión Coulombiana de largo alcance que son cruciales en la descripción correcta de estos materiales.

Superconductores a altas temperaturas

Los superconductores a altas temperaturas con sus características capas de óxido de cobre también pertenecen a la clase de sistemas de electrones correlacionados. Al igual que el Lantano de óxido de cobre ($LaCuO_4$) las capas no dobladas son aislantes antiferromagnéticos con una alta temperatura de Néel, un indicador típico de fuertes correlaciones entre los electrones. Por tanto es probable que las correlaciones de los electrones desempeñen un papel importante en el mecanismo microscópico de la superconductividad a altas temperaturas. Para este caso no solo se tiene un término de interacción U_d entre los electrones d en el sitio \mathbf{R} de la red, sino que también se tiene un U_p para los electrones p en los sitios $\mathbf{R}'(\mathbf{R}'')$ sobre las líneas entre los puntos de la red cuadrada. También se permite la interacción Coulombiana a primeros vecinos entre los electrones de cobre y oxígeno.

Materiales de Fermiones Pesados

Los materiales compuestos por tierras raras también son sistemas de electrones correlacionados como por ejemplo el $CeAl_3$. Su estado metálico a bajas temperaturas

muestra un coeficiente de calor específico lineal del orden de $10^2 \dots 10^3$ veces mayor respecto a materiales ordinarios. Lo cual corresponde a una alta densidad electrónica en el nivel de Fermi. La física de estos materiales está dominada por las repulsiones locales de los electrones. Este sistema puede ser descrito por el modelo generalizado de (Fano-)Anderson, que junto con el modelo de Hubbard puede ser reducido al caso límite $U \rightarrow \infty$. Los modelos de Kondo y Kondo-Lattice describen la interacción de espines magnéticos con electrones de conducción.

Helio Líquido

Debido a dos protones y un electrón en su núcleo el ^3He es un fermión, donde la distribución de carga es de simetría esférica y fuertemente polarizable. La interacción entre átomos es débil y de tipo van-der-Waals. El Helio líquido se solidifica a una presión de alrededor 34 bar y a una temperatura por debajo de 1 K . Las partículas dentro de este sistema experimentan una fuerte repulsión Coulombiana, a cortas distancias, debida al cascarón de electrones. A bajas temperaturas la distancia promedio de una partícula es ligeramente menor que el diámetro de un átomo simple, si se interpreta la distancia promedio de la partícula como el radio de una celda de Wigner-Seitz se obtiene el modelo de lattice-gas para este sistema fermiónico correlacionado, en el que los fermiones están restringidos a un simple banda; además ignorando los efectos de una interacción atractiva mas allá de la red, i.e. una interacción puramente local. El conjunto de estas aproximaciones lleva a que el sistema de Helio Líquido pueda ser descrito satisfactoriamente con el modelo de Hubbard.

1.1.2 Transición Metal-Aislante de Mott

El modelo de Hubbard en medio llenado describe un metal para $U = 0$ y un aislante antiferromagnético para $U \gg W$, con W el ancho de banda. Por tanto el modelo es capaz de describir una transición de Mott para un valor crítico de U_c el cual puede ser encontrado únicamente en casos especiales. El modelo de Hubbard unidimensional con interacciones a primeros vecinos la fase metálica está confinada al punto singular $U = 0$, por tanto una transición metal-aislante no existe en medio llenado. El punto ($U = 0, n = 1, T = 0$) en el espacio de parámetros del modelo de Hubbard representa un punto crítico.

1.2 Modelo de Bose-Hubbard

La similitud existente entre el modelo de Hubbard y el de Bose-Hubbard radica en que las partículas fermiónicas son reemplazadas por partículas bosónicas, donde este modelo nos proporciona un Hamiltoniano sencillo para un sistema de muchos cuerpos

que posee propiedades no triviales.

Sean \hat{b}_i^\dagger y \hat{b}_i los operadores creación y destrucción en el sitio i de la red, respectivamente, los cuales satisfacen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] &= \delta_{ij} \\ [\hat{b}_i, \hat{b}_j] &= 0 \\ [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] &= 0 \end{aligned}$$

El operador número de bosones está definido como:

$$\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i,$$

el cual indica la cantidad de partículas que se encuentran en el sitio i , permitiendo un número arbitrario de bosones en cada sitio de la red. El espacio de Hilbert esta conformado por estados $|\{m_j\}\rangle$ cuyos valores propios del operador número son:

$$\hat{n}_i |\{m_j\}\rangle = m_i |\{m_j\}\rangle$$

donde cada m_j en el conjunto $\{m_j\}$ puede tomar cualquier valor entero mayor o igual que cero.

El Hamiltoniano del modelo de Bose-Hubbard está dado por [6]:

$$\hat{H}_{BH} = -t \sum_i \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + \hat{b}_i \hat{b}_{i+1}^\dagger \right) - \mu \sum_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (1.2)$$

El primer término representa la energía cinética de los bosones la cual les permite saltar entre sitios vecinos. El parámetro t está caracterizado por los elementos de la matriz de salto entre sitios adjuntos $i, i + 1$

$$t = - \int d^3x w(x - x_i) (-\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V_{lat}(x)) w(x - x_{i+1}),$$

donde $w(x - x_i)$ es la función de Wannier de una partícula localizada en el sitio i de la red, $V_{lat}(x)$ indica el potencial óptico y m es la masa de un átomo. Por ejemplo si cada sitio representa un grano superconductor, entonces t representa el tunelamiento Josephson que permite a los pares de Cooper moverse entre granos. El segundo término, μ , representa el potencial químico de los bosones. Dependiendo de las condiciones físicas el sistema puede tener el potencial químico fijo (ensamble gran canónico) o tener fijo el número de bosones (ensamble canónico). El último término representa la interacción local dada por la repulsión Coulombiana entre dos bosones ubicados en el sitio i de la red, y que se encuentra cuantificada por el parámetro U el cual representa los elementos de matriz de interacción en un sitio dada por:

$$U = (4\pi\hbar^2 a/m) \int |w(x)|^4 d^3x,$$

donde a es la longitud de dispersión de un átomo. Ya que las interacciones que se tienen son de corto alcance y son mucho menores que el espacio entre sitios de la red, la energía de interacción está bien definida por el parámetro U [1].

En la figura 1.1(a) se muestra una descripción esquemática de los efectos producidos por la competencia entre la energía cinética y la repulsión Coulombiana de los bosones; estos pueden saltar a sitios vecinos con una amplitud t y U permite o no la múltiple ocupación de un sitio. Cuando la energía cinética es dominante en el sistema ($t \gg U$) los bosones se dispersan por toda la red (fig. 1.1b). Cuando la interacción local es dominante ($U \gg t$) el sistema se encuentra completamente lleno y los bosones son fijados a cada sitio de la red (fig. 1.1c). La competencia entre estos dos comportamientos es lo que lleva al sistema a sufrir una transición de fase cuántica [7].

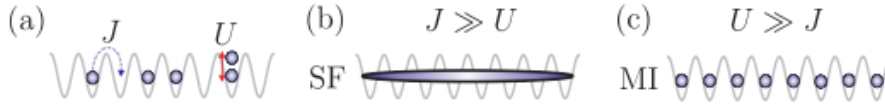


Figura 1.1 (a) Esquemas del modelo de Bose-Hubbard. (b) Caso límite $t \gg U$. (c) Caso límite $U \gg t$. Tomado de [7], el parámetro J presente en esta figura es equivalente al parámetro t del Hamiltoniano del modelo de Bose-Hubbard.

Cabe observar que el Hamiltoniano H_B es invariante bajo la transformación $\hat{b}_i \rightarrow \hat{b}_i e^{i\phi}$ y por tanto posee simetría $U(1)$. Como consecuencia se tiene que el número total de bosones N_b se conserva, el cual está dado por $\hat{N}_b = \sum_i \hat{n}_i$ y que conmuta con el operador Hamiltoniano \hat{H}_{BH} . El potencial químico μ en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard no rompe ninguna simetría y permanece invariante bajo la transformación mencionada anteriormente para cualquier valor de μ , por tanto no hay ningún criterio de simetría natural para preferir un valor específico de μ [6].

1.2.1 Interacción débil. Límite $U = 0$.

Para diagonalizar el Hamiltoniano primero definamos el operador creación en el espacio del cuasi-momentum de la siguiente forma:

$$\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M^D}} \sum_i \hat{b}_i^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$$

donde \mathbf{r}_i representa las coordenadas del sitio i , \mathbf{k} es el vector de onda barrido en la primera zona de Brillouin y M^D es el número total de sitios. Por tanto el Hamiltoniano de Bose-Hubbard se transforma en

$$\hat{H}_{BH} = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k, \quad (1.3)$$

donde la dispersión de partículas en la red cúbica es $\varepsilon_k = -2t \sum_{d=1}^D \cos(k_d a)$ con a el espacio entre sitios. Cuando $|\mathbf{k}|a \ll 1$ el espectro se comporta como $\varepsilon_k \approx t(\mathbf{k}a)^2 - zt$, en el cual $z = 2D$ es el número de vecinos cercanos que posee un sitio en una red de dimensión D . Además ε no presenta algún gap en el límite termodinámico donde el conjunto de todos los posibles \mathbf{k} estados es continuo. El estado base para un sistema de N bosones no interactuantes se obtiene cuando todas las partículas se encuentran en el modo $\hat{c}_0 \equiv \hat{c}_{\mathbf{k}=0}$, el cual está dado por:

$$|\Psi_{EB}\rangle = \frac{(\hat{c}_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\frac{1}{\sqrt{M^D}} \sum_{i=1}^M \hat{b}_i^\dagger \right)^N |0\rangle, \quad (1.4)$$

tal que $|0\rangle$ representa el estado vacío debido a la ocupación macroscópica del estado de una partícula simple, por tanto se dice que el estado base es un condensado de Bose-Einstein. También se destaca que el término correspondiente a la energía cinética en H_{BH} es minimizado debido a la deslocalización de las partículas sobre la red.

Realizando una expansión multinomial al operador bosónico se obtiene que

$$\left(\sum_{i=1}^{M^D} \right) = \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_N\}} \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_N!} (\hat{b}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{b}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{b}_M^\dagger)^{n_M},$$

donde la suma se realiza sobre todas las particiones $\{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ de números no negativos que satisfacen $\sum_{i=1}^{M^D} n_i = N$. Por consiguiente la matriz densidad reducida para un sitio $\rho^{(1)}$ está dada por

$$\rho^{(1)} = \sum_{n=0}^N \frac{N!}{(N-n)!n!} \left(\frac{1}{M^D} \right)^n \left(1 - \frac{1}{M^D} \right)^{N-n} |n\rangle \langle n|, \quad (1.5)$$

con $|n\rangle$ representado el estado número. Dado que $|\Psi_{gs}\rangle$ es un estado puro, la mezcla de $\rho^{(1)}$ revela que el estado de cualquier sitio en la red está entrelazado con el resto del sistema independientemente de la dimensión D . En el límite termodinámico, cuando $N, M \rightarrow \infty$ mientras $\frac{N}{M^D}$ se mantiene fijo, la estadística del número de bosones en un sitio es una distribución de Poisson dada por

$$\rho^{(1)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\langle n \rangle} \langle n \rangle^n}{n!} |n\rangle \langle n|,$$

donde el promedio de ocupación en cada sitio es $\langle n \rangle = N/M^D$.

En este límite el sistema se encuentra en un estado superfluido y la fenomenología esencial de ello es atribuida a la presencia del condensado de Bose-Einstein [7].

1.2.2 Interacción Fuerte. Límite $t = 0$.

Para este caso el modelo de Bose-Hubbard se desacopla como la suma sobre todos los sitios de la red del Hamiltoniano correspondiente a un sitio. En el ensamble gran canónico el estado base, que es no-degenerado, está dado en términos del estado número $|g\rangle$ con g un valor entero en función de μ/U definido como

$$g_0(\mu/U) = \begin{cases} 0, & \text{para } \mu/U < 0 \\ 1, & \text{para } 0 < \mu/U < 1 \\ 2, & \text{para } 1 < \mu/U < 2 \\ \vdots & \\ n, & \text{para } g-1 < \mu/U < g, \end{cases} \quad (1.6)$$

cabe notar que la definición de $g(\mu/U)$ excluye los valores para los cuales μ/U toma un valor entero. Para el intervalo $g-1 < \mu/U < g$ el estado base del sistema es el estado de Fock

$$|\psi_{g-\text{EB}}^{(0)}\rangle = \prod_{j=1}^M \frac{1}{\sqrt{g!}} (\hat{b}_j^\dagger)^g |0\rangle = |g, g, \dots, g\rangle, \quad (1.7)$$

con el mismo número de bosones g en cada sitio y una energía $E_{\text{EB}}^{(0)} = \frac{U}{2}Mg(g-1) - \mu Mg$. El número g salta discontinuamente cuando μ/U pasa a través de un punto de degeneración, los cuales corresponden a cuando μ/U toma un valor entero positivo obteniéndose regiones donde

$$\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} = 0,$$

señalando que la densidad no cambia bajo variaciones del potencial químico y como consecuencia el estado es incompresible. Esta propiedad es debida a las interacciones fuertes en cada sitio. Este estado del sistema es denominado Aislante de Mott.

Las excitaciones de nivel más bajo para el estado de Aislante de Mott son tales que cambian el número de partículas ya sea adicionando o removiendo bosones en un sitio i del sistema, las cuales son denominadas excitaciones de partícula (p) o de hueco (h) y cuya forma general está dada por:

$$|\psi_{g-p}^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{g+1}} \hat{b}_i^\dagger |\psi_{g-EB}^{(0)}\rangle, \quad (1.8)$$

$$|\psi_{g-h}^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{g}} \hat{b}_i |\psi_{g-EB}^{(0)}\rangle, \quad (1.9)$$

donde su energía relativa al estado base se encuentra expresada por:

$$E_p^{(0)} = Ug - \mu, \quad (1.10)$$

$$E_h^{(0)} = U(1 - g) + \mu, \quad (1.11)$$

con μ perteneciendo al intervalo $g - 1 < \mu/U < g$. Estas excitaciones están separadas del estado base por un gap que se desvanece cuando μ/U alcanza el punto de degeneración. Como consecuencia se observa que cuando $\mu/U = g$ los estados $|\psi_{g-p}\rangle$, $|\psi_{g+1-h}\rangle$ y $|\psi_{g-EB}^{(0)}\rangle$ se encuentran degenerados y por tanto el estado base es comprensible, donde dichos estados degenerados difieren en el número total de partículas.

Las excitaciones de nivel más bajo para el estado de Aislante de Mott que conservan el número de partículas son estados de Fock con $g + 1$ bosones en el sitio i y $g - 1$ bosones en el sitio j , con todos los demás sitios de la red conteniendo n bosones y cuyo estado se encuentra expresado como

$$|\psi_{g-ph}^{ij}\rangle = \frac{1}{\sqrt{g(g+1)}} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j |\psi_{g-EB}^{(0)}\rangle \quad (1.12)$$

Este tipo de estados son llamados excitaciones partícula-hueco (ph). El espectro de excitaciones conservando el número total de partículas se muestra en la figura 1.2 donde se observa que la energía de excitación es un múltiplo entero de la energía de interacción local U , formando bandas de energía denominadas bandas de Hubbard. Por ejemplo, cuando $E = 3U$ el sistema contiene estados con tres excitaciones ph así como estados con dos excitaciones partícula-hueco en donde las partículas adicionales se encuentran en el mismo sitio [7].

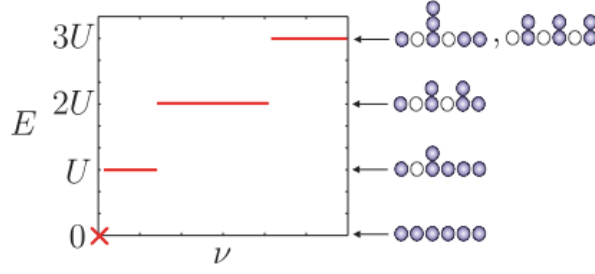


Figura 1.2 Espectro de excitación para el estado de aislante de Mott. Los estados excitados forman las bandas de Hubbard que se encuentran separadas por la energía de interacción U , los pares partícula-hueco se muestran en cada banda. Tomado de [7].

1.2.3 Solución de Campo Medio [8]

Realizando la sustitución

$$\begin{aligned}\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j &= \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle \hat{b}_j + \hat{b}_i^\dagger \langle \hat{b}_j \rangle - \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle \langle \hat{b}_j \rangle \\ &= \psi \left(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j \right) - \psi^2,\end{aligned}\quad (1.13)$$

en (1.2) el Hamiltoniano de Bose-Hubbard se transforma en el siguiente Hamiltoniano efectivo

$$H^{eff} = -zt\psi \sum_i \left(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i \right) + zt\psi^2 N_s + \frac{1}{2}U \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (1.14)$$

donde $z = 2d$ es el número de vecinos más cercanos que posee cada sitio de la red, siendo d la dimensión del sistema y N_s el número total de sitios de la red. El Hamiltoniano anterior es diagonal con respecto al sitio i y por consiguiente se puede emplear el Hamiltoniano efectivo de un sitio particular. Si se introduce las siguientes definiciones $\tilde{U} = U/zt$ y $\tilde{\mu} = \mu/zt$ se obtiene que:

$$H_i^{eff} = -\psi \left(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i \right) + \psi^2 + \frac{1}{2}\tilde{U}\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \tilde{\mu}\hat{n}_i \quad (1.15)$$

el cual es válido para el sitio i [8]. Cabe notar que las energías han sido escaladas en un factor $1/zt$ y por tanto el Hamiltoniano anterior es adimensional. El diagrama de fases se puede obtener analíticamente a partir de la teoría de perturbaciones de segundo orden escribiendo el Hamiltoniano (1.15) de la siguiente forma -omitiendo el subíndice i -

$$H^{eff} = H^{(0)} + \psi V \quad (1.16)$$

donde

$$H^{(0)} = \frac{1}{2} \tilde{U} \hat{n} (\hat{n} - 1) - \tilde{\mu} \hat{n} + \psi^2, \quad (1.17a)$$

$$V = -(b^\dagger + b). \quad (1.17b)$$

Se observa que en la base “número de ocupación” las potencias impares de la expansión de la energía en ψ son siempre cero. Si llamamos a la energía sin perturbar para el estado con n partículas como $E_n^{(0)}$, se encuentra que la energía del estado base esta dada por

$$E_{\text{EB}}^{(0)} = \{E_n^{(0)} | n = 0, 1, 2, \dots\}_{\min} \quad (1.18)$$

comparando $E_n^{(0)}$ y $E_{n+1}^{(0)}$ se obtiene que

$$E_{\text{EB}}^{(0)} = \begin{cases} 0 & \text{si } \tilde{\mu} < 0, \\ \frac{1}{2} \tilde{U} g (g - 1) - \tilde{\mu} g & \text{si } \tilde{U} (g - 1) < \tilde{\mu} < \tilde{U} g. \end{cases} \quad (1.19)$$

La corrección de segundo orden está dada por

$$E_{\text{EB}}^{(2)} = \psi^2 \sum_{n \neq g} \frac{|\langle g | V | n \rangle|^2}{E_g^{(0)} - E_n^{(0)}}, \quad (1.20)$$

donde $|n\rangle$ representa la función de onda sin perturbar con n partículas, donde el estado con $n = g$ partículas es el estado base. Entonces la interacción V acopla solo los estados con más o menos un bosón en el estado base, encontrando que

$$E_{\text{EB}}^{(2)} = \frac{g}{\tilde{U} (g - 1) - \tilde{\mu}} + \frac{g + 1}{\tilde{\mu} - \tilde{U} g}. \quad (1.21)$$

Empleando la teoría de Landau se puede expresar la energía del estado base como una expansión de ψ mediante la siguiente forma:

$$E_{\text{EB}}(\psi) = a_0(g, \tilde{U}, \tilde{\mu}) + a_2(g, \tilde{U}, \tilde{\mu}) \psi^2 + O(\psi^4), \quad (1.22)$$

hallando el mínimo de la expresión anterior en función de ψ , se observa que $\psi = 0$ cuando $a_2(g, \tilde{U}, \tilde{\mu}) > 0$ y que $\psi \neq 0$ cuando $a_2(g, \tilde{U}, \tilde{\mu}) < 0$, entonces $a_2(g, \tilde{U}, \tilde{\mu}) = 0$ nos da la frontera entre la fase Superfluida y la fase Aislante de Mott. Por cosiguiente

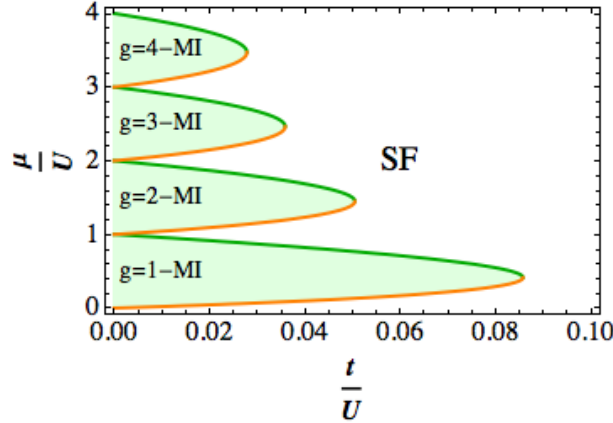


Figura 1.3 Diagrama de fases para diferentes valores de la densidad g . Se observa como la fase Superfluida rodea a la fase aislante de Mott, la cual a medida que crece la densidad el lóbulo aislante se va haciendo menor.

$$a_2(g, \tilde{U}, \tilde{\mu}) = \frac{g}{\tilde{U}(g-1) - \tilde{\mu}} + \frac{g+1}{\tilde{\mu} - \tilde{U}g} + 1 = 0,$$

despejando $\tilde{\mu}$ se encuentra que

$$(\tilde{\mu})_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\tilde{U}(2g-1) - 1 \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{U}^2 - 2\tilde{U}(2g+1) + 1}, \quad (1.23)$$

donde las dos raíces indican la parte superior e inferior de la región aislante de Mott en el espacio de fase, la ecuación anterior expresada en términos de μ/U y t/U se transforma en

$$(\mu/U)_{\pm} = \frac{1}{2} \left[2g - 1 - (zt/U) \pm \sqrt{1 - 2(2g+1)(zt/U) + (zt/U)^2} \right], \quad (1.24)$$

para el caso unidimensional se tiene el diagrama de fases que se muestra en la figura 1.3 con $z = 2$.

La punta de los lóbulos de la fase de aislante de Mott está dada por

$$(t/U)_c = \frac{1}{z(2g+1 + \sqrt{4g^2 + 4g})} \quad (1.25)$$

la cual se obtiene al igualar las dos expresiones dadas por (1.24).

La energía de las excitaciones de nivel más bajo para la fase de Aislante de Mott que conservan el número de partículas se puede observar en la figura 1.3, en donde dicha energía es equivalente a la diferencia de μ entre la frontera superior e inferior de un lóbulo cualquiera de la fase de aislante para un t fijo. La forma particular que muestra la fase aislante se puede explicar de la siguiente forma: Partiendo de un punto perteneciente a la fase aislante en el plano μt y se comienza a incrementar μ para un t fijo, eventualmente se llegará al punto en que la energía cinética ganada debido a la adición de una partícula permitirá el salto alrededor del sistema, lo cual balanceará el costo de energía potencial asociado. Entonces cualquier densidad de partículas diferente de cero están libres para saltar por toda la red sin costos de energía a temperatura cero, inmediatamente se condensan en un condensado de Bose-Einstein produciendo así un estado superfluido. Por tanto se tiene que este punto de balance de energías define la frontera de la transición entre la fase aislante de Mott y la fase superfluida. Similarmente, cuando se disminuye μ partiendo de un punto dentro de la fase aislante de Mott eventualmente hace energéticamente favorable remover bosones del sistema (crear Huecos). Los Huecos siendo libres para saltar por toda la red también se condensarán dentro de un estado superfluido. La energía cinética de los bosones o huecos móviles es incrementada con el aumento de t , implicando que el ancho de μ en el estado Mott disminuya. En el extremo de cada lóbulo aislante la transición de fase se da a densidad constante y por consiguiente el valor de μ no se ve alterado. Tal que para un t suficientemente grande los bosones superan la repulsión Coulombiana en un sitio y saltan por la red condensándose dentro de un estado superfluido. En este punto la transición de fase esta gobernada por el incremento en la energía cinética de los bosones. Si se parte de un punto dentro de la fase aislante y se desplaza hacia la punta de este mediante el incremento de t moviéndose sobre el valor de μ constante correspondiente, el gap de energía para una partícula o un hueco se desvanece como $E_g \sim (t_c - t)^{zv}$ donde el exponente zv es igual a la unidad [2], este tipo de transición pertenece a la clase universal del modelo XY $(D + 1)$ -dimensional, siendo esta un transición de Kosterlitz-Thouless (KT).

1.2.4 Fase Onda de Densidad de Carga

En el trabajo realizado por Till D. Kühner, Steven R. White y H. Monien en [9] se estudiaron los diagramas de fase para sistemas bosónicos unidimensionales a temperatura cero con el modelo de Bose-Hubbard, mediante el método de Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad con el siguiente Hamiltoniano:

$$H_{BH(KWM)} = -t \sum_i \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + \hat{b}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i \right) - \sum_i \mu n_i + U \sum_i n_i (n_i - 1)/2 + V \sum_i n_i n_{i+1}, \quad (1.26)$$

cuya diferencia con el Hamiltoniano mostrado en (1.2) es el término $V \sum_i n_i n_{i+1}$ que representa la interacción Coulombiana con los sitios vecinos, el diagrama de fases para este Hamiltoniano se muestra en la figura 1.4. Debido a la introducción de las

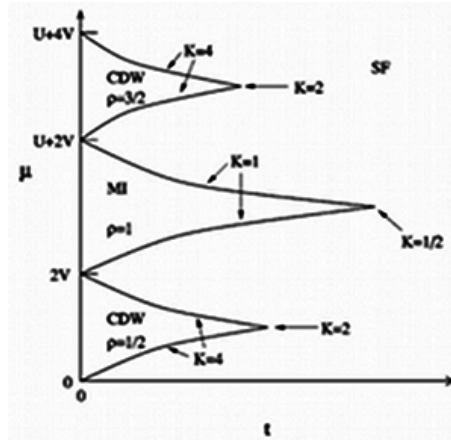
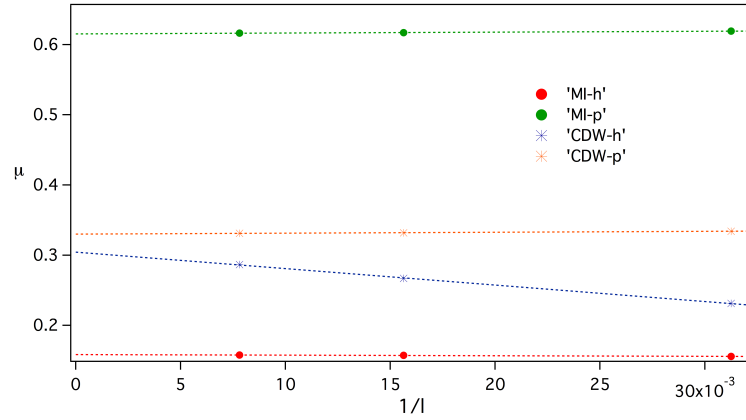


Figura 1.4 Diagrama de Fases del Modelo de Bose-Hubbard con interacción Coulombiana a primeros vecinos. Tomado de [9].

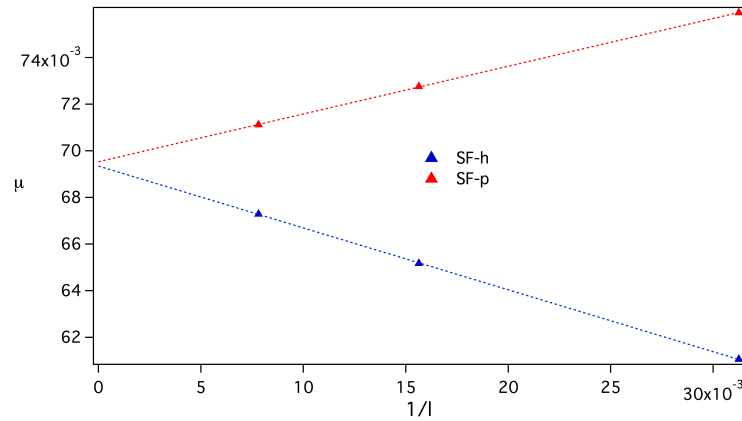
interacciones repulsivas entre primeros vecinos se obtiene la fase Onda de Densidad de Carga (Charge Density Wave, CDW) para densidades semi-enteras y la fase de Aislante de Mott (MI) para densidades enteras, las cuales se encuentran rodeadas por la fase Superfluida (SF).

Como se puede observar en la figura 1.4 aparte de la transición de fase entre las fases de Aislante de Mott y Superfluida también ocurre una transición entre las fases Onda de Densidad de Carga y Superfluida. Para la frontera superior (inferior) del lóbulo CDW la transición de fase es debida al cambio de densidad en la cadena por el efecto de introducir una partícula (hueco) al sistema, pero para el extremo del lóbulo la transición de fase se da a densidad constante y es debida únicamente al incremento de la energía cinética de los bosones, siendo esta una transición de tipo Kosterlitz-Thouless.

La figura 1.5 se obtuvo mediante el método DMRG con condiciones de frontera abiertas y en ella se observan las energías de excitación para una partícula (p) y para un hueco (h) en función del tamaño de la cadena para diferentes densidades. El punto de corte de las curvas con el eje μ representa el límite termodinámico del sistema. Para las fases Aislante de Mott y Onda de Densidad de Carga se observa un gap de energía, lo cual muestra que introducir una partícula y un hueco al sistema implica un gasto de energía caracterizando la no compresibilidad de las fases. Mientras que para la fase Superfluida no hay presencia del gap de energía, lo cual indica que quitar o poner bosones en la red no tiene costos de energía mostrando que el sistema se encuentra en un estado compresible.



(a) Fases Aislantes



(b) Fase Superfluida

Figura 1.5 (a). Potencial químico en función del tamaño del sistema para la fase Aislante de Mott (MI) (\bullet) con $\rho = 1$ y $V = 0$ y para la fase Onda de Densidad de Carga (CDW) ($*$) con $\rho = 1/2$ y $V = 0.4$. (b). Potencial químico en función del tamaño del sistema para la fase Superfluida (SF) (\blacktriangle) con $\rho = 3/4$ y $V = 0$. Los índices p y h hacen referencia a la energía necesaria para adicionar una partícula y un hueco, respectivamente. El parámetro de hopping trabajado para las diferentes fases fue $t = 0.1$.

Capítulo 2

Entreveramiento

Los sistemas cuánticos muestran propiedades desconocidas para sistemas clásicos tales como la superposición de estados cuánticos, interferencia o tunelamiento. Efectos que pueden ser observados en sistemas cuánticos de una partícula. Las correlaciones agregan una diferencia fundamental entre sistemas clásicos y cuánticos, mientras que las correlaciones en sistemas clásicos pueden ser descritas en términos de probabilidades clásicas, en sistemas cuánticos esto no es verdad. Estas correlaciones no-clásicas llevan a aparentes paradojas como lo es la paradoja Einstein Podolsky Rosen. Los estados que muestran correlaciones no-clásicas son denominados *Estados Entreverados* [10].

El entreveramiento expresa la no-localidad inherente en la mecánica cuántica. John Bell derivó un conjunto de desigualdades para mediciones de correlaciones que toda teoría local debe obedecer. Una gran cantidad de experimentos realizados con sistemas cuánticos violan dichas desigualdades y por tanto muestran que el entreveramiento es una realidad física, aunque existen estados que no violan las desigualdades de Bell y aun así estos se encuentran entreverados [11]. La violación de las desigualdades de Bell revela únicamente el hecho que el sistema se encuentra entreverado pero no pueden cuantificar su cantidad de entreveramiento. Las medidas de entreveramiento son cantidades escalares que cuantifican las correlaciones cuánticas, las cuales son computables para sistemas bipartitos puros, pero para describir mediciones experimentales reales es imprescindible permitir una cuantificación para estados mixtos, ya que la influencia del ambiente es inevitable [12].

El rol del entreveramiento como un recurso de la información cuántica ha estimulado el estudio de sus aspectos cualitativos y cuantitativos. Además las herramientas desarrolladas por la información cuántica actualmente se han aplicado a diferentes áreas de la física entre ellas la materia condensada. Por ejemplo, un sistema de muchos cuerpos con $T = 0$ es a menudo descrito por un estado base con una función de onda compleja, la cual contiene todas las correlaciones que dan lugar a diferentes fases de la materia, y mediante el entreveramiento se estudia su estado base [11].

2.1 Estados Entrelazados

El entrelazamiento se encuentra separado entre entrelazamiento bipartita y multipartita, donde para sistemas bipartita o multipartita la existencia del entrelazamiento está basado en la separabilidad del estado del sistema.

2.1.1 Entrelazamiento Bipartita

Un sistema bipartita es un sistema cuántico que está conformado por dos subsistemas físicamente diferentes. Este sistema bipartita se encuentra asociado con un espacio de Hilbert \mathcal{H} que está dado por el producto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ donde cada subespacio describe un sistema.

Un estado $|\Psi\rangle$ es separable si se puede escribir como el producto tensorial de los estados de los subsistemas, i. e. sea $|\varphi\rangle$ y $|\phi\rangle$ los estados de los subsistemas 1 y 2, respectivamente, entonces se tiene que:

$$|\Psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\phi\rangle, \quad (2.1)$$

este estado describe una situación análoga a los sistemas clásicos en los cuales la información del sistema está contenida en los estados de los subsistemas, donde las mediciones realizadas sobre un subsistema no influyen las del otro y por tanto ellos no se encuentran correlacionados. Lo contrario sucede para estados que se encuentran entrelazados, i. e. estados que no pueden ser escritos como un producto de los estados de los subsistemas tal como se muestra en (2.1). En estos estados entrelazados una medida local causa la reducción de todo el sistema y por lo tanto cambia las probabilidades en cada uno de los subsistemas para futuras mediciones.

Los sistemas cuánticos también pueden estar en estados mixtos, los cuales se encuentran generalmente en los experimentos reales. Un estado producto para estados mixtos puede escribirse como el producto tensorial de los estados de los subsistemas, i. e. estados ρ_1 y ρ_2 que describen subsistemas simples tal que:

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2, \quad (2.2)$$

es una suma convexa de todos los estados producto necesarios para representar un estado separable, como se muestra a continuación

$$\rho = \sum_i p_i \rho_1^i \otimes \rho_2^i, \quad (2.3)$$

donde la convexidad implica que los coeficientes p_i son positivos tal que $\sum_i p_i = 1$. Tal estado se refiere a una situación donde las correlaciones entre los diferentes subsistemas es debido al conocimiento incompleto que se tiene sobre el estado del sistema.

Lo cual está completamente caracterizado por las probabilidades clásicas p_i [12].

Un estado mixto ρ está entreverado si no hay estados locales ρ_1^i, ρ_2^i y probabilidades no negativas p_i , tales que ρ pueda ser expresado como una suma convexa. Los estados entreverados implican que las mediciones de correlaciones cuánticas sobre diferentes subsistemas no pueden ser descritos en términos de solo probabilidades clásicas [10].

2.2 Criterio de Separabilidad

La separabilidad está definida como la existencia de una descomposición de un estado en un producto de estados para el caso puro, o en una suma convexa de productos tensoriales para los estados mixtos. El no poder encontrar la separabilidad del estado puede significar que el estado se encuentre entreverado o que el estado es separable pero la descomposición apropiada no es conocida. Por tal razón es necesario establecer criterios para distinguir estados separables y estados entreverados.

2.2.1 Separabilidad de Estados Puros

Un estado bipartita puede ser clasificado con la ayuda de la *Descomposición de Schmidt*. Cada estado bipartita puro $|\Psi\rangle$ puede ser expresado en algún producto de bases, como se muestra a continuación:

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} b_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle. \quad (2.4)$$

Las bases locales $\{|\varphi_i\rangle\}$ y $\{|\phi_j\rangle\}$ pueden ser escogidas arbitrariamente. Definiendo el operador identidad por $\mathbb{1}_1 = \sum_i \mathcal{U}^\dagger |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \mathcal{U}$ para el espacio \mathcal{H}_1 y $\mathbb{1}_2 = \sum_i \mathcal{V}^\dagger |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \mathcal{V}$ para el espacio \mathcal{H}_2 , donde \mathcal{U} y \mathcal{V} son transformaciones locales unitarias, y reemplazando en (2.4) se obtiene que:

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} [ubv]_{ij} \mathcal{U}^\dagger |\varphi\rangle \otimes \mathcal{V}^\dagger |\phi\rangle, \quad (2.5)$$

donde las matrices unitarias u y v están definidos como:

$$u_{ij} = \langle \varphi_i | \mathcal{U} | \varphi_j \rangle \quad \text{y} \quad v_{ij} = \langle \phi_j | \mathcal{V} | \phi_i \rangle.$$

Ahora se puede usar el hecho de que cada matriz compleja b puede ser diagonalizada por dos transformaciones unitarias u y v , con elementos diagonales \mathcal{L}_i reales y no negativos. Entonces cualquier estado puro puede ser representado en términos de los coeficientes de *Schmidt* $\lambda_i = \mathcal{L}_i^2$ y asociado a la base de *Schmidt* $|\xi_i\rangle_1 \otimes |\xi_i\rangle_2 = \mathcal{U}^\dagger |\varphi_i\rangle \otimes \mathcal{V}^\dagger |\phi_i\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i} |\xi_i\rangle_1 \otimes |\xi_i\rangle_2, \quad (2.6)$$

donde la suma se encuentra limitada por la dimensión del subsistema mas pequeño. Dado que la base de *Schmidt* comprende solo estados separables, entonces toda la información del entrelazamiento de $|\Psi\rangle$ está contenida en los coeficientes de *Schmidt* λ_i . La condición de normalización $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ implica que hay $d - 1$ coeficientes independientes.

Los coeficientes de Schmidt pueden ser fácilmente calculados con ayuda de la matriz densidad reducida para el subsistema 1

$$\begin{aligned} \rho_1 &= Tr_2 |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= Tr_2 \sum_{ij} \sqrt{\lambda_i \lambda_j} |\xi_i\rangle_1 \langle\xi_j|_1 \otimes |\xi_i\rangle_2 \langle\xi_j|_2 \\ &= \sum_i \lambda_i |\xi_i\rangle_1 \langle\xi_i|_1, \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde para ρ_2 se obtiene un resultado similar. Entonces los coeficientes de Schmidt están dados por los valores propios de la matriz densidad reducida de cualquiera de los dos subsistemas [12].

Un estado $|\Psi\rangle$ separable requiere que únicamente un coeficiente de Schmidt sea diferente de cero, mientras que un estado puro entrelazado $|\Psi\rangle$ posee al menos dos coeficientes de Schmidt diferentes de cero, lo cual se puede reescribir como:

$$\text{si } Tr \rho_r^2 = 1 \Rightarrow \rho_r \text{ es puro} \Rightarrow |\Psi\rangle \text{ es separable} \quad (2.8)$$

$$\text{si } Tr \rho_r^2 < 1 \Rightarrow \rho_r \text{ está mezclado} \Rightarrow |\Psi\rangle \text{ está entrelazado,} \quad (2.9)$$

donde el subíndice $r = \{1, 2\}$ [10].

2.3 Medidas de Entrelazamiento

Las medidas de entrelazamiento son cantidades escalares que cuantifican las correlaciones cuánticas y que las distinguen de las clásicas. La idea básica para el tratamiento cuantitativo es clasificar todas las clases de operaciones, que en principio pueden ser aplicadas a sistemas cuánticos y que pueden crear o incrementar solo correlaciones clásicas, pero ninguna de naturaleza cuántica. Cualquier cantidad propuesta para cuantificar el entrelazamiento necesita ser monótonamente decreciente bajo tales operaciones, por ende se han considerado cantidades que no se incrementan bajo Operaciones Locales y Comunicación Clásica para cuantificar el entrelazamiento. Cualquier

función escalar que satisface este criterio es llamado *Entreveramiento Monotone* [12].

2.3.1 Entreveramiento Bipartita

Una medida de entreveramiento E se fija imponiendo las siguientes condiciones [11]:

1. E es invariante bajo operaciones locales unitarias. Por tanto E es una función únicamente de los coeficientes de Schmidt.
2. E es continuo.
3. E es aditivo. Cuando varias copias del sistema están presentes se tiene que:

$$E(|\Psi_{AB}\rangle \otimes |\Phi_{AB}\rangle) = E(|\Psi_{AB}\rangle) + E(|\Phi_{AB}\rangle)$$

donde A y B hacen referencia a los dos subsistemas que componen un sistema bipartita.

Una medida que satisface las anteriores condiciones es la entropía de von Neumann. Entonces sea un sistema de tamaño L el cual se divide en dos subsistemas A y B , la dimensión del subsistema A es l mientras que la de B es $L - l$, por consiguiente la entropía de von Neumann para el bloque A esta definida como:

$$S_A = -Tr_A \rho_A \log \rho_A, \quad (2.10)$$

donde $\rho_A = Tr_B \rho$ es la matriz densidad reducida del bloque A y $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ es la matriz densidad del estado puro de todo el sistema [13].

Ley de área

El estudio de la entropía de bloque mediante la teoría de campos -considerando condiciones de frontera, temperatura finita y sistemas no críticos- ha sido desarrollado por Calabrese y Cardy en [20], donde se mostró que para un sistema unidimensional en el punto crítico la entropía de bloque diverge logarítmicamente con el tamaño del bloque. Si el bloque tiene longitud l y el sistema es de tamaño L con condiciones de frontera abiertas entonces la entropía de bloque está expresada por la siguiente relación

$$S_l = \frac{c}{6} \text{Log} \left[\frac{2L}{\pi a} \sin \left(\frac{\pi l}{L} \right) \right] + g + \frac{A}{2}, \quad (2.11)$$

donde c es la carga central de la teoría de campos y a el espaciamiento de la red, que en nuestro caso es igual a 1. A no es una constante universal y g es la entropía de frontera de Affleck y Ludwig. También se ha observado que S_l satura para valores lejanos de los puntos críticos. Este comportamiento es descrito por la ley de área

que establece que la entropía de bloque entre dos regiones depende de la extensión de sus fronteras [11]. En modelos unidimensionales esta extensión es independiente del tamaño de los bloques haciendo que la entropía de bloque sea constante para sistemas grandes.

Capítulo 3

Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad

El Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad fue desarrollado por S. R. White en 1992 y ha mostrado ser una herramienta muy eficaz en el estudio de sistemas interactuantes de baja dimensión. Este método ha sido aplicado a una gran variedad de problemas tales como cadenas de spines y ladders, modelos que contemplan desorden, sistemas fermiónicos y bosónicos entre otros, igualmente también ha sido probado para sistemas bidimensionales. El Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG) ha sido implementado en diversas áreas desde la física de la materia condensada pasando por la química cuántica y la física nuclear hasta la física estadística en equilibrio y fuera del equilibrio, además se ha investigado el cálculo de propiedades dinámicas y dependientes del tiempo para sistemas a temperatura finita [14].

3.1 Grupo de Renormalización

En el estudio de sistemas correlacionados unidimensionales se encuentra que el espacio de Hilbert crece exponencialmente a medida que crece la cadena mediante la técnica de diagonalización exacta, dificultando el estudio de cierta clase de modelos. El método de grupo de renormalización propuesto por Wilson [15] para el modelo de Kondo da una primera solución al crecimiento del espacio de Hilbert. Este método busca del truncamiento de espacio de Hilbert reduciendo sus grados de libertad mediante transformaciones sucesivas del grupo de renormalización, así se obtiene un Hamiltoniano que mantiene la física esencial del sistema en estudio.

El método inicia tomando un bloque, usualmente un sitio de la red, el cual está caracterizado por su Hamiltoniano y los operadores que representan las interacciones que existen en el sistema. El Hamiltoniano de dos bloques (dos sitios) es calculado y diagonalizado para obtener sus respectivos valores y vectores propios escogiendo solo

los m vectores propios u^α , se considera que la descripción del sistema es adecuada si se mantienen los estados. El nuevo Hamiltoniano es calculado con ayuda de los m vectores propios escogidos truncando el espacio de Hilbert mediante un cambio de base de la forma

$$H_{new} = OHO^\dagger \quad (3.1)$$

donde O es una matriz $m \times l$ con l la dimensión del Hamiltoniano y m los estados propios anteriormente seleccionados. Esta transformación también se aplica sobre los operadores presentes en el sistema. Entonces este bloque de dos sitios es reemplazado por un nuevo bloque y el proceso continúa creciendo la cadena en cada interacción repitiendo la metodología anterior hasta alcanzar el tamaño deseado del sistema [16]. El truncamiento que se realiza al sistema tiene como ventaja que el tamaño del espacio de Hilbert de la cadena deseada es menor respecto al método de diagonalización exacta y así será mucho más fácil su manejo. La forma en que se hace el crecimiento de la cadena se observa en la siguiente figura

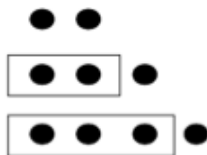


Figura 3.1 Crecimiento de la cadena para el método de grupo de renormalización. Extraído de [18])

Este método se aplicó a otros modelos unidimensionales tales como el modelo de Heisenberg o el de Hubbard cuyos resultados fueron bastante pobres y sin alcanzar la confiabilidad que ofrecían otras técnicas computacionales tales como el método de Monte Carlo [17]. White en [16] propone que en vez de quedarse con los estados de más baja energía en el momento del truncamiento es mejor quedarse con los estados de mayor peso estadístico en el sistema describiendo una función de onda, lo cual es la base de su método llamado Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG).

3.2 DMRG

La idea básica del método DMRG consiste en partir de pequeños sistemas (*e.g* con N sitios) e incrementar su tamaño gradualmente de la forma $N + 2, N + 4, \dots$ hasta lograr la longitud deseada. La cadena de N sitios conforma el superbloque y se denomina universo el cual se divide en dos partes: sistema y ambiente (ver figura 3.2).

El Hamiltoniano es construido en el universo y se obtiene su estado base $|\psi_0\rangle$, el cual posee componentes en el sistema y en el ambiente. Debido a que se necesita obtener los estados más relevantes del sistema, o en otras palabras los estados del sistema que mayor peso tienen en $|\psi_0\rangle$, el ambiente es considerado como un baño estadístico y la matriz densidad es utilizada para obtener la información deseada sobre el sistema. Con esto se mantienen los estados propios de la matriz densidad [14].

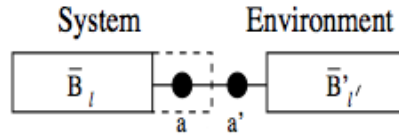


Figura 3.2 Esquema del superbloque para la configuración del algoritmo DMRG. Extraído de [14])

Sea $|i\rangle$ el estado del bloque del sistema y $|j\rangle$ el estado del resto de la red. Si ψ es el estado de toda la red

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle \quad (3.2)$$

La matriz densidad reducida para el bloque es:

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{i'j}. \quad (3.3)$$

Si A es un operador que actúa sobre el bloque, entonces:

$$\langle A \rangle = \sum_{ii'} A_{ii'} \rho_{ii'} = \text{Tr}(\rho A). \quad (3.4)$$

Sea $|v_\alpha\rangle$ y w_α los vectores y valores propios de ρ , respectivamente. Entonces se tiene que $w_\alpha \geq 0$ y $\sum_\alpha w_\alpha = 1$. Los valores w_α representan las amplitudes de probabilidad de los estados $|v_\alpha\rangle$ teniendo así:

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha w_\alpha \langle v_\alpha | A | v_\alpha \rangle, \quad (3.5)$$

esta relación muestra que para un particular α , $w_\alpha \approx 0$ y por tanto se puede descartar el estado $|v_\alpha\rangle$ para cualquier A . Así la matriz de densidad nos indica los estados con valores propios más representativos sin estar incurriendo en errores.

Se encuentra mediante métodos variacionales que el error que se introduce en la escogencia de tan solo algunos estados es de orden

$$\varepsilon_\rho = 1 - \sum_\alpha^m w_\alpha$$

donde m representa el último estado que se va a escoger.

Este algoritmo se puede trabajar en dos configuraciones, un método finito en el que el tamaño de la cadena permanece fijo y un método infinito en el que el tamaño de la cadena aumenta de a dos sitios en cada paso.

3.2.1 Algoritmo infinito

En cada paso se incrementa la longitud de cada bloque en un sitio resultando que la longitud de la cadena o superbloque se incrementa en 2 sitios, la descripción general del algoritmo se encuentra descrita en [16, 17] la cual se muestra a continuación:

1. Se inicia con 4 bloques. Se montan las matrices que representan el Hamiltoniano del bloque y otros operadores.
2. Se arma la matriz Hamiltoniana para el superbloque.
3. Usando el método de Davidson o Lanczos, se diagonaliza el Hamiltoniano para encontrar los estados blanco $|\psi\rangle$ que suele ser el estado base. Los valores esperados pueden ser medidos en este punto.
4. Se arma la matriz de densidad para el sistema.
5. Se diagonaliza ρ para encontrar los valores propios w_α y los vectores propios u^α . Se mantiene solo los m valores propios más grandes con sus respectivos vectores propios.
6. Se hace la representación matricial de los demás operadores para el sistema de dos bloques.
7. Se forma un nuevo primer bloque cambiando la base a los u^α y truncando a m estados usando $H^1 = OH^{12}O^\dagger$.
8. Se reemplaza el bloque 1 viejo por el bloque 1 nuevo.
9. Se reemplazan el bloque viejo 4 con la reflexión del nuevo bloque 1.
10. Se vuelve al paso 2.

Un esquema del anterior algoritmo se muestra en la figura 3.3

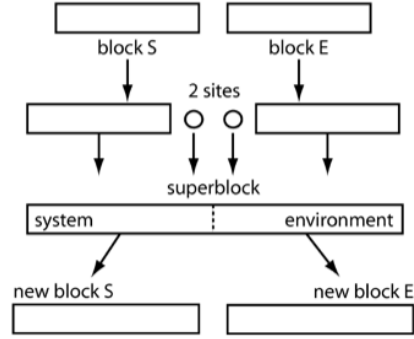


Figura 3.3 Esquema algoritmo infinito para el método DMRG. Extraído de [19]).

3.2.2 Algoritmo Finito

En muchas ocasiones el resultado obtenido con el algoritmo infinito no es satisfactorio y por tanto es necesario realizar un ajuste mediante la reducción del error numérico. Esto se logra gracias al algoritmo finito el cual realiza un proceso de termalización permitiendo una mejor representación de los bloques del universo. El algoritmo finito detiene el algoritmo infinito para un tamaño predeterminado L del superbloque, el cual se va a mantener fijo. En el siguiente paso el algoritmo finito es aplicado pero en vez de que los dos bloques crezcan simultáneamente, el crecimiento de un bloque está acompañado de la reducción del otro. Por ejemplo si el bloque del sistema se encuentra en crecimiento a costa del bloque ambiente, este último cuando alcance un tamaño mínimo el proceso de crecimiento se intercambia y el ambiente comienza a crecer a costa del sistema. Esto se realiza la cantidad de veces que sean necesarias hasta que el error numérico sea aceptable y el bloque sistema tenga el tamaño deseado. Usualmente, se corre el algoritmo infinito para una cantidad M_0 de estados y se incrementan a medida que se realizan los barridos en el algoritmo finito hasta alcanzar una cantidad M_{final} de estados tales que $M_{final} \gg M_0$ [19]. La descripción general del algoritmo se encuentra reseñada en [16, 17], la cual se muestra a continuación:

1. Utilizando el algoritmo infinito para $L/2 - 1$ pasos para construir una red de tamaño L .
2. Sea $l = L/2$. Se usa B_l como bloque 1 y la reflexión de B_{L-l-2} como bloque 4.
3. Seguir los pasos del 2 al 8 del algoritmo infinito.
4. Se guarda el nuevo bloque 1 como B_{l+1} , reemplazando el bloque viejo B_{l+1} .
5. Reemplazar el bloque 4 con la reflexión de B_{L-l-2} , obteniendo la primera parte de esta iteración.
6. Si $l \leq L - 3$, se coloca $l = l + 1$ y volvemos al paso 3.

7. Teniendo los cuatro bloques iniciales, los primeros tres que consiste en un solo sitio y el cuarto consiste en la reflexión de B_{L-3} de la iteración anterior. Se hace $l = 1$.
8. Se siguen los pasos del 2 al 8 del algoritmo infinito.
9. Se guarda el nuevo bloque 1 como B_{l+1} , reemplazando el viejo bloque B_{l+1} .
10. Se reemplaza el bloque 4 con la reflexión de B_{L-l-2} obtenido de la iteración anterior si $l \leq L/2 - 1$ o de la primera mitad de esta iteración si $l > L/2 - 1$.
11. Si $l < L - 3$ se hace $l = l + 1$ y se vuelve al paso 8. Si $l = L - 3$ comenzamos una nueva iteración partiendo del paso 7. (Se para después de 2 o 3 iteraciones).

Un esquema del anterior algoritmo se muestra en la figura 3.4

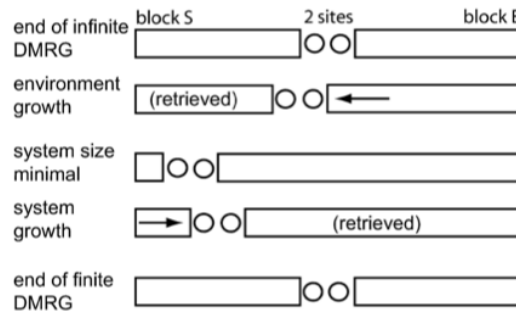


Figura 3.4 Esquema algoritmo infinito para el método DMRG. Extraído de [19]).

Capítulo 4

Resultados y Discusión

En este capítulo presentamos los resultados del comportamiento de la entropía de von Neumann para un bloque de l sitios, en función del tamaño del sistema para el modelo de Bose-Hubbard con condiciones de frontera abiertas. Para ello nosotros usamos el método DMRG considerando densidades enteras y semienteras en la cadena bosónica. Asimismo, se considera como unidad de energía el parámetro de interacción Coulombiana en cada sitio $U = 1$ y el número de bosones fijo.

4.1 Sistema con Densidad Entera

A continuación presentamos los resultados obtenidos para densidades enteras en el modelo de Bose-Hubbard considerándose los casos $\rho = 1$ y $\rho = 2$. Para dichos sistemas no se tuvo en cuenta la interacción Coulombiana entre sitios vecinos.

Las cadenas se hicieron crecer hasta un tamaño final $L = 256$ sitios y se tomaron 200 estados en cada una de las 5 barridas realizadas por el método DMRG, obteniendo un error computacional entre 1×10^{-9} y 1×10^{-7} para el caso $\rho = 1$ y entre 1×10^{-16} y 1×10^{-7} para el caso $\rho = 2$. Para ambas densidades se observó que el error disminuye a medida que los bosones ganaban energía cinética.

4.1.1 Caso $\rho = 1$

Entropía de un sitio

En la figura 4.1 se muestra la entropía de von Neumann de un sitio o local en función del tamaño de la cadena, se observa que la entropía crece rápidamente para $l < 5$ hasta alcanzar un valor máximo a partir del cual permanece constante. El valor de saturación de la entropía local aumenta a medida que el parámetro t se incrementa. Esta medida de entrelazamiento no muestra ningún comportamiento particular del

sistema dentro del intervalo de valores de t trabajados.

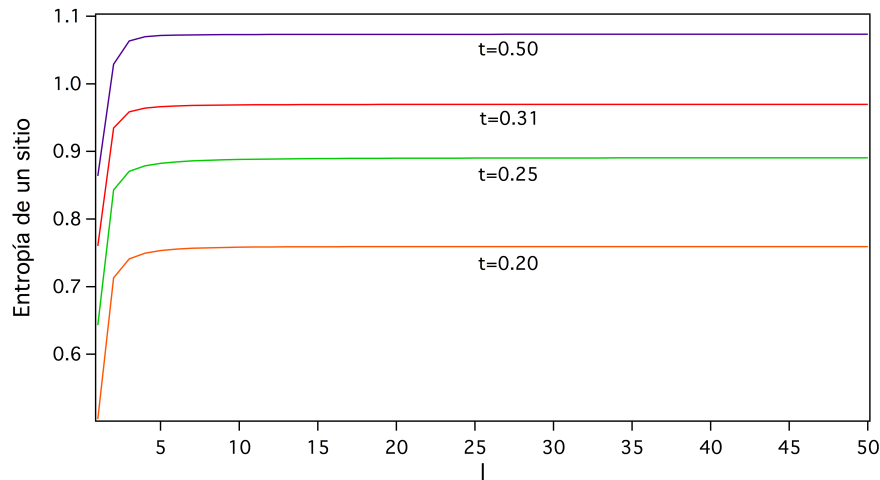


Figura 4.1 Entropía de un sitio para $\rho = 1$ y $V = 0$

Entropía de dos sitios

En la figura 4.2a se muestra la entropía de von Neumann de dos sitios en función del parámetro t , donde se observa que la entropía crece monótonamente a medida que t se incrementa. Para determinar si esta medida de entrelazamiento presenta algún comportamiento característico de nuestro sistema se procedió a realizar su primera derivada la cual se muestra en la figura 4.2b, donde se observa que la derivada decrece sin mostrar un comportamiento anómalo para algún valor de t crítico.

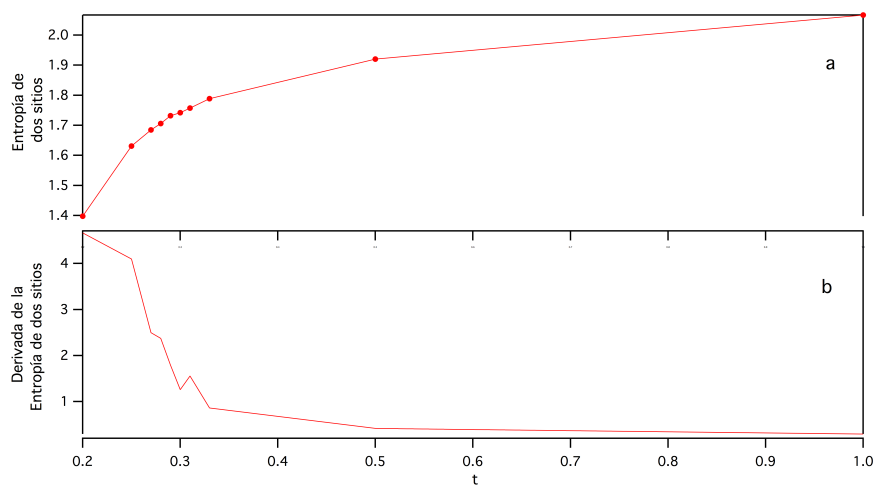


Figura 4.2 Entropía de dos sitios para $\rho = 1$ y $V = 0$.

Entropía de bloque

En la figura 4.3 se muestra la entropía de von Neumann de bloque en función de l . Inicialmente se observa que a medida que se incrementa el valor de t la entropía de bloque también se incrementa, esto debido a que el entrecruzamiento en el sistema también está creciendo. En segundo lugar se tiene que la entropía de bloque presenta un cambio en su comportamiento a partir de un t crítico, indicándonos que el sistema está realizando una transición de fase. Para $t = 0.20$ y 0.25 la entropía de bloque satura rápidamente, lo cual revela que el sistema posee una longitud de correlación finita y por ende se encuentra en la fase aislante de Mott, caracterizada por la presencia de un gap de energía (ver figura 4.4b). En esta fase el entrecruzamiento se desvanece en el límite cuando t tiende a 0, es decir, cuando el estado base está dado por el producto de las funciones de onda de cada sitio [13]. Para valores de $t = 0.31$ y 0.50 la entropía de bloque crece suavemente y muestra un comportamiento divergente, además en esta región el sistema no presenta ningún gasto de energía para la adición o remoción de bosones (ver figura 4.4a) lo cual caracteriza a la fase superfluida, allí la energía del estado base está minimizada ya que las funciones de onda de los N bosones se encuentran dispersas sobre toda la red [1].

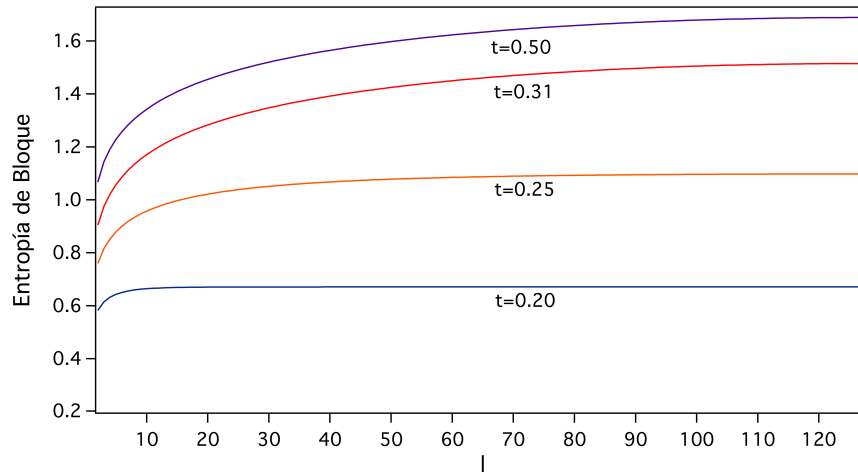


Figura 4.3 Entropía de bloque para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 1$.

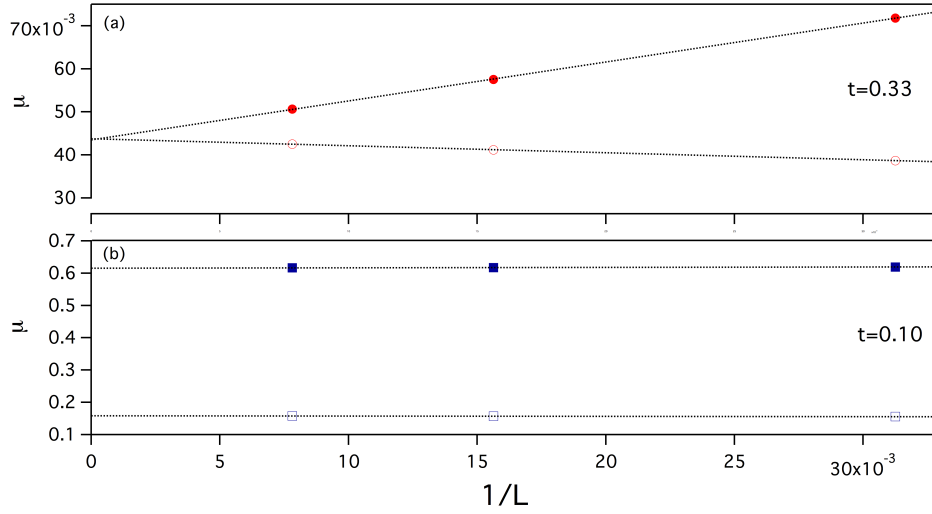


Figura 4.4 Gap de energía en función de $1/L$. (a) Fase superfluida con $t = 0.33$. (b) Fase aislante de Mott con $t = 0.10$.

La fase superfluida en el modelo de Bose-Hubbard unidimensional puede ser modelada como un líquido de Luttinger, la cual es una teoría conforme de campos. Así la divergencia de la entropía de bloque de von Neumann está descrita por la expresión (2.11) con $c = 1$. Definiendo la longitud conforme como

$$\lambda = Ln \left(\frac{2L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi l}{L} \right) \right), \quad (4.1)$$

se tiene que la ecuación (2.11) se transforma en una recta de la forma $S_L(\lambda) = c/6\lambda + g + A/2$. En la figura 4.5 se muestra la entropía de bloque en función de la longitud conforme observándose que para $t = 0.50$ y $t = 0.31$ la entropía presenta un comportamiento lineal señalando la fase superfluida, mientras que para $t = 0.25$ y $t = 0.2$ la entropía crece suavemente cada vez a una menor velocidad a medida que la longitud conforme se incrementa hasta alcanzar un valor de saturación, en especial para el valor de $t = 0.25$ la curva satura muy próxima a su tamaño final.

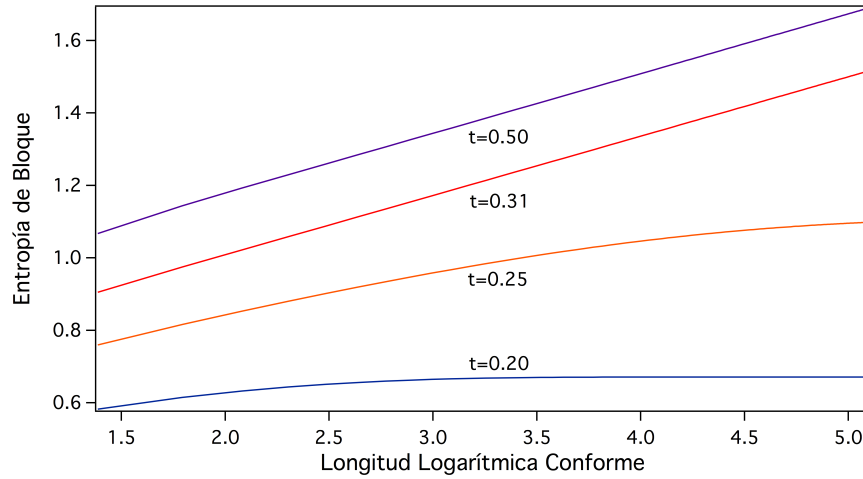


Figura 4.5 Entropía de bloque para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 1$ en función de la longitud logarítmica conforme.

En la figura 4.6 se muestra la entropía de bloque para $t = 0.30$, a partir de este valor de t se obtienen los mejores ajustes a la ecuación (2.11), siendo este el valor crítico en el cual está ocurriendo la transición de fase en el sistema.

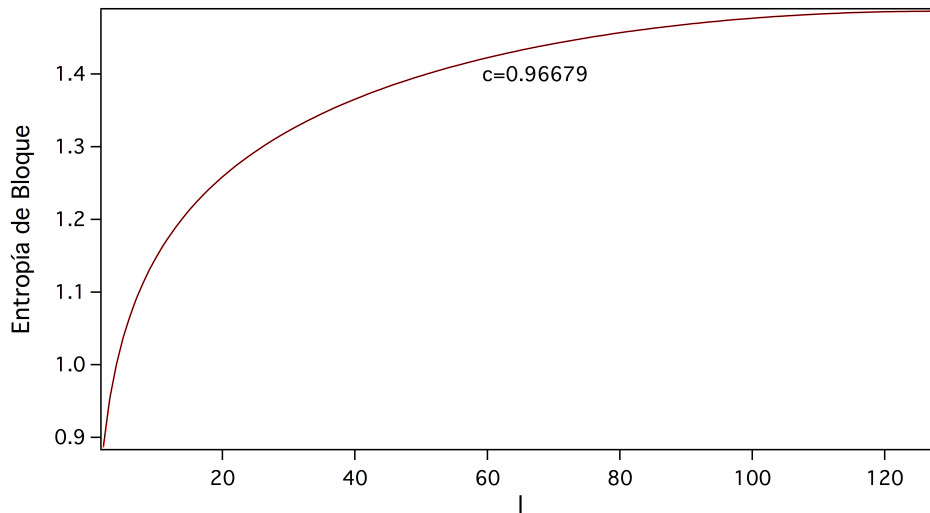


Figura 4.6 Entropía de Bloque para $L = 256$ con $t = 0.30$ junto con su respectivo ajuste de acuerdo a la ecuación (2.11).

El punto de transición de fase para el modelo de Bose-Hubbard unidimensional con $\rho = 1$ ha sido reportado anteriormente por Kuher, White y Monien en [9] dando un valor de $t_c = 0.297 \pm 0.01$, igualmente también ha sido reportado por A. Lauchli y Kollath en [13] reportando un valor $(U/t)_c = 3.3$ con $U = 1$ y recientemente ha

sido reportado por Ejima, Fehske y Gebhard en [25] obteniendo un valor crítico de $t_c = 0.305$. Así nuestro valor crítico de $t_c = 0.30$ difiere un 2.4%, 4.3% y un 1.6% respecto al valor reportado en [9], [13] y [25], respectivamente. Por ende para valores de t superiores (inferiores) a este valor crítico se tiene que el sistema se encuentra en la fase superfluida (aislante de Mott).

4.1.2 Caso $\rho = 2$

Entropía de un sitio

En la figura 4.7 se muestra la entropía de un sitio para $\rho = 2$. Observándose que ésta crece rápidamente para $l < 5$ hasta alcanzar un valor máximo a partir del cual permanece invariable, comportamiento que también fue observado en el caso anterior. Igualmente se observa que el valor de saturación aumenta a medida que el valor de t se incrementa, por tanto esta medida de entrecruzamiento no presenta ningún cambio en el comportamiento del sistema. Además cabe notar que el valor de saturación también aumenta a medida que la densidad de la cadena se incrementa, esto se observa claramente para el valor de $t = 0.2$ donde para $\rho = 1$ el valor de la entropía local es de 1.1 mientras que para $\rho = 2$ ésta presenta un valor de 1.5.

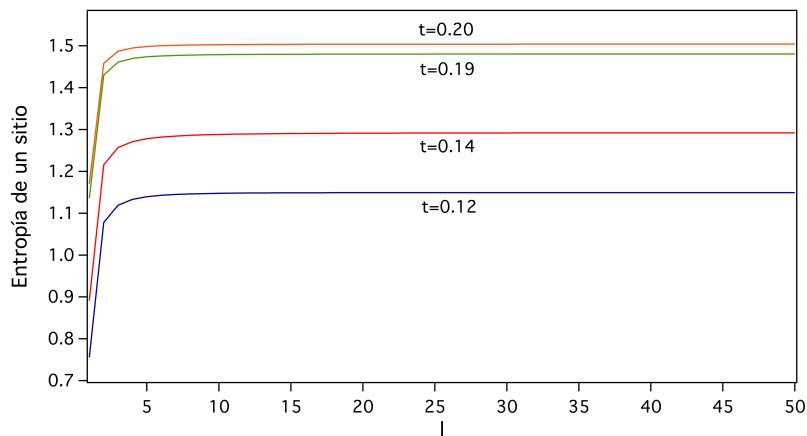


Figura 4.7 Entropía de un sitio para $\rho = 2$ y $V = 0$.

Entropía de dos sitios

En la figura 4.8a se muestra la entropía de dos sitios en función del parámetro t , donde se observa que la entropía crece monótonamente a medida que se incrementa t . Al igual que en el caso de $\rho = 1$, se procedió a realizar la primera derivada de la entropía la cual se muestra en la figura 4.8b, donde se observa que la derivada decrece sin mostrar un comportamiento anómalo para algún valor de t crítico.

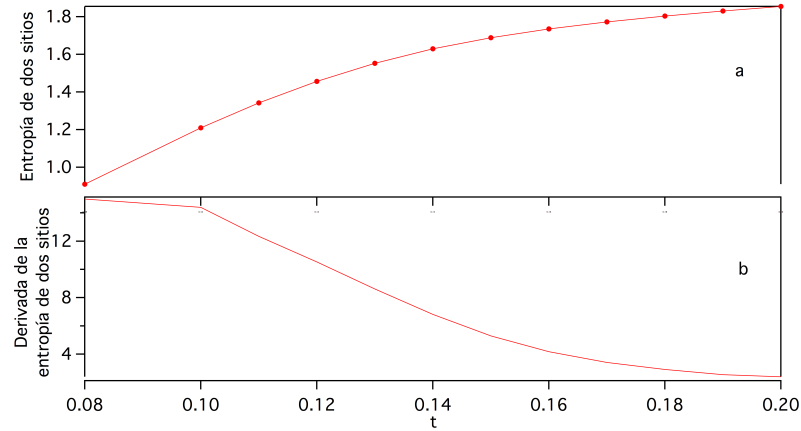


Figura 4.8 Entropía de dos sitios para $\rho = 2$ y $V = 0$.

Entropía de bloque

En la figura 4.9 se muestra la entropía de von Neumann de bloque en función de l . Tal y como se observó en el caso de $\rho = 1$, ésta medida de entrelazamiento crece a medida que se incrementa el valor de t . De igual manera se observa un cambio en el comportamiento de la entropía a partir de cierto valor crítico de t , es este caso se tiene que para valores de $t < 0.14$ la entropía crece rápidamente hasta un valor máximo a partir del cual permanece invariable, mostrando que el sistema tiene una longitud de correlación finita y por ende el sistema se encuentra en la fase aislante de Mott. Mientras para valores de $t > 0.19$ la entropía de bloque muestra un comportamiento divergente el cual puede ser descrita por la ley de área expresada en la formula (2.11). Para observar más claramente este cambio en el comportamiento se procedió a graficar la entropía de bloque en función de la longitud conforme (ver figura 4.10), donde para los valores de $t = 0.20$ y $t = 0.19$ presentan un comportamiento lineal característico de la fase superfluida, mientras que para los valores de $t = 0.14$ y $t = 0.12$ se observa un crecimiento suave y con menor velocidad a medida de que la longitud conforme aumenta hasta alcanzar un valor de saturación.

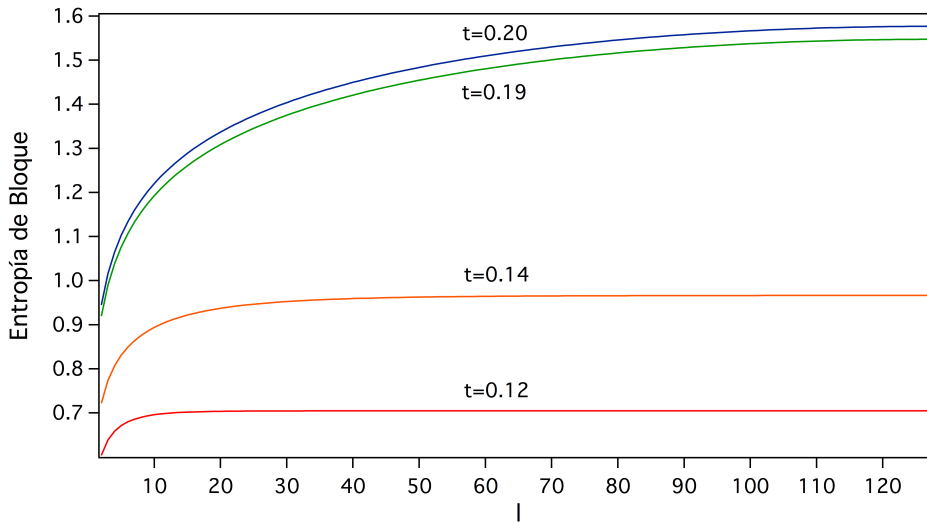


Figura 4.9 Entropía de bloque para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 2$.

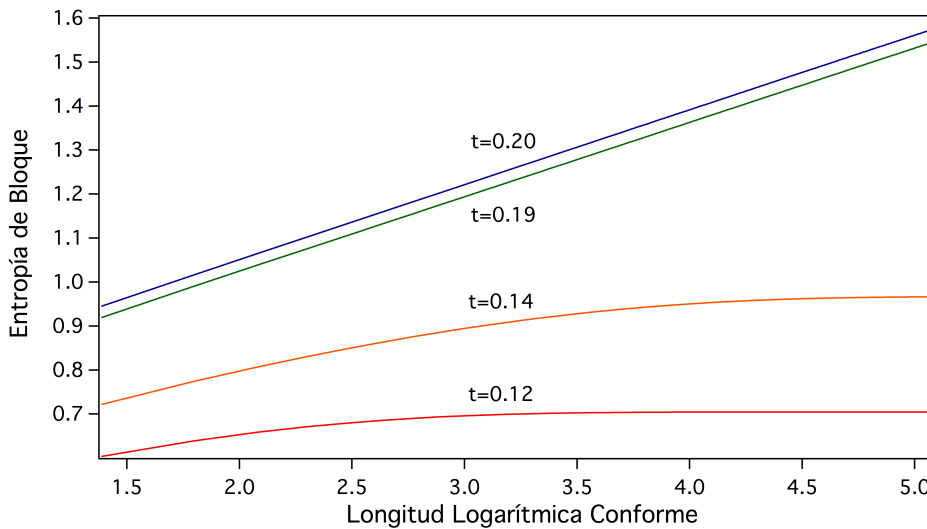


Figura 4.10 Entropía de bloque en función de la Longitud Logarítmica Conforme para $L = 256$ sitios, $V = 0$ y $\rho = 2$.

En la figura 4.11 se muestra la entropía de bloque para el valor de $t = 0.18$ junto a su respectivo ajuste obtenido mediante la expresión (2.11) mostrando un valor de la carga central de $c = 0.92259$. Observándose que para los valores de t superiores al valor crítico de $t_c = 0.18$ se tienen los mejores ajustes de la carga central y por consiguiente el sistema se encuentra en la fase superfluida.

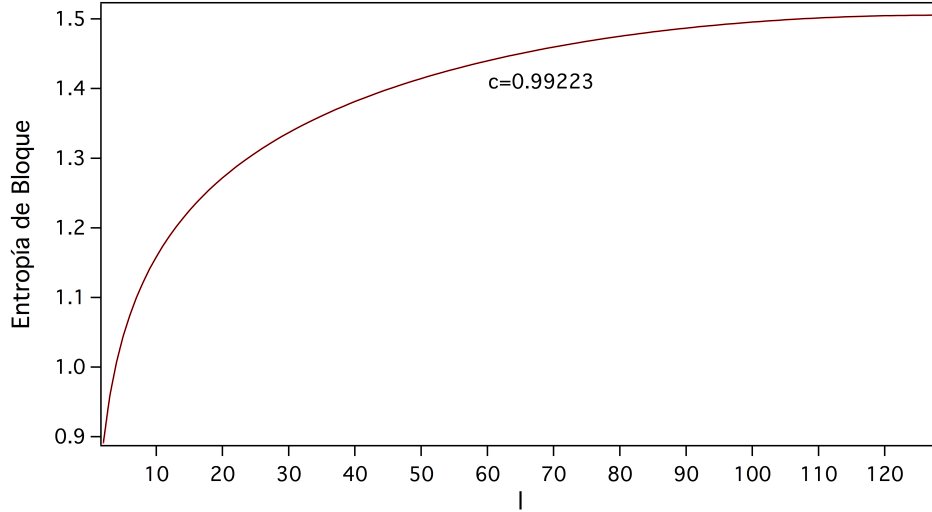


Figura 4.11 Entropía de bloque para $L = 256$ con $t=0.18$ junto a su respectivo ajuste dado por la ecuación (2.11).

El punto de transición de fase para $\rho = 2$ ha sido recientemente reportado por Ejima *y colaboradores* en [25] dando un valor crítico de $t = 0.180$, el cual nosotros hemos igualado mediante la medida de entrelazamiento de entropía de bloque. Por consiguiente se tiene que para valores superiores (inferiores) a $t_c = 0.18$ el sistema bosónico se encuentra en la fase superfluida (aislante de Mott).

4.2 Densidades semi-enteras

A continuación se presentan los resultados para una cadena bosónica con densidad de $\rho = \frac{1}{2}$ con $L = 512$ sitios. Nosotros usamos el método DMRG obteniendo un error computacional entre 1×10^{-9} y 1×10^{-13} donde a medida que se incrementa el valor de t el error computacional disminuye. Para este caso se consideró interacción Coulombiana entre sitios vecinos manteniendo constante el valor del parámetro V del Hamiltoniano (1.26) en $V = 0.4$.

Entropía de un sitio

En la figura 4.12 se muestra la entropía de un sitio en función de l . Inicialmente se observa que ésta presenta un cambio en su comportamiento a medida que el parámetro t se incrementa, teniendo así que para valores de $t < 0.1$ la entropía crece suavemente hasta alcanzar un valor máximo cuando la cadena ha alcanzado su tamaño final, asimismo cabe mencionar que la diferencia existente entre dos curvas consecutivas se va haciendo cada vez menor a medida que la cadena aumenta de tamaño, ya que

para todos los valores de $t < 0.1$ la entropía de un sitio para cuando $l = 256$ tiende a alcanzar el mismo valor. Para valores superiores a $t = 0.14$ se observa que la entropía local crece rápidamente para $l < 50$ y alcanza un valor máximo a partir del cual permanece constante. Debido a este cambio de comportamiento de la entropía local podemos decir está medida de entropía nos está brindando información acerca de la transición de fase que esta sufriendo el sistema bosónico.

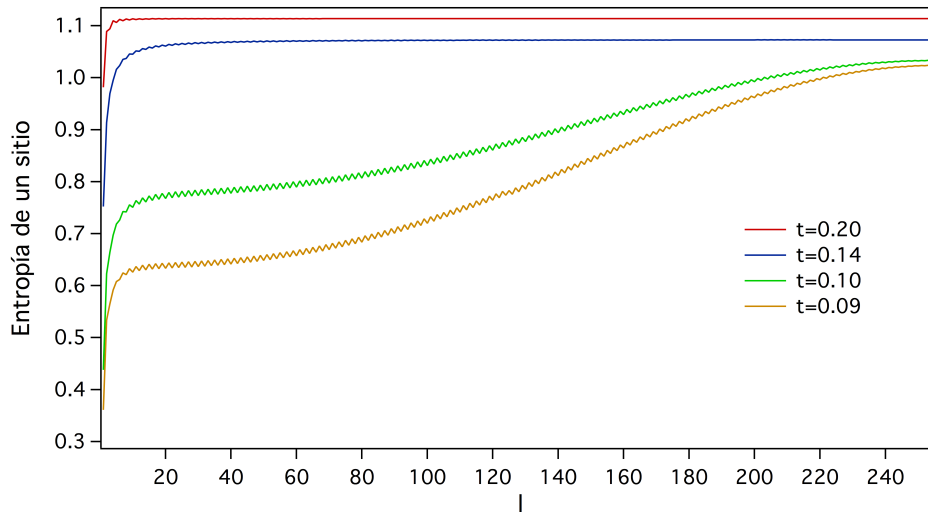


Figura 4.12 Entropía de un sitio para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$.

En la figura 4.13 se muestra la región en donde se está presentando la transición de fase vista desde la entropía local. Las curvas comprendidas entre $t = 0.122$ y $t = 0.13$ muestran un crecimiento monótono pero nunca llegan a saturarse como es el caso para $t = 0.14$, en especial la curva correspondiente a $t = 0.13$ se satura poco antes de que la cadena alcance su tamaño final, comportamiento que no ocurre con la curva $t = 0.127$ la cual siempre se encuentra creciendo. Por tanto podemos decir que el valor crítico en el cual se está presentando la transición de fase es $t = 0.127$.

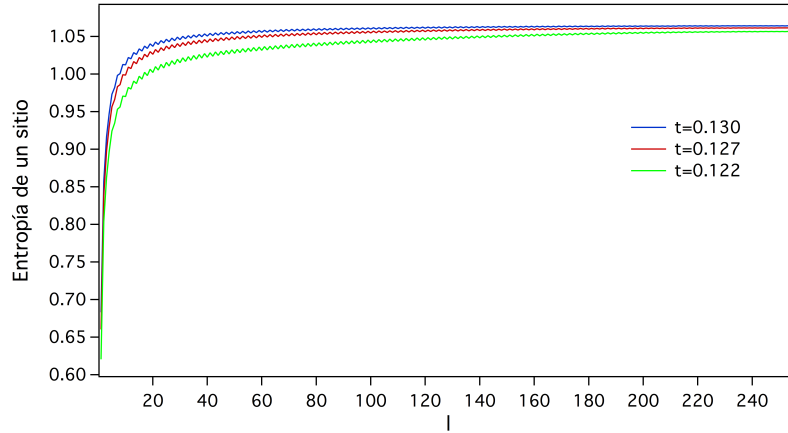


Figura 4.13 Entropía de un sitio para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$.

Para poder determinar la región que corresponde a la fase superfluida y cual a la fase aislante se procedió a observar el gap de energía en las diferentes zonas presentadas por la entropía local, lo cual se muestra en la figura 4.14. Allí se observa que para valores inferiores a $t = 0.127$ hay una presencia de un gap de energía necesaria para la remoción o adición de bosones al sistema (ver 4.14a) por tanto en ésta región la cadena se encuentra en la fase aislante Onda Densidad de Carga. Mientras que para valores de $t > 0.127$ no hay presencia de gap de energía y por ende el sistema se ubica en la fase superfluida (ver 4.14b).

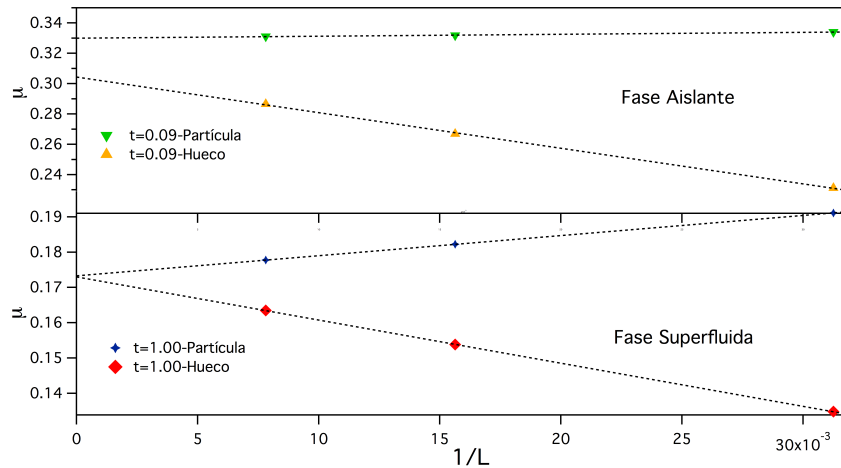


Figura 4.14 Entropía de un sitio para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$.

Entropía de dos sitios

En la figura 4.15a se muestra la entropía de dos sitios en función del parámetro t . Se observa que esta entropía presenta un comportamiento creciente monótono a me-

didada que el valor del parámetro t se incrementa. Para determinar si esta medida de entropía muestra algún comportamiento particular se realizó su primera derivada la cual se muestra en la figura 4.15b, donde se observa una curva decreciente monótona. Por tanto la entropía de dos sitios, ni su primera derivada nos dan información alguna acerca de la transición de fase que está sufriendo el sistema.

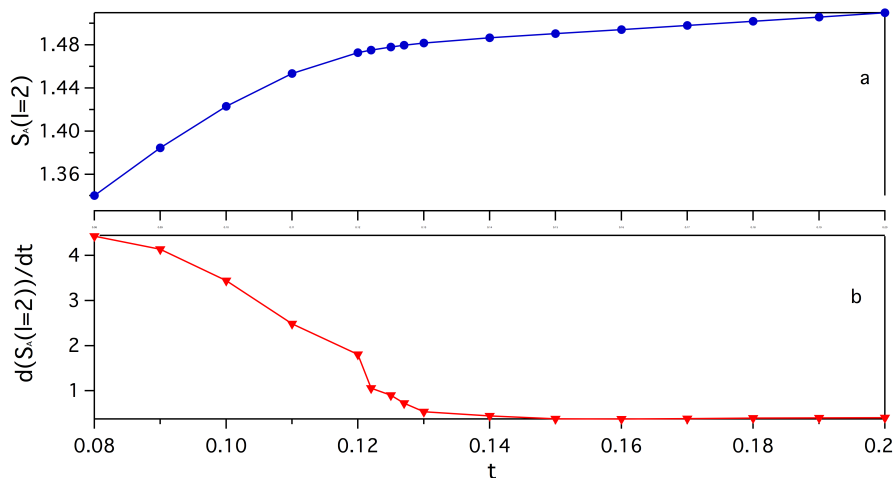


Figura 4.15 Entropía dos sitios para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$.

Entropía de Bloque

En la figura 4.16 se muestra la entropía de von Neumann de bloque en función de l . Inicialmente cabe mencionar que la entropía de bloque aumenta a medida que el valor de t se incrementa, esto debido a que el entrecruzamiento del sistema se encuentra en aumento, comportamiento igualmente observado para los casos en que la densidad es entera. En segundo lugar ésta medida de entropía presenta un cambio en su comportamiento indicando así la existencia de un valor crítico de t en el cual sucede una transición de fase. Para valores de $t < 0.10$ la entropía de bloque crece suavemente hasta un valor máximo cuando la cadena alcanza la longitud final deseada, en esta región se tiene que el sistema presenta un gap de energía como se muestra 4.14a y por consiguiente nos encontramos en la fase aislante Onda Densidad de Carga. Mientras que para valores de $t > 0.14$ la entropía presenta un comportamiento divergente y el sistema no posee un gap de energía (ver figura 4.14b) por tanto para estos valores de t el sistema está en la fase superfluida. Este cambio de comportamiento también se puede observar graficando la entropía de bloque en función de la longitud conforme, como se muestra en la figura 4.17, para la cual se tomaron únicamente los valores pares de l . Allí se observa que para valores de $t > 0.14$ la entropía de bloque muestra un comportamiento lineal señalando que el sistema se encuentra en la fase superfluida, mientras que para valores de $t < 0.10$ la entropía de bloque crece suavemente. Por consiguiente la entropía de bloque nos da información de la transición de fase de la

fase Onda Densidad de Carga a la fase Superfluida.

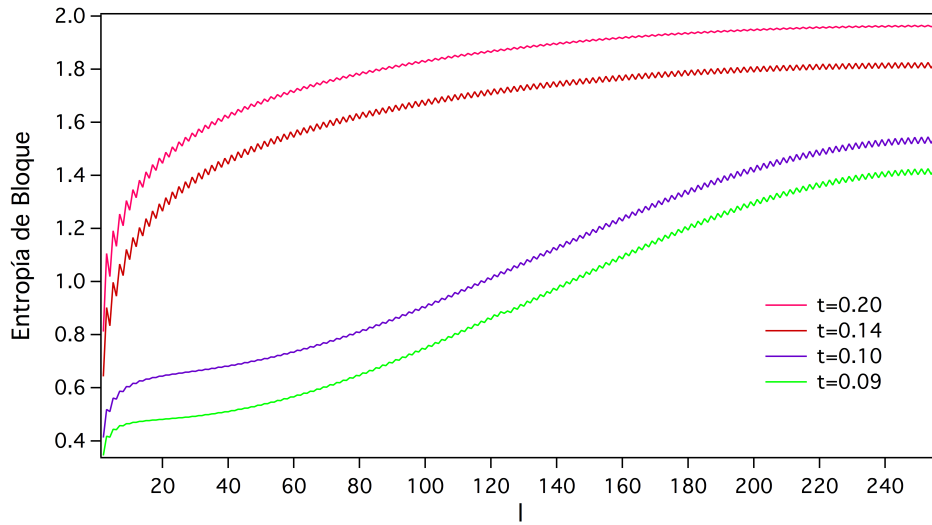


Figura 4.16 Entropía de bloque para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$.

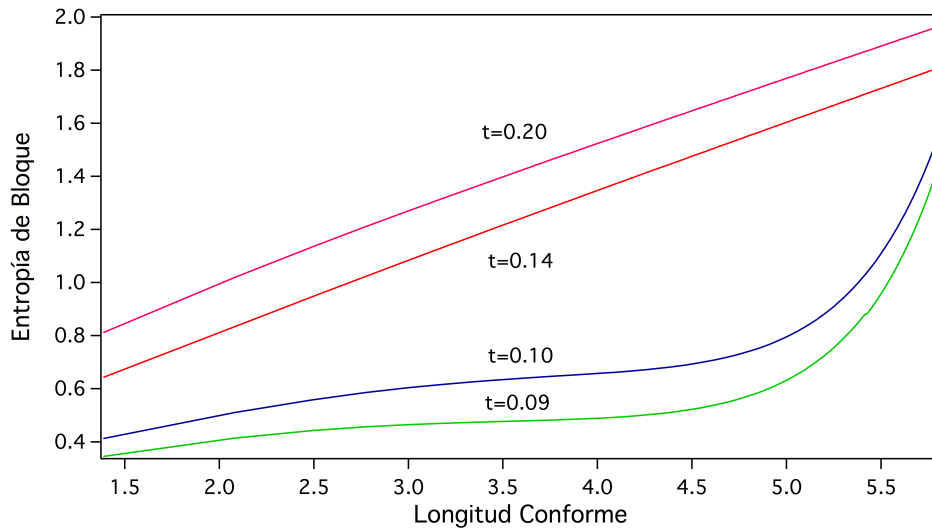


Figura 4.17 Entropía de bloque en función de la longitud conforme para $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$.

Concentrándonos en la región donde ocurre la transición fase, ver figura 4.18, se observa que para $t < 0.12$ la entropía de bloque continua presentando un comportamiento creciente similar al mostrado por las curvas correspondientes a $t < 0.1$, por tanto podemos decir que el sistema aún se encuentra en la fase aislante. Pero en la región comprendida entre $0.12 < t < 0.13$ las curvas presentan un comportamiento

monótonamente creciente, que al ser comparadas con la ecuación (2.11) se observó que para valores superiores a $t = 0.127$ se obtuvieron los mejores ajustes de la carga central (ver figura 4.19). Así el punto crítico en el cual se presenta la transición de fase es $t_c = 0.127$, el cual está en concordancia con el valor hallado mediante la entropía de un sitio.

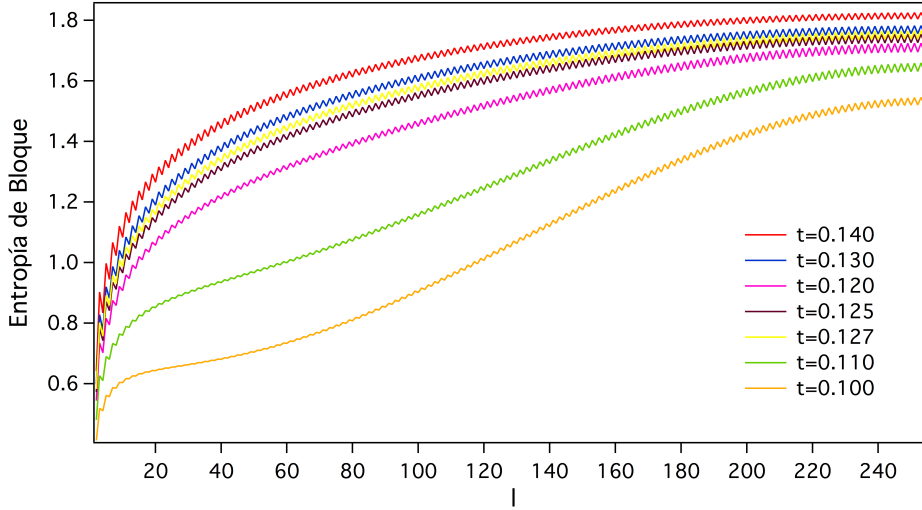


Figura 4.18 Zoom $\rho = 0.5$ y $V = 0.4$.

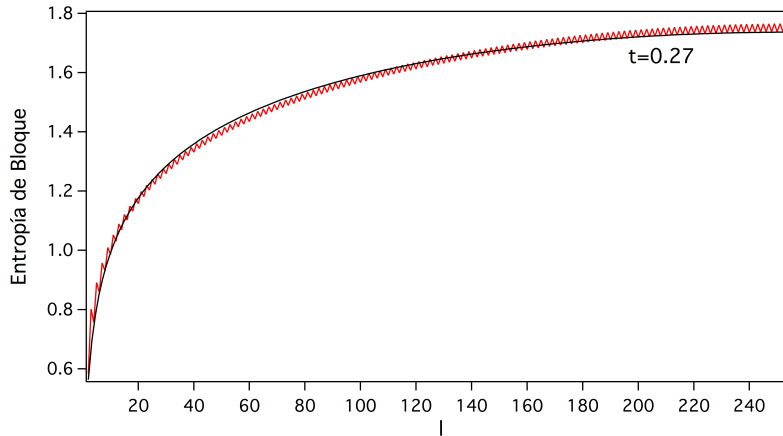


Figura 4.19 Punto de transición.

La transición para un sistema bosónico con densidad de $\rho = 1/2$ ha sido estudiado anteriormente por Kuhner, White y Monien en [9] reportando un valor crítico de $t_c = 0.125 \pm 0.003$. Nuestro valor hallado mediante las medidas de entrelazamiento de entropía de un sitio y de bloque difiere un 1.6% respecto al valor reportado por

Kuhner y colaboradores.

Por último se observa que la entropía de von Neumann de bloque y de un sitio presentan un comportamiento oscilatorio el cual se va atenuando a medida que se incrementa el valor de t , o en otras palabras, a medida que los bosones van incrementando su energía cinética para poder saltar más fácilmente a los sitios vecinos. Este comportamiento también ha sido observado en la entropía de bloque para el modelo de Heisenberg con fronteras abiertas por T. Wang, X. Wnag y Z. Sun en [21].

Capítulo 5

Conclusiones

Se estudió el modelo de Bose-Hubbard en una cadena unidimensional mediante el método DMRG para densidades con valor entero y semientero. Para todos los casos el valor de la interacción Coulombiana en un sitio U se mantuvo constante e igual a 1 y se realizó un barrido sobre el parámetro t , el cual representa la energía cinética de los bosones. Asimismo, para todos los casos se mantuvo el número de bosones constante y el modelo fue analizado con condiciones de frontera abiertas.

Para los casos con densidades de $\rho = 1$ y $\rho = 2$ no se consideró interacción Coulombiana entre sitios vecinos, observándose que la entropía de von Neumann de bloque muestra un cambio en su comportamiento a medida que el parámetro t se incrementa, por consiguiente se tiene que el sistema presenta una transición de fase de la fase de aislante de Mott a una fase superfluida. Para el sistema con $\rho = 1$ se reprodujo los resultados de la entropía de von Neumann de bloque reportados por Lauchli y Kollath en [13], asimismo se observaron los gap de energía reportados por Kuhner, White y Monien en [9] y además se calculó la entropía de von Neumann de uno y dos sitios, encontrándose que la entropía de von Neumann de bloque es la única medida de entrelazamiento -de las tres estudiadas- que da cuenta de la transición de fase, encontrando el punto crítico en $t_c = 0.30$ con una diferencia del 2.4%, 4.3% y 1.6% con respecto a los valores reportados por Kuhner y colaboradores [9], Lauchli y colaboradores [13] y Ejima y colaboradores [25], respectivamente. Para el caso de $\rho = 2$ se observó nuevamente que la única medida de entropía que daba cuenta de la transición de fase era la entropía de von Neumann de bloque, la cual mostró que el punto crítico es $t_c = 0.18$, igualando al valor reportado por Ejima y colaboradores [25]. Para los sistemas con densidades enteras la entropía von Neumann de un sitio y de dos sitios no dan información de la transición de fase. Cabe mencionar que el cálculo del punto crítico para $\rho = 2$ mediante medidas de entrelazamiento no se había realizado con anterioridad y se encuentra sometido a publicación en la Revista Mexicana de Física.

Para el modelo de Bose-Hubbard con densidad igual a $\rho = 1/2$ se consideró interacción Coulombiana entre sitios vecinos, observándose nuevamente que la entropía

de von Neumann de bloque presenta un cambio en su comportamiento a medida que el parámetro t se incrementa, indicando una transición de fase de fase aislante Onda Densidad de Carga a una fase Superfluida y obteniéndose que el punto de transición se encuentra ubicado en $t_c = 0.127$, el cual difiere un 1.6% del valor reportado por Kuhnner y colaboradores en [9]. Por otro lado el estudio de la entropía de von Neumann de un sitio revela que ésta medida también presenta un cambio en su comportamiento a medida que t se incrementa, donde la fase aislante Onda Densidad de Carga esta descrita por un comportamiento creciente monótono, mientras que en la fase superfluida la entropía local se satura rápidamente; encontrándose que el punto crítico esta en $t_c = 0.127$, el cual está en concordancia con el hallado mediante la entropía de bloque. Por último el estudio de la entropía de von Neumann de dos sitios no da información de la transición de fase. La obtención del punto de transición de fase mediante el uso de las medidas entreveramiento de entropía de von Neumann no había sido obtenida anteriormente para sistemas con densidad semientera, donde la entropía de bloque no es la única medida que da a conocer información acerca del punto de transición, como lo ocurrido para sistemas con densidad entera, sino que además la entropía de un sitio también nos brinda esta información, este resultado se encuentra sometido a publicación.

Diferentes medidas de entreveramiento han sido implementadas en gran diversidad de sistemas cuánticos para la detección de los puntos críticos en los cuales se dan transiciones de fase, algunos ejemplos son el estudio de cadenas de Ising con interacción Dzyaloshinsky-Moriya mediante las medidas de Concurrencia en [22], el estudio del modelo de Kondo Neklace mediante la entropía de bloque en [23] y el estudio de la entropía de Shannon-Rényi en líquidos de Luttinger en [24]. Por consiguiente no hay un criterio único el cual establezca una medida específica de entreveramiento para encontrar las transiciones de fase cuánticas para algún modelo bajo estudio. Lo observado por nosotros muestra que la entropía de von Neumann de bloque puede ser una pista como medida útil y como indicador de los puntos de transición de fase, ya que está mostró los puntos críticos para los dos casos estudiados.

Como perspectiva se tiene el uso de las herramientas de entreveramiento para estudiar otros modelos bosónicos como lo es el modelo de Bose-Hubbard con interacción de tres cuerpos, este sistema ha sido estudiado por Zhou y colaboradores en [26] mediante el uso de las aproximaciones de campo medio y del método de funcional-integral.

Bibliografía

- [1] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hansch, I. Bloch; *Nature*. **415** (2002) 39.
- [2] M. Fhisher, P. Weichman, G. Grinstein, D. Fisher; *Phys. Rev. B*; **40**, (1989) 546.
- [3] M. Greiner, O. Mandel, T. Rom, A. Altmeyer, A. Widera, T.W. Hansch, I. Bloch; *Phys. B*. 329-333 (2003) 11.
- [4] T. D. Kühner and H. Monien, *Phys. Rev. B*. **58** (1998) 14741.
- [5] F. Gebhard, *The Mott Metal-Insulator Transition*, Springer (1997). Tracts in Modern Physics **137** (Springer, Berlin).
- [6] Subir Shachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press (2001) 193
- [7] Stephen Richard James Franz Clark., *Strongly correlated one-dimensional systems of cold atoms in optical lattices*, PhD thesis of the Mathematical and Physical Sciences Division at the University of Oxford (2007).
- [8] D. van Oosten, P. van der Straten, H. T. C. Stoof; *Phys. Rev. A*; **60** 053601
- [9] Till D. Kühner, Steven R. White and H. Monien, *Phys. Rev. B*. **61** (2000) 12475
- [10] F. Mintert, C. Viviescas, A. Buchleitner; *Entanglement and Decoherence: Foundations and Modern Trends*, Cap. 1; Ed. Springer Verlag Berlin Heidelberg
- [11] L. Amico, R. Fazio, V. Vedral; arXiv:quant-ph/0703044v1 (2007)
- [12] F. Mintert, A. Carvalho, M. Kus, A. Buchleitner; *Physical Reports*; 415 (2005) 207
- [13] A. Läuchli, C. Kollath; *J. Stat. Mech.* P05081 (2008).
- [14] K. Hallberg; arXiv:cond-mat/0303557v1 (2003).
- [15] Wilson, K.G., *Rev. Mod. Phys* **47**, 773-840 (1975).
- [16] S. R. White., *Phys. Rev. B*. **48**, 10345 (1993).

- [17] S. R. White; Phys. Rep.; 301, 187 (1998).
- [18] Legeza, J.Roder and B.A.Hess, Phys. Rev. B. **67**,125114(2003).
- [19] U. Schollwöck; Rev. Mod. Phy., **77** 259 (2005).
- [20] P. Calabrese and J. Cardy; J. Stat. Mech.: Theor. Exp., P06002 (2004).
- [21] T. Wang, X. Wang and Z. Sun; Physica A 383 (2007) 316-324.
- [22] C T González-H, R Franco and J Silva-Valencia; Eur. J. Phys. 31 (2010) 681-691.
- [23] J. J. Mendoza-Arenas, R. Franco, and J. Silva-Valencia; Phys. Rev. A 81 (2010) 062310.
- [24] J. Stéphan, G. Misguich and V. Pasquier; arXiv:1104.2544v1 (2011).
- [25] S. Ejima, H. Fehske and F. Gebhard; EPL 93 (2011) 30002.
- [26] K. Zhou, Z. Liang and Z. Zhang; Phys. Rev. A. 82 (2010) 013634.
- [27] R. Costa and M. Oliviera; arXiv:0812.4381v1 (2008)