

# Aproximación de Campo Medio para Bose-Hubbard

Novoa Gastaldi Alejandro Silvestre

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

*silvestre.novoa@ciencias.unam.mx*

Marzo - 2019

Considerando el Hamiltoniano de Bose-Hubbard que describe bosones sin espín que interactúan en una red de sitios.

$$\hat{H}_{BH} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i$$

Donde  $t_{ij}$  corresponde a un parámetro de transición,  $U$  al parámetro de interacción entre sitio, y  $\mu$  al potencial químico.

Bajo un enfoque de aproximación de campo medio, se considera el hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_i [-Zt(\psi^* \hat{b}_i + \psi \hat{b}_i^\dagger) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i + \mathcal{Z}t\psi^2],$$

donde  $Z$  es, y  $\psi$  es el parámetro de orden de superfluido. El parámetro de orden tiene que ser determinado minimizando la energía libre  $F = -\frac{1}{k_B T} \ln \text{Tr}[e^{-k_B T \hat{H}}]$ . Enfocándonos a  $T = 0K$ , se puede hacer el proceso

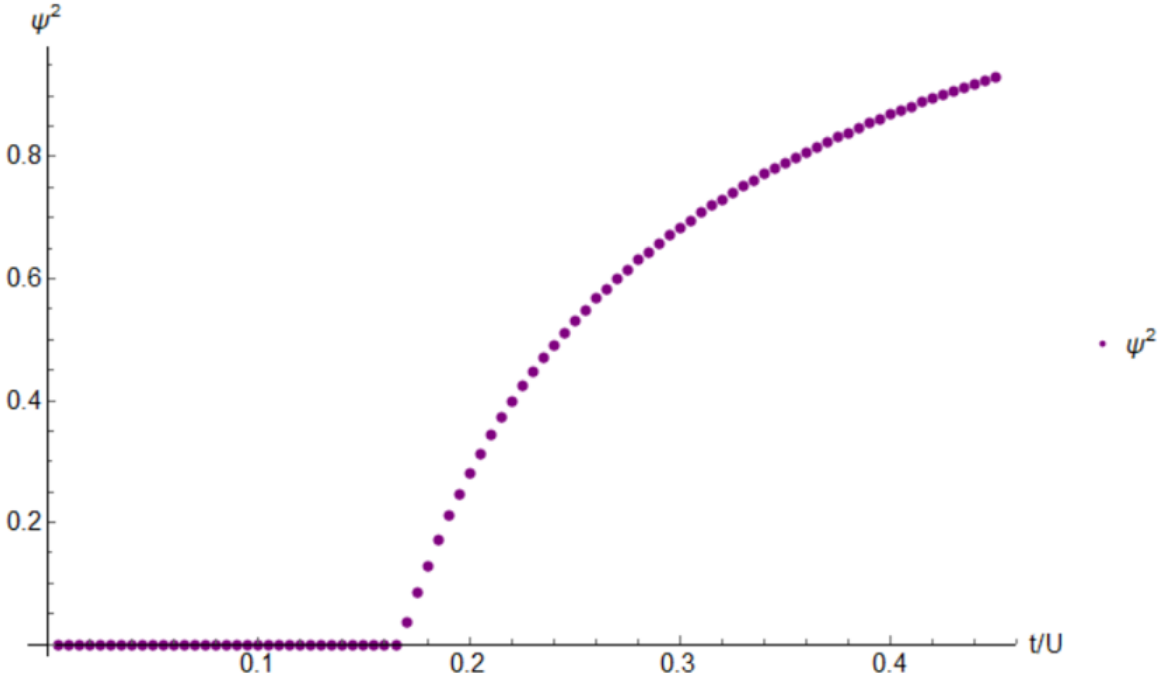


Figura 1: Diagrama de fase en 1D. Parámetro superfluidico al cuadrado respecto a  $t$ . La primera zona (a la izquierda) corresponde a la fase aislante de Mott, la segunda zona (a la derecha) corresponde a la fase superfluidica.

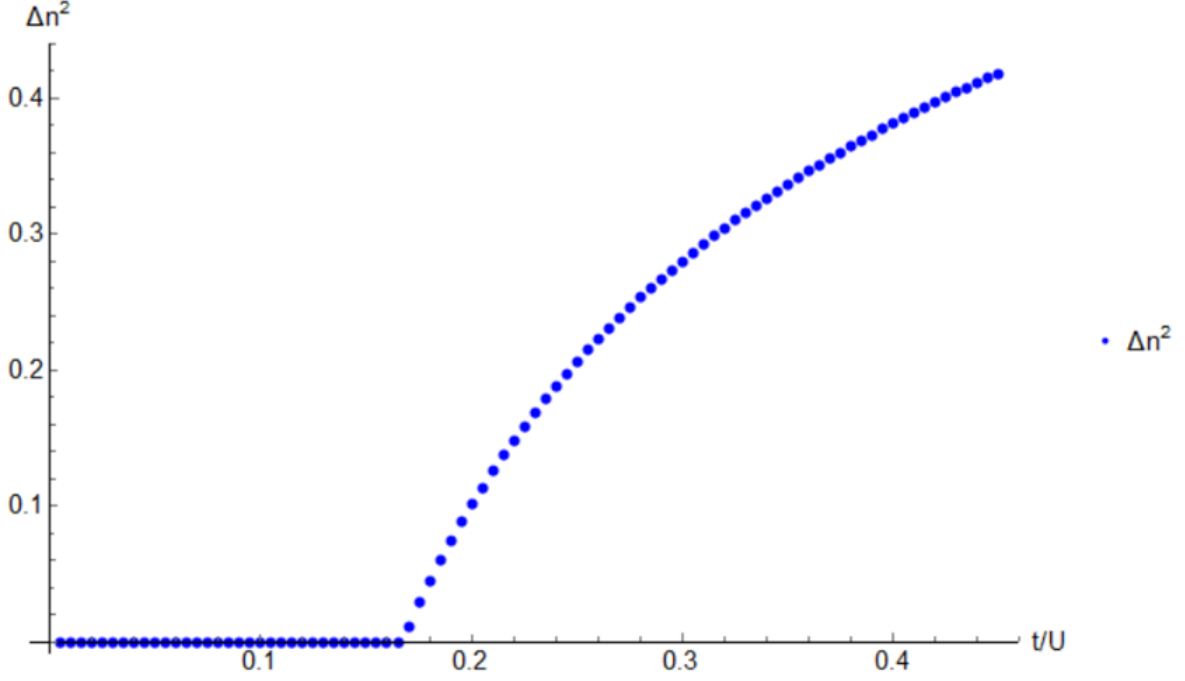


Figura 2: Diagrama de fase en 1D. Parámetro de fluctuaciones en el número de partículas respecto a  $t$ . La primera zona (a la izquierda) corresponde a la fase aislante de Mott, la segunda zona (a la derecha) corresponde a la fase superfluidica.

equivalente de minimizar la energía del estado base  $E_0 = \langle \varphi_0 | \hat{H} | \varphi_0 \rangle$ , con la condición autoconsistente  $\psi = \langle \varphi_0 | \hat{b} | \varphi_0 \rangle$ . De esta forma, para valores pequeños de  $t$ , se puede inclusive aplicar un método perturbativo  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , donde  $\hat{H}_0$  correspondería a los términos de la diagonal de  $\hat{H}$ , mientras  $\hat{V}$  a los términos no diagonales. Para el sitio  $k$  se le resta una partícula,

De forma computacional, ya podemos trabajar con el hamiltoniano  $\hat{H}$  para una base arbitraria, considerando los parámetros  $U = 1$ ,  $Z = 1$  y  $\mu = 0.5$ , entonces podemos comenzar a iterar con valores iniciales de  $\psi$  y  $t$ .

$$H = \begin{pmatrix} -zt\psi^2 & \sqrt{1}Zt\psi & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1}Zt\psi & (1)\mu - zt\psi^2 & \sqrt{2}Zt\psi & 0 & \vdots \\ 0 & \sqrt{2}Zt\psi & -\frac{U}{2}(2)(2-1) + (2)\mu - zt\psi^2 & \sqrt{3}Zt\psi & \vdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3}Zt\psi & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Con una matriz hamiltoniana definida, es posible hallar su estado base

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} \alpha^0 \\ \alpha^1 \\ \alpha^2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

, donde cada entrada del vector columna, corresponde al coeficiente respecto a cada estado de la base.

Con la condición autoconsistente para  $N$  el número total de sitios, determinamos a  $\psi_0 = \langle \varphi_0 | \hat{b} | \varphi_0 \rangle = \sum_{i=1}^{N-1} \sqrt{i} \alpha_i \alpha_{i+1}^*$ .

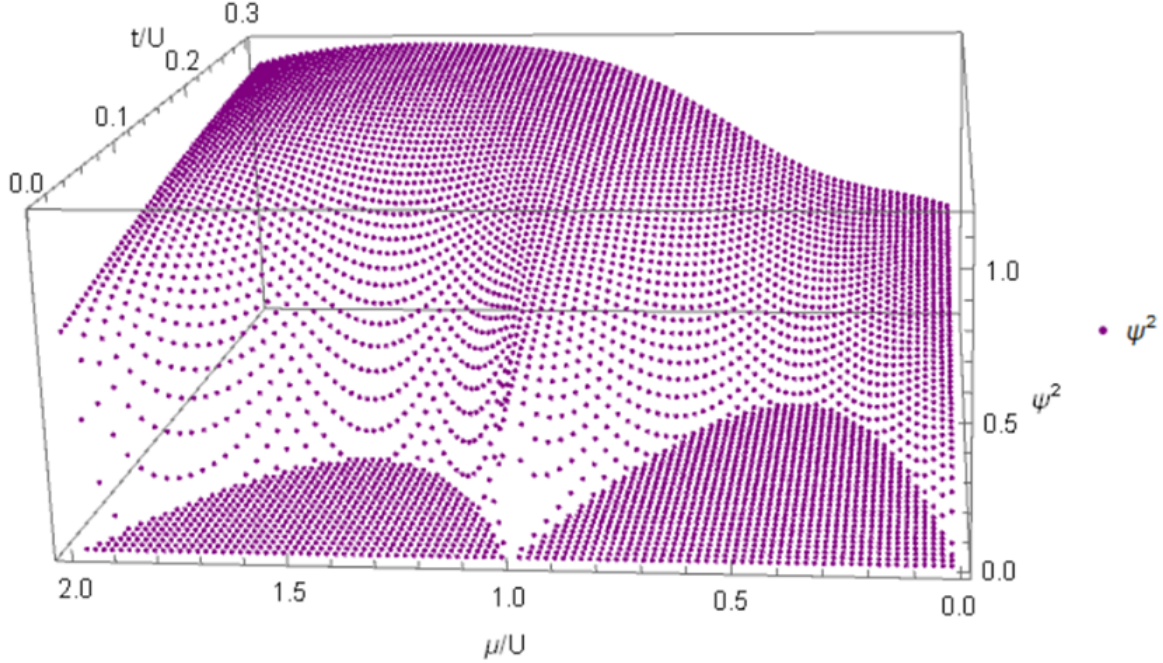


Figura 3: Diagrama de fase en 2D. Parámetro superfluidico al cuadrado respecto a  $t$  y  $\mu$ . Las zonas con valores muy cercanos a cero corresponden a la fase aislante de Mott, las otras zonas corresponden a la fase superfluidica. Para  $N = 4$  notamos dos zonas aislantes.

Así, definimos el error  $\varepsilon = |\psi - \psi_0|$ , tal que definimos a  $\psi = \psi_0$ , e iteramos repitiendo el proceso de construir el hamiltoniano, determinar su estado base y determinar  $\psi_0$ , hasta que se cumpla que  $\varepsilon < \text{ErrorMáximo}$ .

Así mismo, una vez terminado este proceso en la iteración  $k$ , tendremos un estado base  $\varphi_{0k}$  que corresponde de forma consistente a  $\psi_k$ . Ocupando ese último estado base iterado, calculamos las fluctuaciones en el número de partículas por el operador  $\Delta n^2 = \langle \varphi_0 | \hat{n}^2 | \varphi_0 \rangle - \langle \varphi_0 | \hat{n} | \varphi_0 \rangle^2 = \sum_{i=1}^{N-1} n_{i,j}^2 \alpha_i^2 - \left( \sum_{i=1}^{N-1} n_{i,j} \alpha_i \right)^2$ .

Para el diagrama de fase en 1D realizamos iteraciones variando el parámetro  $t$ . La transición de fase para el caso 1D se encontró en  $t = 0.17$  que se puede ver en las figuras 1 y 2.

Ahora bien, para construir el diagrama de fase en 2D realizamos más iteraciones variando además del parámetro  $t$ , el parámetro  $\mu$ . Esto nos permite notar que para  $N = 4$  existen dos zonas definidas por  $t$  y  $\mu$  que el sistema se comporta como aislante de Mott. Así mismo, para  $N = 3$  sólo hay una zona, mientras para  $N = 5$  hay tres zonas. Tal que estas transiciones de fase pueden ocurrir a partir de un sistema de 3 sitios, tal que se van agregando zonas de transición conforme crece el número de sitios del sistema. Esto sería de acuerdo con las posibles distribuciones de los bosones entre los números de sitios disponibles en un estado de equilibrio en el que justamente la fluctuación o transporte de bosones neto entre sitios es nulo.

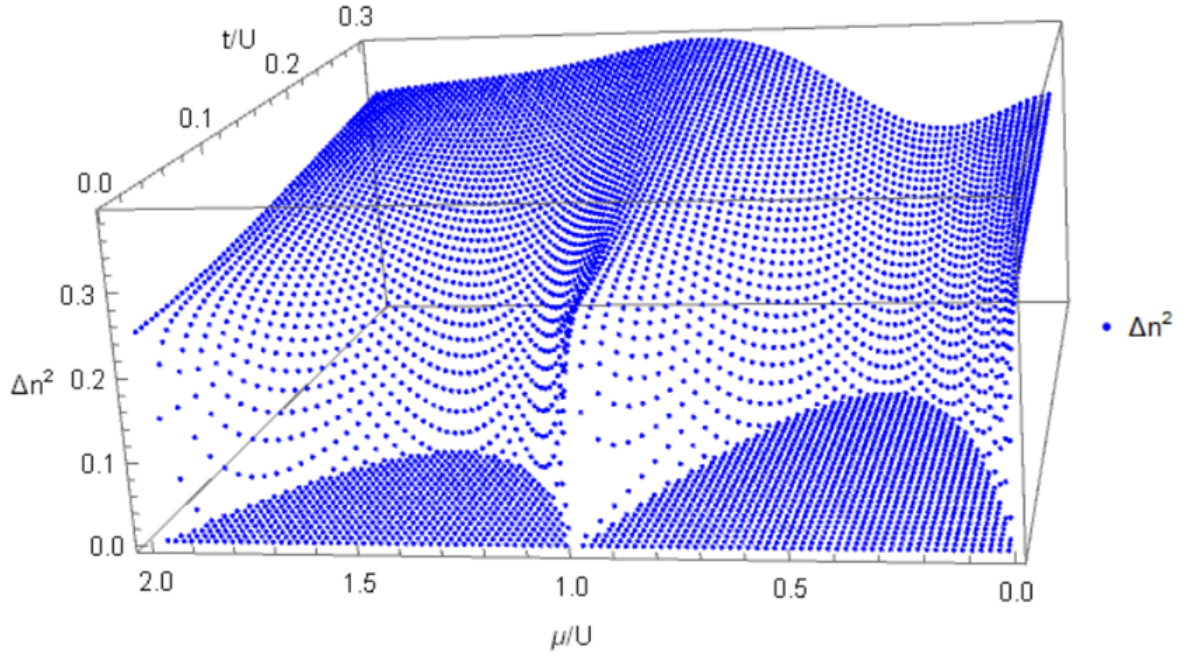


Figura 4: Diagrama de fase en 2D. Parámetro de fluctuaciones en el número de partículas respecto a  $t$  y  $\mu$ . Las zonas con valores muy cercanos a cero corresponden a la fase aislante de Mott, las otras zonas corresponden a la fase superfluidica. Para  $N = 4$  notamos dos zonas aislantes.

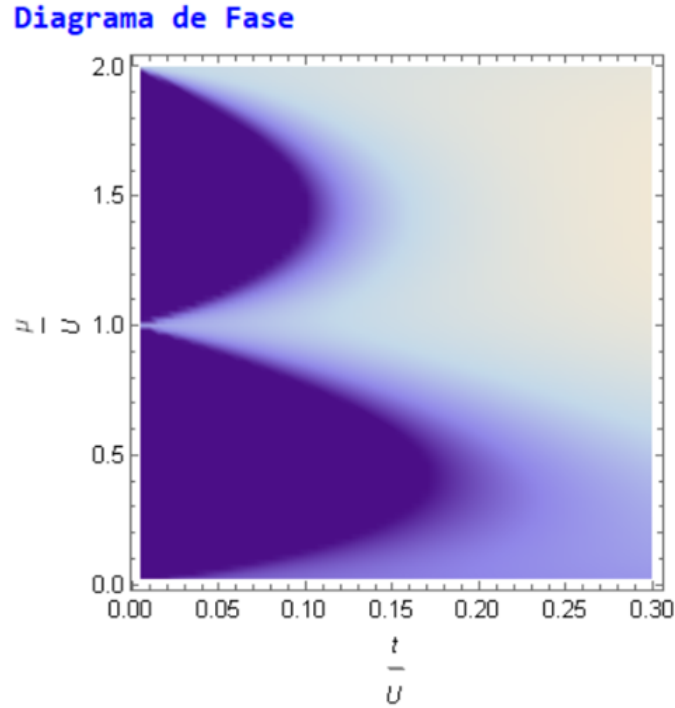


Figura 5: Diagrama de fase de  $t$  respecto a  $\mu$ . Las zonas oscuras corresponden a la fase aislante de Mott, las zonas claras corresponden a la fase superfluidica. Para  $N = 4$  notamos dos zonas aislantes.

Diagrama de Fase

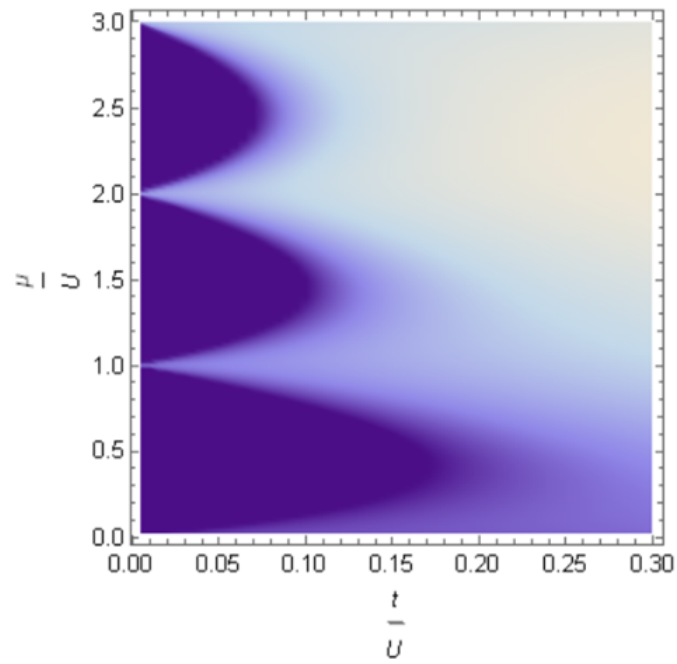


Figura 6: Diagrama de fase. Parámetro de fluctuaciones en el número de partículas respecto a  $t$  y  $\mu$ . Las zonas oscuras corresponden a la fase aislante de Mott, las zonas claras corresponden a la fase superfluidica. Para  $N = 5$  notamos tres zonas aislantes.