



# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

## FACULTAD DE CIENCIAS

**Enredamiento cuántico en modos  
inducidos por luz en redes ópticas  
cuánticas**

### TESIS

Para obtener el título de:

**Licenciado en Física**

**Presenta:**

Humberto Emiliano Hernández López

**Directores de tesis:**

Dr. Santiago Francisco Caballero Benítez

Dr. John Alexander Franco Villafaña

San Luis Potosí, S.L.P

Junio 2024



*A mi madre y mi hermana, mi motivación para todo lo que hago . . .*

## *Agradecimientos*

Todos mis logros son consecuencia primeramente del apoyo de mi madre, la Dra. Rufina Hernández López y mi hermana Emillie Jadith. A ellas me debo, por ellas me esfuerzo.

Gracias a mis compañeros de carrera y amigos, con quienes conté con apoyo tanto académico como personal. A mi pareja Alabel, a quien admiro enormemente como persona y como científica; su apoyo fue indispensable, gracias por llegar a mi vida. A mis amigos de toda la vida: Daniel, Segio y Arturo.

Expreso también mi gratitud a los profesores que me formaron: al Dr. Santiago Francisco, cuyo apoyo fue siempre dedicado, comprensivo y enriquecedor; a los doctores John Alexánder, Eduardo Gómez y César Galván, por sus cursos que me inspiraron y por haber respondido siempre amablemente.

Agradezco sinceramente a la Universidad Autónoma de San Luis Potosí y al Instituto de Física de la UNAM por brindarme el entorno para la realización de esta tesis. Además, expreso mi gratitud a la DiCu de la SMF y a los proyectos UNAM-DGAPA-PAPIIT:IN109619, UNAM-DGAPA-PAPIIT:IN118823, y CONAHCYT-CB:A1S-30934 por su respaldo fundamental.

# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>I</b>
<b>Índice general</b>	<b>II</b>
<b>Resumen</b>	<b>1</b>
<b>Introducción</b>	<b>2</b>
<b>1. Modelo de Bose Hubbard</b>	<b>4</b>
1.1. Realizaciones experimentales . . . . .	5
1.2. Fases del modelo . . . . .	10
1.3. Herramientas para caracterizar el modelo . . . . .	12
<b>2. Modelo extendido con cavidad óptica de alta reflectancia</b>	<b>15</b>
2.1. Fases del modelo . . . . .	18
<b>3. Entropía de entrelazamiento</b>	<b>20</b>
3.1. Bases matemáticas . . . . .	21
3.2. Definición de la entropía de entrelazamiento . . . . .	23
<b>4. Métodos de solución</b>	<b>26</b>
4.1. Diagonalización exacta . . . . .	26
4.2. Aproximación de campo medio . . . . .	30
4.3. Método de bosones esclavos . . . . .	33
4.3.1. Representación explícita de operadores slave-boson . . . . .	41
4.3.2. Aproximación de Bogoliubov sobre la teoría efectiva de bosones esclavos . . . . .	44
4.3.3. Entropía de entrelazamiento bajo el formalismo de bosones esclavos	45
<b>5. Resultados</b>	<b>50</b>
5.1. Entropía de entrelazamiento en modelo de Bose-Hubbard . . . . .	51
5.2. Entropía de entrelazamiento en modelo extendido con cavidad . . . . .	54
5.3. Método de bosones esclavos aplicado . . . . .	58
<b>6. Discusión</b>	<b>62</b>

<b>Conclusiones</b>	<b>66</b>
<b>Appendices</b>	<b>68</b>
<b>A. Proceso de trazado parcial</b>	<b>68</b>
<b>B. Solución por diagonalización exacta: ejemplo ilustrativo</b>	<b>75</b>
<b>C. Matriz de correlación</b>	<b>79</b>
<b>D. Código de diagonalización exacta en python</b>	<b>81</b>
<b>E. Código de bosones esclavos</b>	<b>83</b>
 <b>Bibliografía</b>	 <b>88</b>

# Resumen

En este trabajo se propone la utilización de la entropía de enredamiento como parámetro de orden para caracterizar las transiciones de fase en dos sistemas: el modelo de Bose-Hubbard y un modelo de Bose-Hubbard extendido con una interacción mediada por una cavidad óptica de alta reflectancia. Ambos modelos fueron resueltos mediante diagonalización exacta, logrando encontrar una correspondencia entre la medida calculada de entropía de enredamiento y sus transiciones de fase. También se realizó un segundo cálculo para el modelo de Bose-Hubbard mediante el método de bosones esclavos basado en una aproximación de campo medio, el cual concuerda con el primer método.

Como resultado se confirma que la entropía de enredamiento es un buen parámetro de orden y además se prepara el terreno para usar esta medida para caracterizar sistemas con interacciones más complejas y de mayor dimensión mediante el método de bosones esclavos. Los programas realizados quedan a disposición de la comunidad científica.

# Introducción

En 1995 fue posible observar la realización experimental de un condensado de Bose-Einstein (BEC)[\[1\]](#), desde entonces, la física de muchos cuerpos ha sido un campo tremadamente activo por la capacidad de simular sistemas físicos manipulables con alta precisión. En años recientes, la investigación de vanguardia se encuentra en la simulación de sistemas cuánticos mediante átomos ultrafríos en redes ópticas [\[2–5\]](#).

A la par del avance en métodos de simuladores cuánticos, también se han estudiado los efectos de correlación y entrelazamiento (fenómeno cuántico identificado ya desde 1936 [\[6, 7\]](#)) presente en este tipo de sistemas [\[8\]](#), así como las transiciones de fase que presentan.

Los sistemas fuertemente correlacionados han sido fuertemente estudiados desde su introducción por Hubbard [\[9\]](#), Gutzwiller [\[10\]](#) y Kanamori [\[11\]](#), y a pesar de su simpleza son capaces de representar fielmente sistemas de átomos ultrafríos [\[5\]](#). Se pueden extender los modelos de Hubbard para interacciones más complejas, por ejemplo, mediadas por cavidades ópticas de alta reflectancia [\[3, 12, 13\]](#).

Una forma de cuantificar el nivel de correlación presente en un sistema es mediante la Entropía de Entrelazamiento [\[14\]](#) (EE), la cual puede proporcionar información relevante sobre las propiedades del sistema y sus transiciones de fase [\[15\]](#).

El presente trabajo está organizado del siguiente modo: en el Capítulo 1 se introduce el modelo de Bose-Hubbard (BH), paradigmático para el estudio de sistemas fuertemente correlacionados. Se muestra su realización experimental y las fases que presenta, así como herramientas necesarias para caracterizarlas. En el Capítulo 2 se expande el modelo añadiendo interacciones de largo alcance, lo cual se logra mediante una cavidad óptica de alta reflectancia, al cual llamamos modelo extendido de Bose-Hubbard (EBH). Se explican entonces las nuevas fases que presenta el sistema. Para estudiar las correlaciones presentes en ambos sistemas se utilizará el formalismo de la EE en el Capítulo 3. Los métodos de solución, explicados en el Capítulo 4 se dividen en 2 partes, primero el método de

diagonalización exacta (4.1), que tiene la desventaja de poder trabajar con pocos sitios debido a complejidad computacional, y después extendiendo una aproximación de campo medio (4.2) mediante un método de bosones esclavos (4.3), que le añade las correlaciones entre diferentes sitios. Los capítulos 5 y 6 están dedicados presentar los resultados de la medida de EE para el modelo BH y EBH, así como compararlos con la solución de BH mediante el método de bosones esclavos.

# Capítulo 1

## Modelo de Bose Hubbard

El modelo de Bose-Hubbard describe el comportamiento de una red de partículas bosónicas que interactúan entre sí. Se trata de una generalización de un modelo de Hubbard, originalmente concebido por Gutzwiller, Kanamori y Hubbard independientemente en 1963 [5], en el cual se estudian correlaciones y transiciones de fase en sistemas fermiónicos. Años más tarde, gracias al trabajo de Fisher et al. [16], comenzó el interés por estudiar sistemas de bosones interactuantes en una red, el modelo de Bose-Hubbard [17].

La construcción del Hamiltoniano del modelo involucra primeramente una parte cinética

$$H_{kin} = - \sum_{\langle i,j \rangle}^M J_{ij} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i) \quad (1.1)$$

Donde M es el número de sitios de la red, el factor  $J_{ij}$  representa la amplitud de salto entre dos sitios. En este trabajo trataremos sistemas homogéneos, donde para cada par la amplitud es la misma  $J_{ij} = J \forall i, j$ .  $\hat{b}(\hat{b}^\dagger)$  es el operador bosónico de aniquilación (creación), con reglas de conmutación  $[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}$  y  $[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0$ . Y  $\langle i, j \rangle$  simboliza que sólo se admite salto entre sitios vecinos inmediatos. Esta contribución se encarga de eliminar un bosón en un sitio y crearlo en un sitio vecino.

Se añade además la parte de interacción en sitio del Hamiltoniano

$$H_{int} = \frac{U}{2} \sum_i^M \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (1.2)$$

Que simplemente es un conteo de pares de bosones en el sitio i, dado por el factor  $\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1)/2$  con una amplitud U.

Y finalmente se añade un potencial químico  $\mu$  para controlar el número total de partículas

$$H_{cp} = -\mu \sum_i^M \hat{n}_i \quad (1.3)$$

En suma, se tiene un modelo de bosones que pueden moverse de un sitio a otro y pueden interactuar entre sí a través de un término de interacción local.

$$H^{bh} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^M \left( \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i \right) + \frac{U}{2} \sum_i^M \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i^M \hat{n}_i \quad (1.4)$$

En la base de Fock, dada por los estados de ocupación  $\{|n\rangle_i\}$ , los operadores bosónicos actúan como

$$\begin{aligned} \hat{b}_i |n\rangle_i &= \sqrt{n} |n-1\rangle_i \\ \hat{b}_i^\dagger |n\rangle_i &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle_i \\ \hat{n}_i |n\rangle_i &= n |n\rangle_i \end{aligned}$$

A pesar de la aparente simpleza de la construcción del Hamiltoniano de Bose-Hubbard, no hay solución general conocida, por lo que es común tratarlo mediante métodos numéricos o aproximados como DMRG (density matrix renormalization group), Mean-Field y técnicas más sofisticadas como el método de bosones esclavos (Ver Cap. 4).

## 1.1. Realizaciones experimentales

Este sistema puede ser generado físicamente atrapando un gas de bosones ultrafríos en una red óptica, pues su dinámica es bien representada por el modelo de Bose-Hubbard, según sugirieron Jaksch et al. [18] y más tarde esto fue comprobado experimentalmente [19, 20]. Esto se debe a que al tener un gas bosónico a temperatura ultrafría se permite la formación de un condensado de Bose-Einstein. En presencia de un potencial periódico en forma de red, se constriñe el movimiento de los bosones de tal forma que pueden ocupar sitios alrededor de los mínimos del potencial periódico que los atrapa. Esto provoca que para potenciales suficientemente fuertes se reduzcan las fluctuaciones hasta alcanzar un mínimo de energía en el cual cada sitio tenga la misma ocupación. Una red óptica impone

una estructura cristalina de los átomos por medio de potenciales ópticos. Una revisión del progreso experimental referente a fenómenos en gases ultrafríos puede ser consultada en el paper de Bloch et al. [17]. La base se encuentra en la fuerza dipolar que sienten los átomos en presencia de un laser debido al efecto AC Stark.

$$\vec{F} = \frac{1}{2}\alpha(\Delta)\vec{\nabla} \left[ |\vec{E}(\vec{r})|^2 \right] \quad (1.5)$$

siendo  $\alpha(\Delta)$  el tensor de polarizabilidad del átomo.

De modo que los átomos se ven atraídos o repelidos por los nodos y antinodos de un láser, el cual posee un perfil de intensidad  $I(\mathbf{r})$  espacialmente dependiente, generando efectivamente un potencial

$$V_{opt}(\mathbf{r}) = \Delta E(\mathbf{r}) \propto \frac{I(\mathbf{r})}{\Delta} \quad (1.6)$$

Donde  $\omega_L$  es la frecuencia del láser,  $\Delta = \omega_L - \omega_1$  el desfasamiento entre la frecuencia del láser y la de resonancia de los átomos, y  $\alpha$  la polarizabilidad, de cuyo signo depende la dirección de la fuerza.

$\Delta < 0 \rightarrow$  atractivo en zonas de alta intensidad.

$\Delta > 0 \rightarrow$  repulsivo en zonas de alta intensidad.

Una ventaja de crear potenciales periódicos mediante redes ópticas es que son rígidas, no permiten la aparición de fonones [21]. Además, se pueden crear redes spin-dependientes con una configuración de láseres linealmente polarizados contrapropagantes con un ángulo, átomos con estados hiperfinos diferentes pueden experimentar potenciales diferentes. Un arreglo típico y conveniente es el descrito por Greiner et al. [19], en el cual se crea una red 3-D de átomos de  $^{87}Rb$ . Los pasos seguidos en dicho artículo, a grosso modo, son los siguientes:

Se preparan mediante enfriamiento láser átomos de  $^{87}Rb$  en el estado  $F = 2, m_F = 2$  y se transfieren a una trampa de potencial magnético. Se usa un método de evaporación por radio-frecuencias para crear un condensado tipo Bose-Einstein. Mediante un par de láseres contrapropagantes se pueden crear ondas estacionarias que atrapen a los átomos, y juntando varios de ellos en diferentes direcciones se genera un potencial óptico dado por:

$$V_{opt}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^D V_{j,0} \sin^2(kx_j) \quad (1.7)$$

Donde  $D$  son todas las direcciones,  $V_{j,0}$  es la profundidad en cada dirección, con vectores de onda  $k = 2\pi/\lambda$  y  $\lambda$  es la longitud de onda del láser.

El caso más simple en 3D es de una red cúbica con  $V_{j,0} = V_0 \quad \forall j$ . Para crearla se requieren 3 ondas estacionarias en direcciones ortogonales mediante 6 láseres contrapropagantes, creando una geometría descrita por el potencial óptico:

$$V_{opt}(x, y, z) = V_0(\sin^2(kx) + \sin^2(ky) + \sin^2(kz)) \quad (1.8)$$

Es posible aproximar el potencial 3D a uno 1D suprimiendo el tunelaje en dos de los ejes mediante la elección de frecuencias que aumenten la profundidad del potencial en estas componentes. Para preparar este arreglo 1D [20], se modulan los potenciales perpendiculares tal que sean mucho mayores al eje de interés. En el trabajo de Störfere et al. [20] los modulan a  $V_{\perp} = 30E_R$  y  $V_{\parallel} \sim 4E_R$ , con lo cual se suprimen los tunelajes en los ejes perpendiculares. Es decir  $\omega_x \gg \omega_y, \omega_z$

Resultando de forma efectiva, para una red 1D:

$$V_{opt}(x) = V_0 \sin^2(kx) \quad (1.9)$$

Entonces se transfiere el condensado magnéticamente atrapado hacia la red óptica generada por  $V_{opt}$  amplificando lentamente la amplitud de los láseres para garantizar que el condensado permanezca en el estado base.

Suele ser conveniente escribir la profundidad del potencial en términos de la energía de recoil  $E_R = \hbar^2 k_{recoil}^2 / 2m$ . Para  $^{87}\text{Rb}$  los valores típicos se encuentran en el rango de  $E_R \approx 100\hbar$  KHz.

El operador Hamiltoniano en la segunda cuantización para átomos bosónicos en una trampa de potencial externo es descrito por

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \quad (1.10)$$

Donde  $V_{ext} = V_{opt}(\mathbf{r}) + V_T$  es el potencial externo compuesto por el potencial de atrapado  $V_T$  (puede ser, por ejemplo, una trampa magnética) y el óptico  $V_{opt}$  (Ec. 1.7). Las interacciones entre átomos están mediadas por  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (4\pi\hbar^2 a_s/m)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , donde  $m$  es la masa de los átomos,  $\hat{\psi}$  los operadores de campo bosónicos y  $a_s$  la longitud de dispersión de la aproximación de corto rango para el potencial de interacción siendo  $a$  la separación entre sitios de red.

De modo que  $\hat{H}$  resulta

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{opt}(\mathbf{r}) + V_T \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \quad (1.11)$$

Por el Teorema de Bloch, una partícula en un potencial periódico tiene como solución a la ecuación de Shrödinger funciones de ondas planas moduladas por funciones periódicas, llamadas funciones de Bloch  $\Phi$  y además da origen a una estructura de bandas.

Una base alternativa que corresponde a soluciones localizadas alrededor de sitios de red son las funciones de Wannier  $\omega_n$ , relacionadas con las funciones de Bloch  $\Phi$  [5] mediante

$$\omega_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \Phi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

$$\Phi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}), \quad u_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r} + \mathbf{d}) = u_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r})$$

Donde  $M$  es el número de sitios de red y  $n$  denota la banda correspondiente.

Si consideramos potenciales ópticos suficientemente profundos y temperaturas bajas, podemos expandir los operadores de campo  $\hat{\psi}$  en la base de Wannier como

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \hat{b}_i \omega_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (1.13)$$

Sustituyendo en el Hamiltoniano (Ec. 1.11)

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d\mathbf{r} \sum_j \hat{b}_i \omega^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{opt}(\mathbf{r}) + V_T \right] \sum_j \hat{b}_j \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d\mathbf{r} \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i |\omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4 \\ &= \sum_{\langle ij \rangle} \left( \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c. \right) \int d\mathbf{r} \omega^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{opt}(\mathbf{r}) \right] \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \\ &\quad + \sum_i \hat{n}_i \int d\mathbf{r} V_T |\omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^2 \\ &\quad + \sum_i \hat{n}_i \frac{1}{2} \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d\mathbf{r} |\omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4 \end{aligned} \quad (1.14)$$

Comparando con la forma del Hamiltoniano de Bose-Hubbard (Ec. 1.4) se encuentran los parámetros [5]

$$\begin{aligned} J_{ij} &= \int d\mathbf{r} \omega^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{opt}(\mathbf{r}) \right] \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \\ &= \frac{4E_r}{\sqrt{\pi}} (V_0/E_r)^{3/4} \exp \left[ -2 \sqrt{\frac{V_0}{E_r}} \right] \end{aligned} \quad (1.15)$$

$$\begin{aligned} U_i &= \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d\mathbf{r} |\omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4 \\ &= \sqrt{8/\pi} k a_s E_r (V_0/E_r)^{3/4} \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\mu_i = \int d\mathbf{r} V_T |\omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^2 \approx V_T(\mathbf{r}_i) \quad (1.17)$$

De las tres ecuaciones se observa que los valores de los parámetros dependen de la geometría de la red, y el valor del potencial de red óptica  $V_{opt}$ . Resultados de Blakie y

Clark [22] muestran que para una red 2-dimensional, en el rango  $0 < |V_{opt}| < 25$ , los parámetros se encuentran dentro de los rangos  $10^{-6} < J < 10^0$  y  $0 < U < 0.8$ ; todo en unidades de  $E_R$ .

En presencia de una fuerza externa, los átomos se mueven a través de las bandas. En un potencial óptico se presentan tanto oscilaciones de Bloch, donde el movimiento de las partículas de la red es oscilatorio, así como tunelamiento Landau-Zener, en el cual cambios repentinos de los parámetros del sistema pueden inducir transiciones entre estados cuánticos con diferentes niveles de energía.

En el régimen fuértemente correlacionado, los sistemas de gases en redes pueden imitar sistemas de materia condensada. Gases ultrafríos son, en general, débilmente interactuantes, pero es posible mediar la intensidad de la interacción mediante Resonancias Feshbach. Experimentalmente nos interesa modular esto tal que nos encontremos en un regimen fuertemente correlacionado para el cual nuestra aproximación de  $\hat{\psi}$  en la base de Wannier es válida.

## 1.2. Fases del modelo

El estudio de las transiciones de fase en sistemas cuánticos puede ser clave para explicar resultados de experimentos y probar propuestas teóricas [23]. El modelo de Bose-Hubbard predice una transición de fase de un estado Superfluido (SF) a un aislante de Mott (MI), todo a temperatura  $T = 0$ , pues las fluctuaciones de partículas son puramente cuánticas.

El MI es un tipo de aislante en el que la falta de conductividad eléctrica se debe a las interacciones partícula-partícula dentro de la red, en un sistema electrónico análogo [24]. Para llenados enteros las excitaciones serán de tipo agujero-partícula, lo cual provoca una brecha de energía en el espectro de dispersión. Como resultado, el sistema se comporta como un aislante y no permite el movimiento entre sitios, lo que significa que es necesaria una cantidad finita de energía para mover los electrones de un sitio a otro.

De manera análoga a un sistema electrónico, en un sistema atómico bosónico en el modelo de Bose-Hubbard, la fase de MI se puede observar en el régimen donde  $\frac{J}{U} \ll 1$ . En este régimen, los bosones están localizados en sus sitios individuales y no pueden moverse libremente a través de la red.

Haciendo una expansión de acomplamiento fuerte [5, 25] sobre el Hamiltoniano (Ec. 1.4)

$$H = H_0 + \frac{J}{U} H_1 = \sum_i \left( \frac{1}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \frac{\mu}{U} \sum_i \hat{n}_i \right) + \frac{J}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} (-\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i) \quad (1.18)$$

A orden cero el Hamiltoniano es local ( $H_0$ ), por lo que es exactamente soluble. Si la ocupación de bosones por sitio es  $n_0$ , el estado base estará dado por

$$|\psi(n_0)\rangle_{MI}^{(0)} = \prod_{i=1}^M \frac{(b_i^\dagger)^{n_0}}{\sqrt{n_0!}} |0\rangle = |n_0, n_0, \dots, n_0, n_0\rangle \quad (1.19)$$

con energía correspondiente

$$E_0^{(0)} = \frac{U}{2} \hat{n}_0 (\hat{n}_0 - 1) - \mu n_0. \quad (1.20)$$

Para cálculos más precisos se puede calcular de modo perturbativo el término de tunelaje.

Por otro lado, la fase superfluida se puede observar cuando  $\frac{J}{U} \gg 1$ . En este régimen, los bosones pueden moverse libremente a través de la red y el sistema se comporta como un fluido con cero viscosidad.

En el estado SF cada partícula se deslocaliza, por lo que podemos escribir el estado de una sola partícula como

$$|\psi_{sp}\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M b_i^\dagger |0\rangle. \quad (1.21)$$

Y dado que no hay interacciones, el estado completo será el producto propiamente simetrizado de todas estas N funciones de una sola partícula

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{SF} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} |\psi_{sp}\rangle^N \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M b_i^\dagger \right)^N |0\rangle. \end{aligned} \quad (1.22)$$

La transición de fase es continua en el modelo de Bose-Hubbard cuando se varía el proporción de  $J$  y  $U$ . El punto crítico en donde ocurre la transición depende del tipo de estructura cristalina y la densidad de llenado. Puede ser calculado bajo el formalismo de mean-field (ver Cap. 4). Para una red cúbica y densidad de llenado unitaria el punto crítico

se encuentra en  $J/U \approx 0.059$  y  $\mu/U \approx 0.37$ , mientras que para una cadena unidimensional de mismo llenado se encuentra en  $J/U \approx 0.26$  y  $\mu/U \approx 0.16$  [26].

El diagrama de fase [5] tiene la siguiente estructura [16]:

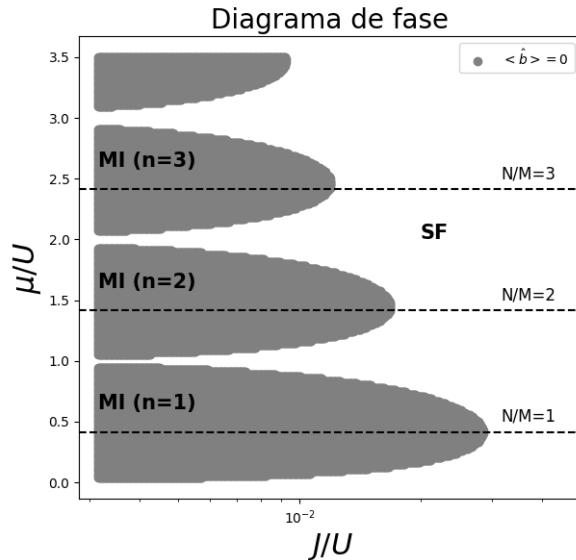


FIGURA 1.1: Diagrama de fase del modelo de Bose-Hubbard. Cada lóbulo define una fase de aislante de Mott para diferentes densidades bosónicas. Fuera de ellos la fase es superfluida.

### 1.3. Herramientas para caracterizar el modelo

Con el fin de poder distinguir las fases que se presentan en el modelo, es necesario definir algunos parámetros que sean indicadores del estado del sistema [27, 28].

Introducimos primeramente los estados de Fock, que sirven de base finita para un sistema confinado a  $N$  partículas, dados por

$$|\beta\rangle = |n_1^\beta, n_2^\beta, \dots, n_M^\beta\rangle \quad (1.23)$$

En donde  $n_i^\beta$  es el número de bosones en el sitio  $i$  en un estado etiquetado como  $\beta$ .

Así, un estado arbitrario se puede representar en esta base como

$$|\psi\rangle = \sum_{\beta}^D c_{\beta} |\beta\rangle \quad (1.24)$$

Donde  $D$  es la dimensión del espacio de Hilbert del Hamiltoniano de Bose-Hubbard.

$$D = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!} \quad (1.25)$$

Con  $M$  y  $N$  el número de sitios y partículas, respectivamente.

La matriz de densidad es una herramienta matemática que se utiliza para describir el estado de un sistema cuántico. En un sistema de muchas partículas caracteriza las correlaciones espaciales y distribución de densidad de éstas. Se define como el producto del estado del sistema con su estado conjugado ( $|\psi\rangle\langle\psi|$ ).

Para saber si un estado es condensado se involucra la matriz de densidad reducida  $\rho_{k,l}^{(1)}$  (OBDM, por sus siglas en inglés) del estado deseado  $|\psi\rangle$  [28, 29].

$$\rho_{k,l}^{(1)} = \langle\psi|\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_k|\psi\rangle = \sum_{\alpha,\beta}^D c_\alpha^* c_\beta \langle\alpha|\hat{b}_l^\dagger\hat{b}_k|\beta\rangle \quad (1.26)$$

De la diagonalización se obtiene

$$\rho_{i,j}^{(1)} = n_i^{OBDM} \delta_{i,j} \quad (1.27)$$

Tomando  $n_i^{OBDM}$  como los eigenvalores de la matriz  $\rho_{k,l}^{(1)}$ . Con lo cual se define el factor de condensado  $f_c$  como el eigenvalor máximo de la OBDM normalizado al número total de partículas

$$f_c = \frac{n_{max}^{OBDM}}{N} \quad (1.28)$$

Físicamente se interpreta como la fracción de partículas que ocupan el estado más bajo de energía en el sistema, y por tanto mide el grado de coherencia en ese estado. Cuando  $f_c = 1$  el estado del sistema es el de un condensado (SF), mientras que en el límite opuesto  $f_c \rightarrow \frac{1}{M}$  el sistema es un MI. Esto puede verificarse a partir de las expresiones explícitas para los estados dadas en Ecs. 1.19 y 1.22.

El comportamiento asintótico en el límite de MI viene de la normalización de la matriz  $\text{Tr}[\rho_{ij}] = N$ , pues el eigenvalor mayor cumple entonces  $n_{max}^{OBDM} \geq \sum_i n_i/M = N/M$ , por tanto  $f_c > 1/M$

Otra variable que permite describir cómo se comporta el sistema son las fluctuaciones, que miden cómo varía la densidad de partículas en un sitio de la red. Se definen como

$$\Delta n_i = \sqrt{\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2} \quad (1.29)$$

En el límite de MI no hay fluctuaciones ( $\Delta n_i = 0$ ) debido a que no hay movimiento de partículas entre sitios de red, mientras que en SF las fluctuaciones son máximas.

Fase Cuántica	$f_c$	$\Delta n_i$
MI	$1/M$	$\rightarrow 0$
SF	1	$\rightarrow 1$

TABLA 1.1: Relación entre las fases cuánticas y los parámetros de orden.

## Capítulo 2

# Modelo extendido con cavidad óptica de alta reflectancia

Como hemos visto, átomos ultrafríos atrapados en redes ópticas permiten estudiar fases cuánticas en sistemas de muchos cuerpos. Hasta ahora se han introducido sistemas limitados por interacciones de corto alcance (Bose-Hubbard, véase el Cap. 1). Implementar interacciones de largo alcance puede volverse experimentalmente complejo, pero se puede lograr mediante sistemas de moléculas polares o átomos de Rydberg [30, 31], es decir, átomos en estados altamente excitados cuyos electrones se encuentran alejados del núcleo y, por tanto, pueden interactuar con átomos más lejanos. Otra propuesta más llamativa consiste en considerar átomos dentro de una cavidad óptica de alta reflectancia (High-Q Optical Cavity; HQOC) [3, 32].

Una HQOC es un dispositivo que se utiliza para confinar y controlar la luz en un espacio definido. Está formada por dos o más espejos que están dispuestos de tal manera que reflejan la luz en un espacio cerrado, formando una cavidad resonante. La cavidad óptica de alta reflectancia se caracteriza por tener un alto grado de reflectividad, lo que significa que la mayoría de la luz que entra en la cavidad es reflejada y no escapa hacia el exterior.

La HQOC se utiliza en diversas aplicaciones, como la resonancia magnética nuclear, la medición precisa del tiempo y la frecuencia, y la realización de experimentos de átomos fríos. En el contexto de los átomos fríos, la cavidad óptica de alta reflectancia se puede utilizar para confinar y controlar gases de bosones y estudiar su comportamiento en diferentes fases y regímenes [2–4, 12, 13].

El estudio de la dinámica de átomos ultrafríos acoplados a los modos de resonancia de una HQOC permite estudiar conceptos como la auto-organización de estos, la dispersión colectiva de luz y enfriamiento mediante cavidad. La compleja dinámica constituye en la fuerza dipolar óptica en los átomos sumado a su interacción con el campo de luz resonante. Dentro de la cavidad, la interacción de los momentos dipolares-eléctricos de los átomos con el campo de luz de la cavidad, contrario a la interacción libre, no decrece con la distancia interatómica y depende solamente del acoplamiento luz-materia. Debido a que el acoplamiento luz-materia es fuertemente potenciado dentro de la HQOC, los átomos son capaces de reemitir los fotones con una retroacción comparable a la de los láseres utilizados en el proceso de atrapado de los átomos. Como consecuencia, esto resulta en una interacción efectiva átomo-átomo de largo alcance [12, 32].

El estudio de este tipo de sistemas de alto control ha contribuido al origen de la noción de simuladores cuánticos [33].

Combinando este tipo de sistema con una red óptica es posible inspeccionar la física de modelos de Hubbard de manera no destructiva.

El sistema puede ser modelado mediante un modelo de Bose-Hubbard extendido, al cual se añade la parte de interacción de la cavidad, dada por [3]

$$H^{\text{cav}} = \frac{g_{\text{eff}}}{M} J_D^2 \hat{D}_-^2 \quad (2.1)$$

Donde  $\hat{D}_-$  es el operador de densidad, dado por

$$\hat{D}_- = \sum_{i=1}^M (-1)^i n_i \quad (2.2)$$

Y  $g_{\text{eff}}$  es una constante que media la fuerza de interacción con la cavidad, cuyo valor depende de la amplitud y la afinación del láser que se inyecta mediante la cavidad. Típicamente se realiza con el mismo orden de magnitud o mayor que las interacciones en sitio,  $|g_{\text{eff}}| \gtrsim U \sim kHz$  [3].

Resultando un Hamiltoniano efectivo

$$H^{\text{eff}} = H^{\text{bh}} + H^{\text{cav}} \quad (2.3)$$

El coeficiente  $J_D$  esencialmente depende del detuning entre las fases de las ondas estacionarias de los láseres de bombeo  $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_0$  y  $\Sigma\phi = \phi_1 + \phi_0$

$$J_D \propto | \cos [(\Sigma\phi - \Delta\phi)/2] \cos [(\Sigma\phi + \Delta\phi)/2] | \quad (2.4)$$

De modo que su valor se puede ajustar arbitrariamente simplemente modificando las fases  $\phi_i$  de los láseres.

El arreglo experimental típico [34] (Fig. 2) consiste en colocar un condensado de Bose-Einstein (BEC) generado con  $\sim 10^5$  átomos de  $^{87}\text{Rb}$  dentro de una trampa magneto-óptica, que combina la técnica de evaporación láser y las fuerzas ópticas dipolares. La evaporación láser permite enfriar el condensado a temperaturas cercanas al cero absoluto, mientras que las fuerzas ópticas dipolares se utilizan para confinar espacialmente los átomos del condensado en una región del espacio. Con el fin de controlar las interacciones átomo-átomo de forma controlada, el BEC se prepara en el estado hiperfino  $|F, m_F\rangle = |1, -1\rangle$  con el fin de ser susceptible a enfriamiento láser, trampas magnéticas y resonancias Feshback. Se confina el BEC dentro de una cavidad de alta reflectancia que actúa como un resonador, proporcionando un acoplamiento intensivo entre el campo electromagnético y los átomos.

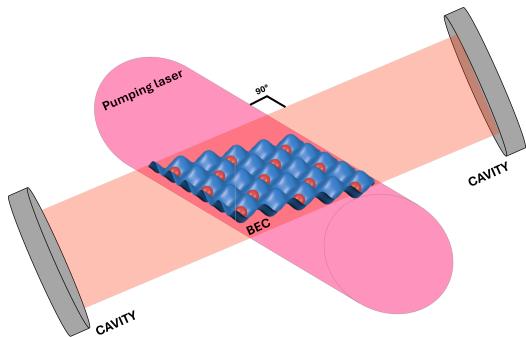


FIGURA 2.1: Diagrama del arreglo experimental. La frecuencia del láser de bombeo de onda estacionaria, perpendicular al eje de la cavidad, es tal que se encuentra lejos de resonancias atómicas, pero cerca de un modo de resonancia en la cavidad. Cuando se supera una potencia crítica del láser de bombeo, la dispersión colectiva de los átomos entra en resonancia con el modo de la cavidad, induciendo un potencial de red cuadrada que depende dinámicamente de la posición, dando origen a una estructura tipo tablero de ajedrez.

En este trabajo se analiza una versión reducida de este sistema. En donde la red es unidimensional y con condiciones periódicas. Es decir, se trata de un anillo unidimensional de pocos sitios.

## 2.1. Fases del modelo

La compleja dinámica producida por la combinación de interacciones de corto y largo alcance logradas al colocar una red de átomos ultrafríos dentro de una HQOC permite la aparición de fases más complejas [3, 4, 12]. Tales fases son<sup>1</sup>

**Superfluido (SF)**: los átomos fluyen sin fricción, es decir, se pueden mover libremente entre sitios, creando una distribución uniforme en donde la función de onda se extiende sobre todos los sitios de red.

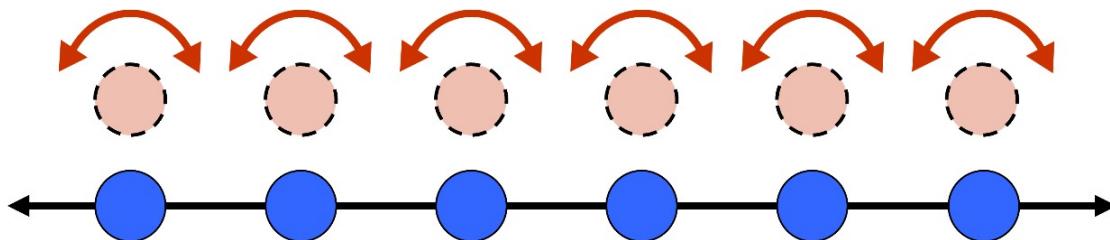


FIGURA 2.2: Representación gráfica del estado SF para una red de 1D. La flecha indica libertad de movimiento entre sitios. Las fluctuaciones son máximas, acercándose a 1 ( $\Delta n_i \approx 1$ ).

**Supersólido (SS)**: Combina características de superfluidez y orden sólido. Los átomos pueden fluir libremente, pero aún logrando mantener una estructura periódica.

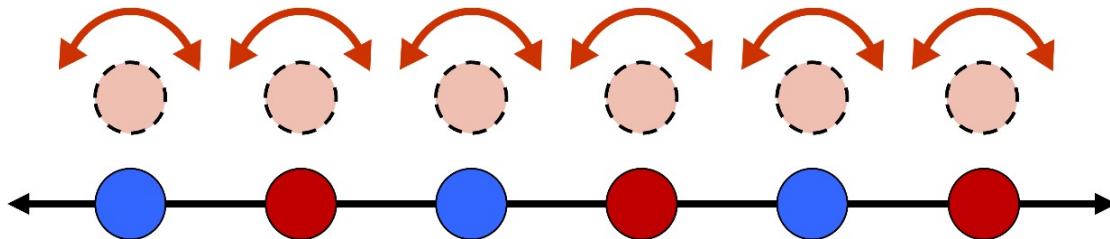


FIGURA 2.3: Representación gráfica del estado SS para una red de 1D. La flecha indica libertad de movimiento entre sitios. Diferentes colores indican diferente densidad de partículas por sitio.

**Aislante de Mott (MI)**: los átomos se encuentran bien localizados en los sitios.



FIGURA 2.4: Representación gráfica del estado MI para una red de 1D.

<sup>1</sup>NOTA: las representaciones gráficas son una simplificación conceptual de los estados debido a que su verdadera dinámica es compleja y dichas representaciones no capturan la totalidad de su comportamiento

**Onda de Densidad (DW):** análogo al MI, los átomos se arreglan en sitios bien localizados, pero formando una estructura periódica de alta y baja densidad en la estructura de la red.



FIGURA 2.5: Representación gráfica del estado DW para una red de 1D. Diferentes colores indican diferente densidad de partículas por sitio.

Modelos más avanzados permiten que emergan fases multicomponentes DW y SS (dímeros, trímeros, etc.) si se añaden términos de interacción de tipo enlace [3] o se limita la interacción global (de alcance infinito) inducida por la cavidad a una interacción de alcance finito [12]. Esto también se puede lograr incrementando los modos de resonancia de la luz dentro de la cavidad [35].

Con el fin de describir el comportamiento de dichas fases es necesario introducir un nuevo parámetro de orden

$$\mathcal{O}_{DW}^2 = \frac{\langle \hat{D}_-^2 \rangle}{M^2}. \quad (2.5)$$

Estos parámetros sumados a  $f_c$  y  $\Delta n_i$  (véase Cap. 1.3) permiten distinguir las transiciones de fases en el sistema.

$$f_c = \frac{n_{max}^{OBDM}}{N}, \quad (2.6)$$

$$\Delta n_i = \sqrt{\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2}. \quad (2.7)$$

La combinación entre los valores de los tres parámetros definidos permiten identificar en qué fase se encuentra un cierto estado (Tabla 2.1).

Fase Cuántica	$f_c$	$\Delta n_i$	$\mathcal{O}_{DW}$
SF	$\neq 0$	$\neq 0$	0
SS	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$
MI	0	0	0
DW	0	$\neq 0$	$\neq 0$

TABLA 2.1: Relación entre las fases cuánticas presentes en el modelo extendido de Bose-Hubbard en 1D y sus parámetros de orden.

# Capítulo 3

## Entropía de entrelazamiento

Desde los primeros años de la mecánica cuántica, se descubrió un fenómeno fascinante conocido como entrelazamiento [14]. En 1935, Einstein, Podolsky y Rosen lo identificaron [6], y posteriormente Schrödinger lo nombró como tal [7]. Este fenómeno se caracteriza por la incapacidad de describir el estado de un sistema compuesto como un producto de los estados de sus subsistemas individuales. Tal fenómeno generó varias ramas de estudio, siendo una de ellas el intento por establecer una medida cuantitativa del estado de entrelazamiento presente en un sistema.

Uno de los conceptos fundamentales en el estudio del entrelazamiento es la separabilidad, que es la propiedad que tiene un estado de ser descompuesto en partes independientes [36]. Sea  $\mathcal{H}$  el espacio de Hilbert del sistema. Si el sistema es compuesto por N subsistemas, el espacio total será el producto tensorial de los espacios de Hilbert de los subsistemas [14].

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{l=1}^N \mathcal{H}_l \quad (3.1)$$

El estado total del sistema, de acuerdo con el principio de superposición, se puede escribir como

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_n=1}^N c_{i_1 \dots i_n} |i_1\rangle \dots |i_n\rangle \quad (3.2)$$

Se le llama estado puro al estado cuántico que puede describirse completamente por un vector de estado en el espacio de Hilbert del sistema total, como se muestra en la ecuación (3.2), esto quiere decir que se encuentra en un microestado perfectamente definido. Un estado separable se refiere a un tipo específico de estado puro en un sistema compuesto, donde el estado total del sistema puede expresarse como el producto tensorial de los

estados individuales de los subsistemas  $|\psi\rangle = \bigotimes_l |\psi_l\rangle$  (Fig. 3.1a). Por otro lado, cuando un estado no puede escribirse en esa forma, se le llama estado entrelazado (Fig. 3.1b).

Cuando un estado es separable, no hay correlación cuántica o fenómeno de entrelazamiento, en otras palabras, un estado de un subsistema no tiene asignado un microestado bien definido, sino que este está ligado a un subsistema externo.

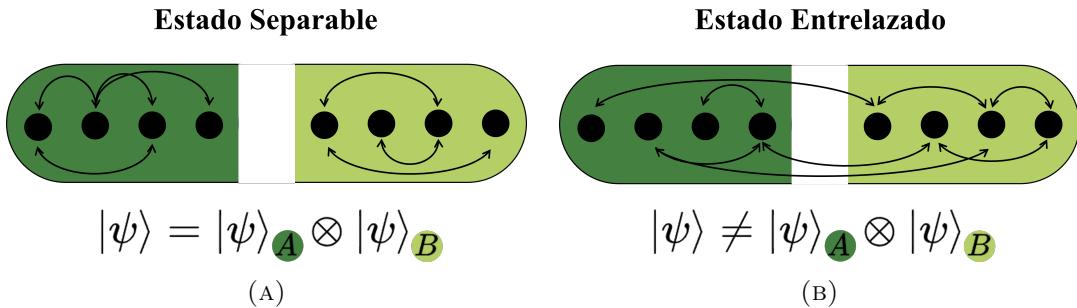


FIGURA 3.1: Diagrama de sistema bipartito para el caso separable (a) y entrelazado (b). Las flechas indican sitios conectados entre sí.

La entropía de entrelazamiento (EE) es una medida del entrelazamiento presente entre las partes que conforman un sistema [14, 37]. Es un concepto ampliamente estudiado en el contexto de la teoría de la información cuántica [14, 29, 38], y sus aplicaciones se extienden a las áreas de física de materia condensada, teoría cuántica de campos [39, 40] y gravedad cuántica [41]. En física de materia condensada, la EE ha sido utilizada para estudiar el comportamiento de sistemas cuánticos de muchos cuerpos [42], como modelos de Hubbard [43–46], modelos de Hubbard extendidos [2–4, 12, 13], y para entender las propiedades de transiciones de fase cuánticas [15, 47]. En particular, la ley de escalamiento de área [48–50] de la EE ha sido utilizada para clasificar diferentes fases, como las de naturaleza de orden topológico o de comportamiento crítico [51, 52].

### 3.1. Bases matemáticas

En la mecánica cuántica, el concepto de trazado de una matriz es fundamental para trabajar con propiedades estadísticas de sistemas. Para una matriz  $A$  con elementos  $A_{ij}$  la traza de una matriz, denotada como  $\text{Tr}[A]$ , se define como la suma de los elementos diagonales

$$\text{Tr}[A] = \sum_i A_{ii}. \quad (3.3)$$

Esta herramienta encuentra su uso en el hecho de que en cuántica las observables tienen asignada una representación matricial. Una de las matrices más relevantes en el contexto de información cuántica es la matriz de densidad  $\rho$ . Típicamente uno representa un estado cuántico de un sistema mediante vectores de estado  $|\psi\rangle$ , pero en escenarios prácticos es necesario poder caracterizar estados mixtos, para lo cual se hace uso de la matriz de densidad, definida como

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (3.4)$$

Además, el proceso de trazado también puede realizarse midiendo solo sobre ciertos grados de libertad del sistema. Este proceso es llamado trazado parcial.

Supóngase que un sistema está compuesto por dos subsistemas  $A$  y  $B$ , entonces su matriz de densidad se denota como  $\rho_{AB}$  y se define la matriz de densidad reducida de  $A$  como

$$\rho_A = \text{Tr}_B[\rho_{AB}]. \quad (3.5)$$

Donde  $\text{Tr}_B$  suma solo sobre los elementos diagonales pertenecientes al subsistema  $A$ . Acorde a las ecuaciones 3.1 y 3.2, para un estado separable en un sistema bipartito de la forma  $|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \otimes |b_i\rangle$ , con  $|a_i\rangle \in A$  y  $|b_i\rangle \in B$ , la traza parcial sobre  $B$ ,  $\text{Tr}_B$ , se define como

$$\text{Tr}_B[\rho_{AB}] = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|. \quad (3.6)$$

Elemento por elemento se calcula como

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B[\rho_{ij}] &= \text{Tr}_B \left[ \left( |a_i\rangle \otimes |b_i\rangle \right) \left( \langle a_j| \otimes \langle b_j| \right) \right] \\ &= \text{Tr}_B \left[ |a_i\rangle \langle a_j| \otimes |b_i\rangle \langle b_j| \right] \\ &= |a_i\rangle \langle a_j| \text{Tr} \left[ |b_i\rangle \langle b_j| \right] \\ &= |a_i\rangle \langle a_j| \langle b_i| b_j\rangle \\ &= \delta_{ij} |a_i\rangle \langle a_j|. \end{aligned} \quad (3.7)$$

La matriz de densidad posee las siguientes propiedades

$$\text{Se calcula observable como } \langle \mathcal{O} \rangle = \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle = \text{Tr}[\mathcal{O}\rho], \quad (3.8)$$

$$\rho \text{ es Hermítica} \quad \rho^* = \rho, \quad (3.9)$$

$$\rho \text{ está normalizada} \quad \text{Tr}[\rho] = 1, \quad (3.10)$$

$$\text{Tr}[\rho^2] = \begin{cases} 1, & \text{si el estado es puro} \\ < 1, & \text{si el estado es mixto} \end{cases}. \quad (3.11)$$

### 3.2. Definición de la entropía de entrelazamiento

Supóngase un sistema en un estado dado por la matriz de densidad  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{i=0}^W p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ , con  $\psi_i$  una base ortogonal de  $W$  microestados y  $p_i$  la probabilidad de cada uno, cumpliendo  $\sum_{i=0}^W p_i = 1$ .

Una medida de la cantidad promedio de información del estado es la entropía de Shannon de dicha distribución de probabilidad [29]

$$S(\rho) = - \sum_{i=0}^W p_i \ln p_i, \quad (3.12)$$

Ahora, si se tiene una observable arbitraria  $\mathcal{O} = \sum_i p_i |o_i\rangle\langle o_i|$ , la probabilidad de observar  $|o_i\rangle$  si se está en el estado  $\rho$  es

$$p_i^\mathcal{O} = \langle o_i | \rho | o_i \rangle. \quad (3.13)$$

Y estudiando la distribución de probabilidad de dicha observable por medio de la entropía de Shannon

$$S(\rho) = - \sum_{i=1}^W p_i^\mathcal{O} \ln p_i^\mathcal{O} = -\text{Tr} [p_i^\mathcal{O} \ln p_i^\mathcal{O}]. \quad (3.14)$$

La cual es la definición de la entropía de Von Neumann [29]. Siguiendo la interpretación de la entropía de Shannon, la entropía de entrelazamiento cuantifica la mínima incertidumbre intrínseca al estado  $\rho$ .

Supóngase el menor entrelazamiento posible, es decir que el sistema se encuentra un un microestado específico, esto es  $p_k = 1$  para alguna  $k$ , entonces  $S = 0$ .

Por otro lado, un estado máximamente entrelazado sería aquel compuesto de todos los microestados con la misma probabilidad, para el cual  $p_i = 1/W \quad \forall i \in \{1, \dots, W\}$ , entonces

$$S = -W \frac{1}{W} \ln \left( \frac{1}{W} \right) = \ln(W). \quad (3.15)$$

Esto implica que la entropía está encerrada por los límites

$$0 \leq S(\rho) \leq \ln W \quad (3.16)$$

donde  $W$  es la dimensión de la base de microestados del sistema.

Si un sistema está conformado por dos subsistemas  $A$  y  $B$  (sistema bipartito), un estado estaría caracterizado por  $\rho_{AB}$ ; entonces se cuantifican las correlaciones cuánticas entre  $A$  y  $B$  mediante la *entropía de entrelazamiento* (EE) de  $A$  [14], definida como

$$S(\rho^A) = -\text{Tr}[\rho^A \ln \rho^A]. \quad (3.17)$$

Nótese que la EE es un funcional de estado y no una observable, pues no resulta del valor de expectación de un operador [53].

La presencia de posibles correlaciones entre  $A$  y  $B$  tiene como consecuencia que al medir una de las partes se acarrea información de la otra, por tanto

$$S(\rho_{AB}) \leq S(\rho_A) + S(\rho_B). \quad (3.18)$$

Para el caso del modelo de Bose-Hubbard en donde se tenía una dimensión D (Ec. 1.25)

$$D = \frac{(N+M-1)!}{N!(M-1)!} \quad (3.19)$$

realizar una bipartición corresponde a separar dos subsistemas de  $M/2$  sitios, manteniendo el mismo número de partículas  $N$ . Esto produce una base de dimensión  $D_{reduced}$

$$D_{reduced} = \sum_{n=0}^N \frac{(n + \frac{M}{2} - 1)!}{n! (\frac{M}{2} - 1)!}. \quad (3.20)$$

En suma, realizar el proceso de trazado sobre la matriz de densidad  $\rho^{AB}$  (Fig. 3.2a) es equivalente a realizar un mapeo de sus elementos a una matriz de dimensión reducida  $\rho^A$  (Fig. 3.2b).

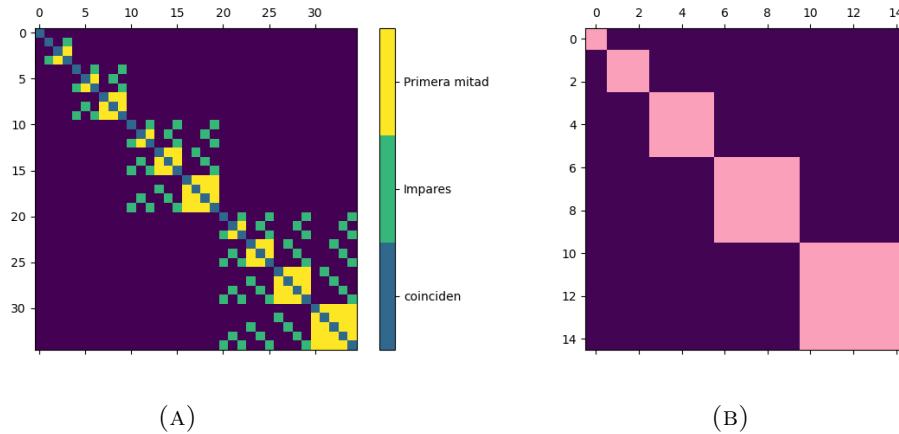


FIGURA 3.2: Estructura del mapeo, donde se muestra la estructura de los elementos de  $\rho^{AB}$  (A) que serán mapeados a  $\rho^A$  (B) para el caso  $M = N = 4$ , que corresponde a  $D = 35$  y  $D_{reduced} = 15$

Para más información sobre el proceso de trazado y un ejemplo ilustrativo véase el Apéndice A.

La medición de EE proporciona información crucial sobre el grado de entrelazamiento presente entre los subsistemas de un sistema cuántico. Una alta EE indica la presencia de un fuerte entrelazamiento entre los subsistemas, lo que implica que las propiedades cuánticas de uno de ellos están intrínsecamente ligadas a las del otro. Por otro lado, una EE baja sugiere que los subsistemas están nula o débilmente correlacionados y se comportan de manera casi independiente. La EE también puede ser utilizada para caracterizar diferentes fases de la materia, lo que es particularmente útil en la física de materia condensada, donde se estudian sistemas de muchos cuerpos, como son los modelos de Bose-Hubbard [5].

# Capítulo 4

## Métodos de solución

### 4.1. Diagonalización exacta

La diagonalización exacta es un método matemático que se utiliza para resolver un Hamiltoniano en términos de sus autovalores y autovectores [30] y es útil para entender las propiedades fundamentales del sistema. Sin embargo, la diagonalización exacta puede ser computacionalmente costosa y puede requerir un tiempo de cálculo significativo, especialmente para sistemas grandes o con condiciones de frontera complicadas. Además, la diagonalización exacta solo puede aplicarse a sistemas que cumplen ciertas condiciones, como el hecho de que el Hamiltoniano sea Hermitiano y el espacio de Hilbert sea finito.

En esta sección aplicaremos el método propuesto por Zhang y Dong en su trabajo *Exact diagonalization: The bose–hubbard model as an example* [54].

Para una red unidimensional de  $N$  átomos y  $M$  sitios el espacio de Hilbert tendrá dimensión

$$D = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!}. \quad (4.1)$$

El método de Lanczos es un algoritmo numérico utilizado para calcular los autovalores y autovectores de una matriz [55], particularmente eficiente cuando se trata de una matriz simétrica. Se basa en la idea de construir iterativamente una secuencia de vectores ortogonales que se aproximan a los autovectores de la matriz dada [54].

El método de Lanczos se utiliza a menudo para calcular los eigenvalores y autovectores de matrices muy grandes, ya que el algoritmo es relativamente eficiente computacionalmente y no requiere el cálculo de todos los elementos de la matriz.

Una base finita conveniente es la de los estados de Fock (ver Cap. 1.3), dados por

$$|\beta\rangle = |n_1^\beta, n_2^\beta, \dots, n_M^\beta\rangle \quad (4.2)$$

En esa base los operadores  $b_i$  y  $b_i^\dagger$  operan

$$b_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_M\rangle, \quad (4.3)$$

$$b_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_M\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_M\rangle, \quad (4.4)$$

con un número fijo de partículas totales se tiene la restricción  $\sum_{i=1}^M n_i = N$ .

Pudiendo finalmente escribir un estado arbitrario como

$$|\psi\rangle = \sum_{\beta}^D c_{\beta} |\beta\rangle. \quad (4.5)$$

Para construir la matriz simétrica del Hamiltoniano es necesario ordenar los estados de Fock en orden lexicográfico [56] tal que vayan del estado  $|N, 0, \dots, 0\rangle$  al  $|0, \dots, 0, N\rangle$ . Esto se consigue definiendo índices para los valores de los vectores de la base.

Supónganse dos vectores  $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$  y  $|n'_1, n'_2, \dots, n'_M\rangle$ . Existe un índice  $1 \leq k \leq M - 1$  tal que todos las ocupaciones antes del sitio  $k$  son iguales para ambos vectores. Es decir,  $n_i = n'_i \quad \forall i \ni 1 \leq i \leq k - 1$ , con  $n_k \neq n'_k$ .

Por ejemplo, para los vectores  $|131100\rangle$  y  $|131010\rangle$  el índice es  $k = 4$ , pues  $n_4 \neq n'_4$  y todos los valores anteriores coinciden.

Decimos que  $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$  es superior a  $|n'_1, n'_2, \dots, n'_M\rangle$  cuando  $n_k > n'_k$ , e inferior en caso contrario. De modo que creamos un ordenamiento como el mostrado en la tabla 4.1.

La construcción de tal ordenamiento partiendo del vector  $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$  con  $n_M < N$  es la siguiente:

$v$	$n_1$	$n_2$	$n_3$
1	3	0	0
2	2	1	0
3	2	0	1
4	1	2	0
5	1	1	1
6	1	0	2
7	0	3	0
8	0	2	1
9	0	1	2
10	0	0	3

TABLA 4.1: Ejemplo de ordenamiento lexicográfico para una base de  $N = M = 3$ .

Si  $n_i = 0 \quad \forall i \ni k + 1 \leq i \leq M - 1$ , entonces el siguiente vector es  $|n'_1, n'_2, \dots, n'_M\rangle$  con los valores

- $n'_i = n_i \quad \forall i \ni 1 \leq i \leq k - 1$
- $n'_k = n_k - 1$
- $n'_{k+1} = N - \sum_{i=1}^k n'_i \quad \text{y} \quad n'_i = 0 \text{ si } i \geq k + 2$

Entonces se puede calcular cada elemento de matriz como  $H_{uv} = \langle u | H | v \rangle$ . Debido a que en nuestro modelo de Bose-Hubbard (Ec. 1.4) sólo admite saltos a primeros vecinos, la mayoría de elementos de la matriz son cero. El patrón sparse queda como la Fig. 4.1. Calcular la parte de interacción  $H_{int}$  del Hamiltoniano de Bose-Hubbard es directo, pues son los elementos diagonales, sin embargo, calcular los elementos no nulos fuera de la diagonal no es trivial, para ello se usa la técnica de etiquetado de vectores.

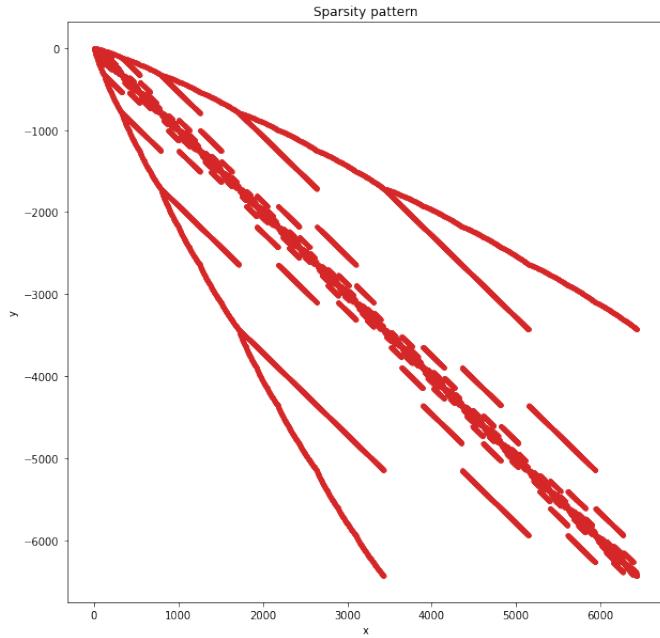


FIGURA 4.1: Patrón sparse del Hamiltoniano de Bose-Hubbard para  $N=M=8$ .

Numéricamente, tratamos el arreglo de los vectores ordenados como una nueva matriz. Supóngase que  $|v\rangle = |A_{v1}, A_{v2}, \dots, A_{vM}\rangle$  el vector en la fila  $v$ -ésima de la matriz A. Entonces se asigna una etiqueta mediante una función

$$T(v) = T(A_{v1}, A_{v2}, \dots, A_{vM}). \quad (4.6)$$

El mapeo debe ser uno a uno y computacionalmente simple. Para ello en este trabajo se usó la función

$$T(v) = \sum_{i=1}^M \sqrt{p_i} A_{vi} \quad , p_i = 100i + 3. \quad (4.7)$$

Con lo cual podemos calcular finalmente los elementos que contribuye la parte cinética  $H_{kin}$  al Hamiltoniano de Bose-Hubbard como

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j |v\rangle = \sqrt{(A_{vi} + 1) A_{vj}} |..., A_{vi} + 1, \dots, A_{vj} - 1, \dots\rangle. \quad (4.8)$$

Usando la ec. 4.7 se calcula la etiqueta del vector resultante en la ec. 4.8, de modo que se sabe a qué entrada de la matriz corresponde su coeficiente. El cálculo requiere

cuidado, puesto que algunas entradas poseen varias contribuciones. Más información sobre el proceso de trazado en el Apéndice A y un ejemplo ilustrativo en el Apéndice B

Algorítmicamente, el método de diagonalización exacta es el siguiente:

1. Elegir configuración del sistema ( $N, M, U, J$ )
2. Construir base ordenada lexicográficamente
3. Asignar etiquetas a los vectores de la base
4. Construir matriz del Hamiltoniano
5. Diagonalizar numéricamente
6. Calcular valores esperados
7. Calculo de entropía (ver Cap. 3):

- 7.1 Construir matriz de densidad  $\rho^{AB} = |\psi_{GS}\rangle \langle \psi_{GS}|$
- 7.2 Elegir bipartición (por ejemplo: dividir pares-impares, mitad-mitad, etc...)
- 7.3 realizar mapeado de  $\rho^{AB} \rightarrow \rho^A$
- 7.4 Diagonalizar  $\rho^A = W_{\rho^A} D_{\rho^A} W_{\rho^A}^{-1}$  con el fin de calcular  $\ln \rho^A = W_{\rho^A} \ln D_{\rho^A} W_{\rho^A}^{-1}$
- 7.5 Finalmente calcular  $S(\rho^A) = -\text{Tr}[\rho^A \ln \rho^A]$

El cálculo de los eigenestados y eigenvalores mediante este método escala generalmente como  $D^3$ .

## 4.2. Aproximación de campo medio

El tratamiento de campo medio es una técnica que consiste en reemplazar la interacción entre partículas por una interacción mediante el intercambio de partículas virtuales. Esto permite resolver el Hamiltoniano del sistema de manera aproximada.

Esta sección sigue la explicación que se presenta en el texto *Ultracold Atoms in Optical Lattices* [5].

Los eigenestados del Hamiltoniano de mean-field están dados por

$$|\psi_\alpha\rangle_i = \left[ \sum_{n=0}^{n_{max}} \frac{C_n^{(\alpha)}}{\sqrt{n!}} (b^\dagger)^n \right] |0\rangle_i = C_0^{(\alpha)} |0\rangle_i + C_1^{(\alpha)} |1\rangle_i + \dots + C_{n_{max}}^{(\alpha)} |n_{max}\rangle_i \quad \alpha = 0, \dots, n_{max} \quad (4.9)$$

donde  $C_i^\alpha$  es la amplitud de probabilidad de un estado  $|\psi_\alpha\rangle$  de estar en un estado  $|n\rangle$  de la base local.

Para considerar toda la red, mediante el enfoque de Gutzwiller podemos aproximar la función de onda de muchos cuerpos como

$$|\Psi_\alpha\rangle = \prod_i^M |\psi_\alpha\rangle_i. \quad (4.10)$$

El método comienza añadiendo una perturbación al operador de creación, haciendo  $\hat{b}_i \rightarrow \phi + \delta\hat{b}_i$ ,  $\langle b_i \rangle = \phi = \sum_n \sqrt{n} C_n^{(0)} C_{n-1}^{(0)}$

Donde, asumiendo el caso homogéneo,  $\phi_i = \langle \hat{b}_i \rangle = \langle \hat{b}_i^\dagger \rangle$  es el parámetro de orden superfluido.

$$\text{Y negando fluctuaciones de segundo orden } (\hat{b}_i^\dagger - \langle \hat{b}_i \rangle)(\hat{b}_j^\dagger - \langle \hat{b}_j \rangle) \approx 0$$

$$\Rightarrow \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j - (\hat{b}_i^\dagger \phi + \hat{b}_j \phi) + \phi^2 \approx 0$$

$$\Rightarrow \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j \approx \phi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) - \phi^2 \quad (4.11)$$

Dado el Hamiltoniano de Bose-Hubbard

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i \mu \hat{n}_i \quad (4.12)$$

reemplazando la aproximación de campo medio en la parte cinética resulta

$$-J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \phi(\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_j) - \phi^2 + \phi(\hat{b}_j^\dagger + \hat{b}_i) - \phi^2 \right] = -JMz \left[ \phi(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) - \phi^2 \right].$$

Donde  $z$  es el número de coordinación y representa el número de vecinos próximos de un sitio. Para una red hipercúbica  $z = 2d$ , donde  $d$  son las dimensiones cartesianas de la red.

De modo que el total resulta

$$H = -J M z \left[ \phi(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) - \phi^2 \right] + \frac{U M}{2} \hat{n}(\hat{n} - 1) - M \mu \hat{n}. \quad (4.13)$$

Y normalizando para un sitio

$$\tilde{H} = \frac{H}{M} = -J z \left[ \phi(\hat{b}^\dagger + \hat{b}) - \phi^2 \right] + \frac{U}{2} \hat{n}(\hat{n} - 1) - \mu \hat{n}. \quad (4.14)$$

Que es una matriz tridiagonal en la base de Fock.

Entonces la minimización variacional  $\langle \psi_{MF} | \hat{H} | \psi_{MF} \rangle$  corresponde a minimizar para el  $\tilde{H}$  de un solo sitio.

El valor de  $\phi$  para cada  $\frac{J}{U}$  se debe calcular de forma autoconsistente del siguiente modo:

Primeramente se construyen los operadores

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle,$$

$$\hat{b} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle,$$

$$\hat{b}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle,$$

considerando

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{n_{max}} C_n |n\rangle.$$

El algoritmo del cálculo autoconsistente es el siguiente:

1. Adivinar solución (e.g.  $\phi_0 = 0.1$ )
2. Construir  $\tilde{H}(\phi)$  de ec. 4.14
3. Resolver eigenecuación  $\tilde{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$  para encontrar estado base  $|\psi_{GS}\rangle$
4. Calcular  $\phi_{new} = \langle \psi_{GS} | \hat{b} | \psi_{GS} \rangle$

5. Calcular error  $err = |\phi_{new} - \phi_0|$
6. Redefinir  $\phi_0 = \phi_{new}$
7. Repetir desde paso 2 hasta una cota de error (e.g.  $err < 10^{-6}$ )

Típicamente utilizar  $n_{max} > N + 2$  da buenos resultados. Para el caso  $N=4$ , el calculo autoconsistente para  $\phi$  resulta 4.2

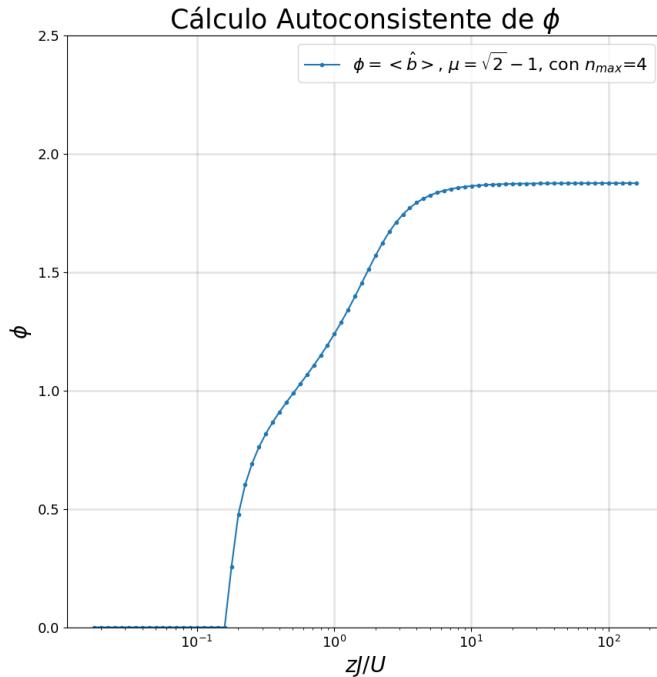


FIGURA 4.2: Cálculo autoconsistente de  $\phi$  variando  $J$  para el caso  $n_{max} = 4$  y  $\mu/U = \sqrt{2} - 1$  (valor de  $\mu/U$  representativo del punto crítico en la punta del primer lóbulo en la figura 4.3 [46]).

Iterando sobre valores de  $\mu$  y  $J$  se puede encontrar el valor de  $\phi$  para cada punto, y bajo el criterio de una cota mínima (e.g.  $\phi < 10^3$ ) uno puede distinguir las fases, dando origen al diagrama de fase introducido en la sección 1.2, que se muestra en la Fig. 4.3.

### 4.3. Método de bosones esclavos

Una de las desventajas de aplicar el método de campo medio, presentado en la sección 4.2 es que al tratar con Hamiltonianos locales se pierde información sobre las correlaciones entre sitios. Para solventar este problema es necesario hacer uso de alguna técnica que añada dichas correlaciones.

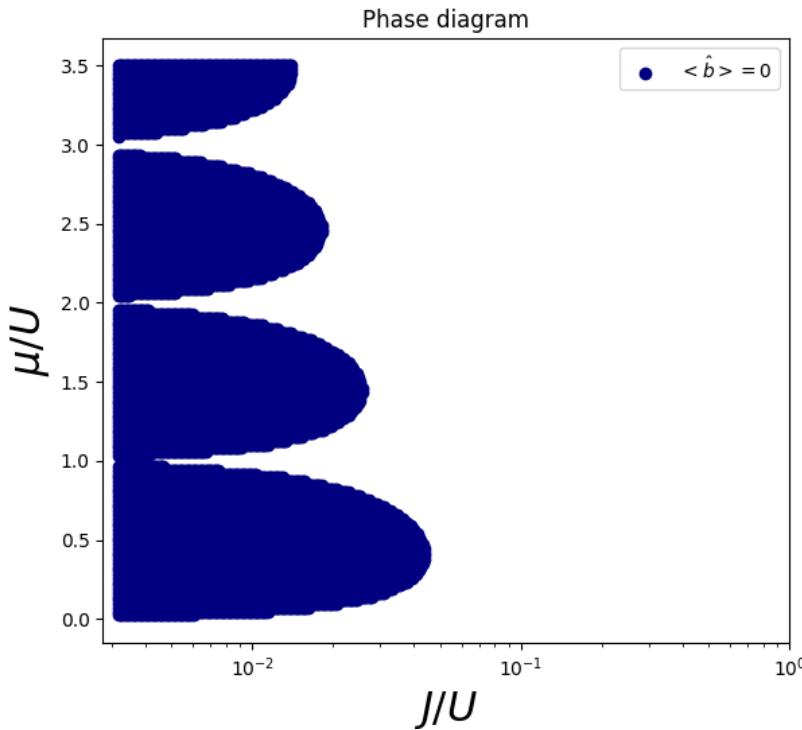


FIGURA 4.3: Diagrama de fase del modelo de Bose-Hubbard calculado a partir de la aproximación de campo medio. La zona azul representa la fase de Aislante de Mott, donde cada lóbulo corresponde a una densidad de llenado.

El método de bosones esclavos es una técnica de cálculo utilizada en la teoría de campo cuántico para describir la física de sistemas de partículas muy correlacionadas. En el método se construyen fluctuaciones alrededor de la solución de campo medio mediante operadores de bosones esclavos, alargando el espacio de Hilbert local,

$$b_i = \sum_{n=0}^{n_{max}} \sqrt{n+1} \beta_{i,n}^\dagger \beta_{i,n+1}. \quad (4.15)$$

Esta sección hace un seguimiento de la técnica utilizada en el trabajo de Frerot y Roscilde [46] para el modelo de Bose-Hubbard.

La técnica se ha utilizado en una amplia variedad de contextos en la física de partículas y la teoría cuántica de campos. Algunos ejemplos incluyen: descripción de la física de sistemas de átomos de alta energía, como los complejos de valencia mixta [57]; estudio de sistemas de átomos con campos magnéticos intensos con interacciones frustradas [58]; estudio de la física de los materiales superconductores de alta temperatura [59]; Y, nuestro

caso de estudio, sistemas de partículas muy correlacionadas como átomos fríos en redes ópticas.

El método requiere la introducción de una gran cantidad de parámetros adicionales en el formalismo de la teoría de campo. Esto puede hacer que sea difícil de implementar y puede aumentar la complejidad del cálculo.

Al utilizar el método de bosones esclavos, se hacen varias suposiciones y aproximaciones en el formalismo de la teoría de campo:

- Se supone que los esclavos bosónicos están en su estado de vacío cuando no están ocupados por un bosón.
- Se asume que los esclavos bosónicos no tienen autocorrelación entre sí.
- Se supone que los esclavos bosónicos no tienen ningún efecto dinámico en el sistema y solo se utilizan para representar los estados de vacío y de ocupación de los estados bosónicos.
- Se asume que el sistema puede ser descrito por un Hamiltoniano local.

De ese modo se hace un cambio de representación

$$\begin{array}{lll} |0\rangle & & |0\rangle = \beta_0^\dagger |vac\rangle \\ |1\rangle = b^\dagger |0\rangle & \longleftrightarrow & |1\rangle = \beta_1^\dagger |vac\rangle \\ |2\rangle = (b^\dagger)^2 |0\rangle & & |2\rangle = \beta_2^\dagger |vac\rangle \\ \vdots & & \vdots \end{array}$$

Es decir, se obtienen los estados de ocupación a partir del vacío por medio de  $n_{max} + 1$  campos bosónicos auxiliares (esclavos)

$$\beta_{i,n}^\dagger |vac\rangle_i = |n\rangle_i. \quad (4.16)$$

A su vez, estos operadores aniquilan el estado de vacío

$$\beta_{i,n} |vac\rangle_i = 0. \quad (4.17)$$

Los operadores esclavos cumplen las mismas relaciones de commutación que los operadores bosónicos físicos

$$\begin{aligned} [\beta_{i,n}, \beta_{j,m}^\dagger] &= \delta_{ij}\delta_{nm} \\ [\beta_{i,n}^\dagger, \beta_{j,m}^\dagger] &= 0 \end{aligned}$$

La ec. 4.17 puede ser comprobada a partir de estas relaciones de conmutación y ec. 4.16 de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \langle n|m \rangle &= \delta_{nm} = \langle vac | \beta_n \beta_m^\dagger | vac \rangle \\ &= \langle vac | (\delta_{nm} + \beta_m^\dagger \beta_n) | vac \rangle \\ &= \delta_{nm} \langle vac | vac \rangle + \langle vac | \beta_m^\dagger \beta_n | vac \rangle \\ &= \delta_{nm} + \langle vac | \beta_m^\dagger \beta_n | vac \rangle \\ &\Rightarrow \langle vac | \beta_m^\dagger \beta_n | vac \rangle = 0 \\ &\Rightarrow \beta_n | vac \rangle = 0 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Esto crea excitaciones bosónicas de los diferentes  $n_{max} + 1$  sabores, dando origen a los estados normalizados

$$|\underline{\Phi}\rangle = \prod_{n=0}^{n_{max}} \frac{(\beta_n^\dagger)^{m_n}}{\sqrt{m_n}} |vac\rangle .$$

Que son estados de Fock de un espacio de Hilbert extendido  $\underline{\mathcal{H}}$  que debe poseer un subespacio  $\mathcal{H} \in \underline{\mathcal{H}}$  isomorfo al espacio de Hilbert físico original. Esto se consigue aplicando la restricción

$$\sum_n \beta_{i,n}^\dagger \beta_{i,n} = \mathbf{I} \tag{4.19}$$

donde la matriz identidad  $\mathbf{I} \in \mathcal{H}$ .

El objetivo es transformar el Hamiltoniano de Bose-Hubbard (ec. 1.4, 4.12) a una forma cuadrática con el fin de aplicar el tratamiento perturbativo. Se inicia aplicando una rotación a los operadores de bosones esclavos definiendo los operadores  $\gamma$

$$\beta_{i,n} = \sum_{\alpha}^{n_{max}} f_n^{(\alpha)} \gamma_{i,\alpha} \tag{4.20}$$

$$\text{o} \quad \gamma_{i,\alpha}^\dagger = \sum_{n=0}^{n_{max}} \langle n | \psi_{\alpha} \rangle \beta_{i,n}^\dagger = \sum_{n=0}^{n_{max}} f_n^{(\alpha)} \beta_{i,n}^\dagger \tag{4.21}$$

Donde  $|\psi_\alpha\rangle$  son las soluciones de la aproximación de campo medio, dadas por ec. 4.9.

El Hamiltoniano queda entonces

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \gamma_i^\dagger \tilde{F} \gamma_i \gamma_j^\dagger \tilde{F}^* \gamma_j + h.c. \right) + \sum_i \gamma_i^\dagger \tilde{G} \gamma_i \quad (4.22)$$

Donde  $\tilde{F}$  y  $\tilde{G}$  son valores de expectación

$$\tilde{F}_{\alpha\beta} = \langle \psi_\alpha | \hat{b}^\dagger | \psi_\beta \rangle \quad (4.23)$$

$$\tilde{G}_{\alpha\beta} = \langle \psi_\alpha | \frac{U}{2} \hat{n}(\hat{n}-1) - \mu \hat{n} | \psi_\beta \rangle \quad (4.24)$$

El mínimo de energía se obtiene cuando  $\gamma_0 = \gamma_0^\dagger = 1$  y  $\gamma_{\alpha \neq 0}^\dagger \gamma_{\alpha \neq 0} = 0$

$$\Rightarrow \gamma_{0,i}^\dagger \gamma_{0,i} + \sum_{\alpha \neq 0} \gamma_{\alpha,i}^\dagger \gamma_{\alpha,i} \approx 1$$

$$\Rightarrow \gamma_{0,i}^\dagger \approx \sqrt{1 - \sum_{\alpha \neq 0} \gamma_{\alpha,i}^\dagger \gamma_{\alpha,i}} \approx 1 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq 0} \gamma_{\alpha,i}^\dagger \gamma_{\alpha,i} + \mathcal{O}(\gamma^4) \quad (4.25)$$

Entonces la representación de  $\hat{b}_i^\dagger$  queda

$$\begin{aligned} \hat{b}_i^\dagger &= \sum_{\alpha,\beta} \gamma_{i,\alpha}^\dagger \tilde{F}_{\alpha,\beta} \gamma_{i,\beta} \\ &= \gamma_{i,0}^\dagger \tilde{F}_{0,0} \gamma_{i,0} + \sum_{\alpha>0} \left( \gamma_{i,0}^\dagger \tilde{F}_{0,\alpha} \gamma_{i,\alpha} + \gamma_{i,\alpha}^\dagger \tilde{F}_{\alpha,0} \gamma_{i,0} \right) + \sum_{\alpha,\beta>0} \gamma_{i,\alpha}^\dagger \tilde{F}_{\alpha,\beta} \gamma_{i,\beta} \\ &= \tilde{F}_{0,0} \left( 1 - \sum_{\alpha>0} \gamma_{\alpha,i}^\dagger \gamma_{\alpha,i} \right) + \sum_{\alpha>0} \left( \tilde{F}_{0,\alpha} \gamma_{i,\alpha} + \gamma_{i,\alpha}^\dagger \tilde{F}_{\alpha,0} \right) + \sum_{\alpha,\beta>0} \gamma_{i,\alpha}^\dagger \tilde{F}_{\alpha,\beta} \gamma_{i,\beta} + \mathcal{O}(\gamma^3) \quad (4.26) \end{aligned}$$

En cuanto al valor  $\tilde{F}_{0,0}$  podemos conocer los siguientes límites: para MI  $\tilde{F}_{0,0} = 0$ ; para SF  $\tilde{F}_{0,0} = \phi$ .

Sustituyendo esta representación de  $\hat{b}$  (ec. 4.26) en el Hamiltoniano de campo medio  $\tilde{H}$  (ec. 4.14) resulta

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(2)} + \mathcal{O}(\gamma^3) \quad (4.27)$$

donde

$$\hat{H}^{(0)} = -N J z |\tilde{F}_{0,0}|^2 + N \tilde{G}_{0,0} \rightarrow \text{es un shift en la energía}, \quad (4.28)$$

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_i \sum_{\alpha>0} \gamma_{i,\alpha} \langle \psi_0 | \hat{H}_{MF} | \psi_\alpha \rangle + h.c. \rightarrow \text{es cero por def. de } |\psi_\alpha\rangle, \quad (4.29)$$

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{H}_{site} + \hat{H}_{hopping} + \hat{H}_{pairs}, \quad (4.30)$$

$\hat{H}^{(2)}$  esta compuesto por

$$\hat{H}_{site} = \sum_i \sum_{\alpha,\beta>0} \gamma_{i,\alpha}^\dagger A_{\alpha,\beta}^{(0)} \gamma_{i,\beta}, \quad (4.31)$$

$$\hat{H}_{hopping} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta>0} \gamma_{i,\alpha}^\dagger A_{\alpha,\beta}^{(1)} \gamma_{j,\beta}, \quad (4.32)$$

$$\hat{H}_{pairs} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta>0} \gamma_{i,\alpha} B_{\alpha,\beta} \gamma_{i,\beta} + h.c. . \quad (4.33)$$

En donde  $A$  y  $B$  están en términos de valores de expectación

$$A_{\alpha,\beta}^{(0)} = -\delta_{\alpha,\beta} \langle \psi_0 | H_{MF} | \psi_0 \rangle + \langle \psi_\alpha | H_{MF} | \psi_\beta \rangle = \delta_{\alpha,\beta} (\epsilon_\alpha - \epsilon_0) \quad (4.34)$$

$$A_{\alpha,\beta}^{(1)} = -J (\tilde{F}_{\alpha,0} \tilde{F}_{\beta,0}^* + \tilde{F}_{0,\beta} \tilde{F}_{0,\alpha}^*) \quad (4.35)$$

$$B_{\alpha,\beta} = -2J\tilde{F}_{0,\alpha}\tilde{F}_{\beta,0}^* \quad (4.36)$$

Pasando al espacio de momentos

$$\vec{\gamma}_k = \sum_i \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \vec{\gamma}_i \quad , \quad \vec{\gamma}_i = (\gamma_{i,1}, \gamma_{i,2}, \dots, \gamma_{i,n}, \dots)^T$$

Para un sistema de tamaño  $V$  (en el caso de un hipertoro d-dimensional  $V = L^{d-1} \times 2L$ )

el Hamiltoniano resulta en forma cuadrática

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} \gamma_k^\dagger & \gamma_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_k & B_k \\ B_k^* & A_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^\dagger \end{pmatrix} + \text{cte} \quad (4.37)$$

con

$$A_k = A^{(0)} + z\eta_k A^{(1)} \quad (4.38)$$

$$B_k = z\eta_k B \quad (4.39)$$

$$\eta_k = \frac{1}{z} \sum_\delta e^{ik\delta} \rightarrow \text{factor de forma.}$$

En donde  $A^{(0)}, A^{(1)}$  y  $B$  están en forma matricial

$$A^{(x)} = \begin{pmatrix} A_{1,1}^{(x)} & A_{1,2}^{(x)} & \cdots & A_{1,n_{max}}^{(x)} \\ A_{2,1}^{(x)} & A_{2,2}^{(x)} & \cdots & A_{2,n_{max}}^{(x)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n_{max},1}^{(x)} & A_{n_{max},2}^{(x)} & \cdots & A_{n_{max},n_{max}}^{(x)} \end{pmatrix} \quad x = 0, 1$$

$$B = \begin{pmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} & \cdots & B_{1,n_{max}} \\ B_{2,1} & B_{2,2} & \cdots & B_{2,n_{max}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{n_{max},1} & B_{n_{max},2} & \cdots & B_{n_{max},n_{max}} \end{pmatrix}$$

Explícitamente

$$A^{(0)} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 - \epsilon_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \epsilon_2 - \epsilon_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \epsilon_{n_{max}} - \epsilon_0 \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

$$A^{(1)} = -J \begin{pmatrix} \tilde{F}_{10}\tilde{F}_{10}^* + \tilde{F}_{01}\tilde{F}_{01}^* & \tilde{F}_{20}\tilde{F}_{10}^* + \tilde{F}_{01}\tilde{F}_{02}^* & \cdots & \tilde{F}_{n_{max}0}\tilde{F}_{10}^* + \tilde{F}_{01}\tilde{F}_{0n_{max}}^* \\ \tilde{F}_{10}\tilde{F}_{20}^* + \tilde{F}_{02}\tilde{F}_{01}^* & \tilde{F}_{20}\tilde{F}_{20}^* + \tilde{F}_{02}\tilde{F}_{02}^* & \cdots & \tilde{F}_{n_{max}0}\tilde{F}_{20}^* + \tilde{F}_{02}\tilde{F}_{0n_{max}}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{F}_{10}\tilde{F}_{n_{max}0}^* + \tilde{F}_{0n_{max}}\tilde{F}_{01}^* & \tilde{F}_{20}\tilde{F}_{n_{max}0}^* + \tilde{F}_{0n_{max}}\tilde{F}_{02}^* & \cdots & \tilde{F}_{n_{max}0}\tilde{F}_{n_{max}0}^* + \tilde{F}_{0n_{max}}\tilde{F}_{0n_{max}}^* \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

$$B = -2J \begin{pmatrix} \tilde{F}_{01}\tilde{F}_{10}^* & \tilde{F}_{02}\tilde{F}_{10}^* & \cdots & \tilde{F}_{0n_{max}}\tilde{F}_{10}^* \\ \tilde{F}_{01}\tilde{F}_{20}^* & \tilde{F}_{02}\tilde{F}_{20}^* & \cdots & \tilde{F}_{0n_{max}}\tilde{F}_{20}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{F}_{01}\tilde{F}_{n_{max}0}^* & \tilde{F}_{02}\tilde{F}_{n_{max}0}^* & \cdots & \tilde{F}_{0n_{max}}\tilde{F}_{n_{max}0}^* \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

Donde los componentes  $F_{\alpha\beta}$  estan dados por la ec. 4.23 y  $\epsilon$  son los eigenvalores del Hamiltoniano de campo medio en ec. 4.14

El factor de forma para el caso de una red hipercúbica d-dimensional es

$$\eta_k = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos k_i a \quad (4.43)$$

Donde

$$k_i = \frac{2\pi}{aL} n_i$$

$$n_i = -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2} + 1, \dots, \frac{L}{2}$$

$$i = 1, \dots, d$$

Se construye entonces la matriz

$$H_k^{(2)} = \begin{pmatrix} A_k & B_k \\ B_k^* & A_k^* \end{pmatrix}$$

En resumen, esencialmente, para construir  $\hat{H}_k^{(2)}$  se requiere:

- Eigenvalores de  $\tilde{H}$  (ec. 4.14) para construir  $A^{(0)}$  (ec. 4.40)
- Eigenvectores de  $\tilde{H}$  (ec. 4.14) para calcular  $\tilde{F}_{\alpha,\beta}$  (ec. 4.23) y construir  $A^{(1)}$  (ec. 4.41) y  $B$  (ec. 4.42)
- Factor de forma  $\eta_k$  adecuado (ec. 4.43)
- Vectores  $\vec{\gamma}_k$  mediante transformada de Fourier

### 4.3.1. Representación explícita de operadores slave-boson

El método de bosones esclavos busca hacer un cambio en la representación de los estados, tal que en un sitio se represente la ocupación física de bosones mediante una ocupación de diferentes sabores de bosones ficticios

$$|n\rangle_i \rightarrow |n^0, n^1, \dots, n^{n_{max}-1}, n^{n_{max}}\rangle$$

Creados a partir del vacío mediante  $n_{max} + 1$  operadores  $\beta_n^\dagger$ , que operan como

$$\beta_{n,i}^\dagger |vac\rangle_i = |n\rangle_i \quad (4.44)$$

Es decir

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow |1, 0, 0, 0, 0\rangle \\ |1\rangle &\rightarrow |0, 1, 0, 0, 0\rangle \\ |2\rangle &\rightarrow |0, 0, 1, 0, 0\rangle, \quad |0, 2, 0, 0, 0\rangle \\ |3\rangle &\rightarrow |0, 0, 0, 1, 0\rangle, \quad |0, 3, 0, 0, 0\rangle, \quad |0, 1, 1, 0, 0\rangle, \\ |4\rangle &\rightarrow |0, 0, 0, 0, 1\rangle, \quad |0, 4, 0, 0, 0\rangle, \quad |0, 1, 0, 1, 0\rangle, \quad |0, 2, 1, 0, 0\rangle, \quad |0, 0, 2, 0, 0\rangle \end{aligned}$$

Nótese que existen múltiples representaciones para un mismo estado de ocupación de bosones físicos más allá de la ocupación 2. Por ejemplo, la ocupación  $|3\rangle$  puede generarse

mediante 1 bosón del tipo  $\beta_3^\dagger$ , o mediante 3  $\beta_1^\dagger$ , o mediante 1  $\beta_2^\dagger$  y 1  $\beta_1^\dagger$ . Para evitar la múltiple representación se impone la restricción

$$\sum_{n=0}^{n_{max}+1} \beta_{n,i}^\dagger \beta_{n,i} = 1. \quad (4.45)$$

Lo que se traduce en que sean un producto de Kronecker de matrices  $2 \times 2$ , es decir, que por estado de ocupación sólo exista 1 sabor de bosón esclavo. Dando una representación

$$\beta_n^\dagger = \underbrace{\cdots \otimes \mathbb{I}_{n-1} \otimes \left( \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{array} \right)_n}_{n_{max}+1} \otimes \mathbb{I}_{n+1} \otimes \dots \quad (4.46)$$

**Comprobación de la construcción para  $n_{max} = 2$ .**

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha^\dagger &= \sum \langle n | \psi_\alpha \rangle \beta_n^\dagger = \underline{c_0^\alpha \beta_0^\dagger} + \underline{c_1^\alpha \beta_1^\dagger} + \underline{c_2^\alpha \beta_2^\dagger} \\ &= \underbrace{\left( \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ c_0^\alpha & 0 \end{array} \right)_0 \otimes \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_1 \otimes \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_2}_{} + \underbrace{\left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_0 \otimes \left( \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ c_1^\alpha & 0 \end{array} \right)_1 \otimes \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_2}_{} \\ &\quad + \underbrace{\left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_0 \otimes \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_1 \otimes \left( \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ c_2^\alpha & 0 \end{array} \right)_2}_{} \end{aligned} \quad (4.47)$$

De modo que aplicado al vacío  $|vac\rangle = |0, 0, 0\rangle$

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha^\dagger |vac\rangle &= \gamma_\alpha^\dagger \left[ \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_0 \otimes \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_1 \otimes \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_2 \right] \\ &= \underbrace{\left( \begin{array}{c} 0 \\ c_0^\alpha \end{array} \right)_0 \otimes \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_1 \otimes \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_2}_{} + \underbrace{\left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_0 \otimes \left( \begin{array}{c} 0 \\ c_1^\alpha \end{array} \right)_1 \otimes \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_2}_{} + \underbrace{\left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_0 \otimes \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right)_1 \otimes \left( \begin{array}{c} 0 \\ c_2^\alpha \end{array} \right)_2}_{} \\ &= \underline{c_0^\alpha |0\rangle} + \underline{c_1^\alpha |1\rangle} + \underline{c_2^\alpha |2\rangle} \\ &= \boxed{|\psi_\alpha\rangle} \end{aligned} \quad (4.48)$$

En una representación matricial completa,  $\dim(\beta_n^\dagger) = \dim(\gamma_\alpha^\dagger) = 2^{n_{max}+1}$  debido al producto de kronecker. para el caso  $n_{max} = 2$  las matrices se ven como

$$\beta_0^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

$$\beta_1^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.50)$$

$$\gamma_\alpha^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_2^\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_1^\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_1^\alpha & c_2^\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_0^\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_0^\alpha & 0 & 0 & c_2^\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_0^\alpha & 0 & c_1^\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_0^\alpha & 0 & c_1^\alpha & c_2^\alpha & 0 \end{pmatrix} \quad (4.52)$$

### 4.3.2. Aproximación de Bogoliubov sobre la teoría efectiva de bosones esclavos

Este método consiste en aproximar el Hamiltoniano del sistema mediante una parte cuadrática y una parte no cuadrática y diagonalizar la parte cuadrática utilizando técnicas de álgebra lineal. La parte no cuadrática se puede tratar de manera perturbativa.

Uno de los límites más importantes de la aproximación de Bogoliubov es el límite de baja densidad y alta temperatura. En este régimen, el sistema se puede modelar como un gas de bosones y el método de Bogoliubov puede utilizarse para calcular las propiedades del sistema. Sin embargo, a medida que la densidad del sistema aumenta y la temperatura disminuye, el método de Bogoliubov puede no dar resultados precisos debido a la falta de consideración de efectos de correlación.

Además, el método de Bogoliubov también puede no ser válido en sistemas con condiciones de frontera complicadas, como sistemas en geometrías no uniformes o con bordes duros.

Ya que el Hamiltoniano obtenido en ec. 4.37 es cuadrático, para resolverlo se puede aplicar la transformación de Bogoliubov para cada valor de  $k$ , definida por la matriz  $T_k$

$$T_k^\dagger H_k^{(2)} T_k = \Omega_k, \quad (4.53)$$

donde

$$\Omega_k = \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{k}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\omega_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (4.54)$$

Siendo  $\omega_{\mathbf{k}} = \text{diag}(\omega_{k,1}, \omega_{k,2}, \dots, \omega_{k,n_{max}})$  una matriz diagonal de dimensión  $n_{max} \times n_{max}$  conteniendo las energías de excitación.

La transformación  $T_k$  se encuentra mediante la diagonalización de  $\boldsymbol{\Gamma}H_k^{(2)}$ , donde

$$\boldsymbol{\Gamma} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n_{max}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I}_{n_{max}} \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

La transformación es tal que

$$\begin{pmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = T_k \begin{pmatrix} \lambda_k \\ \lambda_{-k}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.56)$$

### 4.3.3. Entropía de entrelazamiento bajo el formalismo de bosones esclavos

La matriz de densidad reducida  $\rho^A$  tiene un Hamiltoniano de entrelazamiento asociado tal que

$$\rho^A = e^{-H_A}. \quad (4.57)$$

Habiendo transformado el Hamiltoniano de Bose-Hubbard a una forma cuadrática (ec. 4.37), el teorema de Wick asegura que  $H_A$  también tendrá forma cuadrática, por lo cual se puede diagonalizar mediante una transformación de Bogoliubov en

$$H_A = \sum_{k_y,p} \lambda_{k_y,p} d_{k_y,p}^\dagger d_{k_y,p}. \quad (4.58)$$

Tal espectro caracterizado por  $\lambda_{k_y,p}$  puede ser calculado mediante las matrices de correlación de un cuerpo [45, 46, 60]  $C = \langle \gamma_a^\dagger \gamma_b \rangle$  y  $F = \langle \gamma_a \gamma_b \rangle$ . Para la elección de un subsistema específico resulta útil calcular el espectro de entrelazamiento a partir de la matriz de correlación  $C_A$

$$C_A = \sum_{r,r'} C_{r,r'} |r\rangle \langle r'| = \begin{pmatrix} C_A^{(11)} & C_A^{(12)} \\ C_A^{(21)} & C_A^{(22)} \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

donde

$$C_{r,r'} = \langle (\vec{\gamma}_r \vec{\gamma}_r^\dagger)^T (\vec{\gamma}_{r'}^\dagger \vec{\gamma}_{r'}) \rangle = \left\langle \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_r^T \vec{\gamma}_{r'}^\dagger & \vec{\gamma}_r^T \vec{\gamma}_{r'} \\ (\vec{\gamma}_r^\dagger)^T \vec{\gamma}_{r'}^\dagger & (\vec{\gamma}_r^\dagger)^T \vec{\gamma}_{r'} \end{pmatrix} \right\rangle. \quad (4.60)$$

De modo que se define cada bloque como

$$C_A^{(11)} = \sum_{r,r' \in A} \langle \vec{\gamma}_r^T \vec{\gamma}_{r'}^\dagger \rangle |r\rangle \langle r'| \quad (4.61)$$

$$C_A^{(12)} = \sum_{r,r' \in A} \langle \vec{\gamma}_r^T \vec{\gamma}_{r'} \rangle |r\rangle \langle r'| \quad (4.62)$$

$$C_A^{(21)} = \sum_{r,r' \in A} \langle (\vec{\gamma}_r^\dagger)^T \vec{\gamma}_{r'}^\dagger \rangle |r\rangle \langle r'| \quad (4.63)$$

$$C_A^{(22)} = \sum_{r,r' \in A} \langle (\vec{\gamma}_r^\dagger)^T \vec{\gamma}_{r'} \rangle |r\rangle \langle r'| \quad (4.64)$$

Considérese que el subsistema  $A$  es medio toro. Enfocándonos en ec. 4.61, se realiza la transformada de Fourier sobre el eje y resulta

$$C_A^{(11)} = \sum_{x,x' \in A_x} \sum_{k_y \in B^{<0}} C_{k_y}^{(11)}(x, x') |x, k_y\rangle \langle x', k_y|. \quad (4.65)$$

Donde se definió la matrix de  $2n_{max} \times 2n_{max}$

$$C_{k_y}^{(11)}(x, x') = \langle \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x,k_y}^T \\ \vec{\gamma}_{x,k_y+\pi}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x',k_y}^\dagger & \vec{\gamma}_{x',k_y+\pi}^\dagger \end{pmatrix} \rangle = \langle \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x,k_y}^T \vec{\gamma}_{x',k_y}^\dagger & \vec{\gamma}_{x,k_y}^T \vec{\gamma}_{x',k_y+\pi}^\dagger \\ \vec{\gamma}_{x,k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',k_y}^\dagger & \vec{\gamma}_{x,k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',k_y+\pi}^\dagger \end{pmatrix} \rangle \quad (4.66)$$

como

$$\vec{\gamma}_r = (\gamma_{r,1}, \dots, \gamma_{r,n_{max}}). \quad (4.67)$$

Debido a que el sistema es una red 2-dimensional cada elemento del vector de operadores está dado por

$$\gamma_{r,\alpha} = \gamma_{x,\alpha} \otimes \gamma_{y,\alpha} \quad (4.68)$$

De modo que  $\gamma_{r,\alpha}^\dagger$  crea el estado  $|\psi_\alpha\rangle$  en el sitio r a partir del vacío, de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \gamma_{r,\alpha}^\dagger |vac\rangle_r &= (\gamma_{x,\alpha}^\dagger \otimes \gamma_{y,\alpha}^\dagger) (|vac\rangle_x \otimes |vac\rangle_y) \\ &= \gamma_{x,\alpha}^\dagger |vac\rangle_x \otimes \gamma_{y,\alpha}^\dagger |vac\rangle_y \\ &= |\psi_\alpha\rangle_x \otimes |\psi_\alpha\rangle_y \\ &= |\psi_\alpha\rangle_r \end{aligned} \quad (4.69)$$

Entonces un bloque de ec. 4.66 se calcula como

$$\begin{aligned}
\vec{\gamma}_{x,k_y}^T \vec{\gamma}_{x',k_y}^\dagger &= \begin{pmatrix} \gamma_{(x,k_y),1} \\ \gamma_{(x,k_y),2} \\ \vdots \\ \gamma_{(x,k_y),n_{max}} \end{pmatrix} \otimes \left( \gamma_{(x',k_y),1}^\dagger, \gamma_{(x',k_y),2}^\dagger, \dots, \gamma_{(x',k_y),n_{max}}^\dagger \right) \\
&= \begin{pmatrix} \gamma_{(x,k_y),1} \gamma_{(x',k_y),1}^\dagger & \gamma_{(x,k_y),1} \gamma_{(x',k_y),2}^\dagger & & \\ \gamma_{(x,k_y),2} \gamma_{(x',k_y),1}^\dagger & \gamma_{(x,k_y),2} \gamma_{(x',k_y),2}^\dagger & & \vdots \\ & \ddots & & \\ & & \gamma_{(x,k_y),n_{max}} \gamma_{(x',k_y),n_{max}}^\dagger & \end{pmatrix}, \tag{4.70}
\end{aligned}$$

que tiene dimensión  $n_{max} \times n_{max}$ , con lo cual se construye ec. 4.60. Haciendo un cálculo similar para los otros bloques de  $C_{k_y}(x, x')$

$$C_{k_y}^{(12)}(x, x') = \langle \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x,k_y}^T \\ \vec{\gamma}_{x,k_y+\pi}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x',-k_y} & \vec{\gamma}_{x',-k_y+\pi} \end{pmatrix} \rangle = \langle \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x,k_y}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y} & \vec{\gamma}_{x,k_y}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y+\pi} \\ \vec{\gamma}_{x,k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y} & \vec{\gamma}_{x,k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y+\pi} \end{pmatrix} \rangle \tag{4.71}$$

$$C_{k_y}^{(21)}(x, x') = \langle \begin{pmatrix} [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y}^T \\ [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y+\pi}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x',k_y}^\dagger & \vec{\gamma}_{x',k_y+\pi}^\dagger \end{pmatrix} \rangle = \langle \begin{pmatrix} [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y}^T \vec{\gamma}_{x',k_y}^\dagger & [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y}^T \vec{\gamma}_{x',k_y+\pi}^\dagger \\ [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',k_y}^\dagger & [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',k_y+\pi}^\dagger \end{pmatrix} \rangle \tag{4.72}$$

$$C_{k_y}^{(22)}(x, x') = \langle \begin{pmatrix} [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y}^T \\ [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y+\pi}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x',-k_y} & \vec{\gamma}_{x',-k_y+\pi} \end{pmatrix} \rangle = \langle \begin{pmatrix} [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y} & [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y+\pi} \\ [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y} & [\vec{\gamma}^\dagger]_{x,-k_y+\pi}^T \vec{\gamma}_{x',-k_y+\pi} \end{pmatrix} \rangle \tag{4.73}$$

Se construye entonces la matriz de dimensión  $4n_{max} \times 4n_{max}$ .

$$C_{k_y}(x, x') = \begin{pmatrix} C_{k_y}^{(11)}(x, x') & C_{k_y}^{(12)}(x, x') \\ C_{k_y}^{(21)}(x, x') & C_{k_y}^{(22)}(x, x') \end{pmatrix} \tag{4.74}$$

(Ver Apéndice C para más detalles sobre la estructura de ec. 4.74)

Que se calcula para cada par de puntos  $(x, x')$  en el subsistema  $\mathcal{A}$ , que siendo medio toro, en  $x$  el subespacio se define como  $\mathcal{A}_x = \{1, 2, \dots, L/2\}$ , creando la matriz de

dimensión  $2Ln_{max} \times 2Ln_{max}$

$$C_{k_y} = \sum_{x, x' \in \mathcal{A}_x} C_{k_y}(x, x') |x\rangle \langle x'|. \quad (4.75)$$

A su vez, ec. 4.74 se calcula para cada  $k_y$  en el subsistema  $\mathcal{B}_y^{<0} = \{\frac{2\pi}{L}n | n = -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2}, \dots, 0\}$ , resultando en la matriz de correlación completa

$$C_{\mathcal{A}} = \sum_{k_y \in \mathcal{B}_y^{<0}} C_{k_y} |k_y\rangle \langle k_y| \quad (4.76)$$

Nótese que la dimensión de ec. 4.76 es  $L^2 n_{max} \times L^2 n_{max}$ , sin embargo, debido a que su estructura es diagonal en base de  $|k_y\rangle$ , su diagonalización equivale a la diagonalización de ec. 4.75 para cada  $k_y$ , que es de dimensión inferior.

La matriz diagonal resultante es

$$\mathbf{n} = \sum_{k_y \in \mathcal{B}_y^{<0}} n_{k_y} |k_y\rangle \langle k_y|. \quad (4.77)$$

Que se relaciona con el espectro de entredamiento mediante

$$n_{k_y}^{(i)} = \frac{1}{e^{\lambda_{k_y}^{(i)}} - 1} \quad (4.78)$$

Pudiendo calcular la entropía de entrelazamiento

$$S_{ent} = \sum_{\alpha} [(1 + n_{\alpha}) \ln (1 + n_{\alpha}) - n_{\alpha} \ln (n_{\alpha})]. \quad (4.79)$$

Donde  $\alpha$  es el índice del modo de entrelazamiento.

El proceso de cálculo, entonces, es el siguiente.

1. Se escoge una  $k_y$  específica
2. Se soluciona el Hamiltoniano cuadrático (ec. 4.37), con lo que se encuentra  $|\psi_0\rangle$
3. Con el estado base se calculan los elementos de los bloques de ec. 4.74 por medio de los valores esperados, según sea el caso. Por ejemplo, para el primer bloque de  $C_{k_y}^{(11)}$  (ec. 4.66), dado por ec. 4.70, hace falta calcular el valor esperado de

$$\langle \psi_0 | \gamma_{(x, k_y), \alpha} \gamma_{(x', k_y), \beta}^\dagger | \psi_0 \rangle$$

4. Se construye la matriz  $C_{k_y}$  haciendo el cálculo para todos los pares  $x, x' \in \mathcal{A}_x$
5. Se diagonaliza  $C_{k_y}$  mediante una transformación de Bogoliubov  $T_{k_y}^\dagger C_{k_y} T_{k_y} = \mathbf{n}_{k_y}$

# Capítulo 5

## Resultados

En este capítulo se presentan los resultados del cálculo de entropía de entrelazamiento para los dos modelos presentados. En la sección 5.1 para modelo de Bose-Hubbard, y en la sección 5.2 el modelo extendido dentro de una cavidad óptica (ver Cap. 2).

El sistema tratado es el de una red unidimensional con condiciones periódicas, es decir, un anillo cerrado. Los sitios de red se enumeran, sin embargo, es necesario notar la simetría del sistema, que vuelve indistinta la elección del sitio de inicio (ver Fig. 5.1).

Se realizaron dos diferentes tipos de bipartición, midiendo sobre la mitad del sistema (Fig. 5.2) y midiendo sobre los sitios par (Fig. 5.3). Nótese que la simetría mencionada hace indistinguible medir sobre la primera o segunda mitad, así como entre pares e impares.

Los cálculos numéricos se realizaron para sistemas de densidad unitaria, esto es,  $N = M$ . Para tamaños pares de 4, 6 y 8.

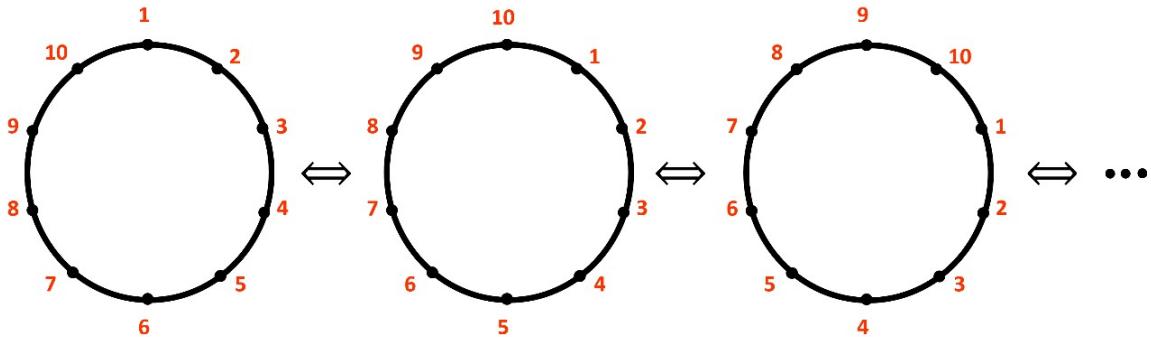


FIGURA 5.1: equivalencia de enumeración de sitios debido a la simetría del sistema.

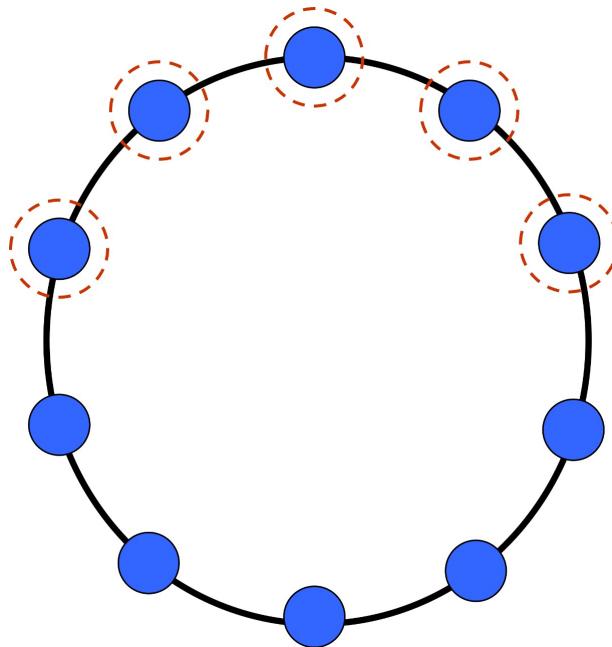


FIGURA 5.2: Bipartición de la red unidimensional periódica en dos mitades.

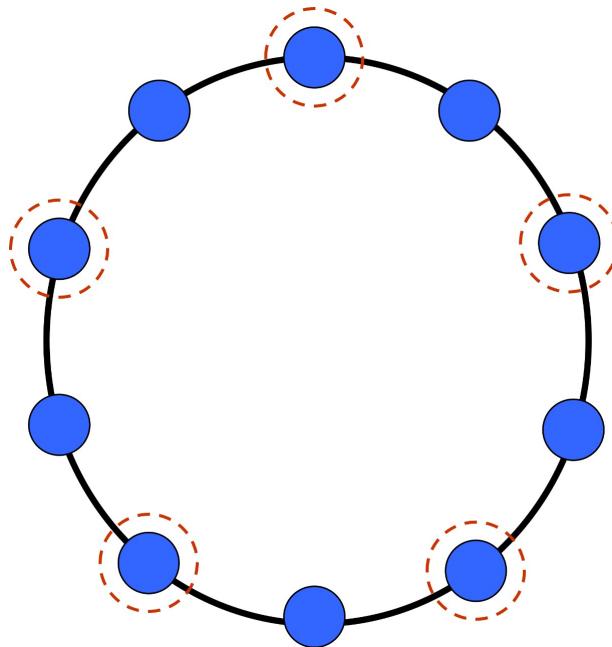


FIGURA 5.3: Bipartición de la red unidimensional periódica en sitios pares e impares.

## 5.1. Entropía de entrelazamiento en modelo de Bose-Hubbard

En el capítulo 4.1 se presentó el algoritmo que soluciona numéricamente el Hamiltoniano de Bose-Hubbard dados los valores  $U$  y  $J$ . Con el fin de inspeccionar la transición

de fase entre el régimen de Asilante de Mott (MI) a superfluido (SF), es necesario iterar tales pasos recorriendo el ratio  $J/U$ .

Cada valor de  $J/U$  tiene su correspondiente estado base  $|\psi_{GS}\rangle$ , con el cual se calculan los valores esperados que permiten caracterizar las fases del modelo.

Se debe además elegir la bipartición del sistema, bajo la cual se realizará el proceso de trazado que permite el cálculo de la entropía de enredamiento  $S_{ent}$ .

El algoritmo corregido es el siguiente (Ver Apéndice D para consultar código)

1. Elegir configuración del sistema ( $N, M$ )
2. Construir base ordenada lexicográficamente
3. Asignar etiquetas a los vectores de la base
4. Iterar en un rango de  $J/U$ :
  - 4.1 Construir matriz del Hamiltoniano
  - 4.2 Diagonalizar numéricamente y obtener estado base  $|\psi_{GS}\rangle$
  - 4.3 Calcular valores esperados
  - 4.4 Cálculo de entropía:
    - 4.4.1 Construir matriz de densidad  $\rho^{AB} = |\psi_{GS}\rangle \langle \psi_{GS}|$
    - 4.4.2 Elegir bipartición (por ejemplo: dividir pares-impares, mitad-mitad, etc...)
    - 4.4.3 Realizar mapeado de  $\rho^{AB} \rightarrow \rho^A$
    - 4.4.4 Diagonalizar  $\rho^A = W_{\rho^A} D_{\rho^A} W_{\rho^A}^{-1}$  con el fin de calcular  $\ln \rho^A = W_{\rho^A} \ln D_{\rho^A} W_{\rho^A}^{-1}$
    - 4.4.5 Finalmente calcular  $S(\rho^A) = -\text{Tr}[\rho^A \ln \rho^A]$

En este trabajo se escogieron 2 biparticiones distintas entre los sitios de la red: mitad-mitad y pares-impares (Figs. 5.1 y 5.2). Se realizó el cálculo para diferentes tamaños de red ( $M = 4, 6, 8$ ).

Las fluctuaciones  $\Delta n_i$  y la ocupación media  $\langle n_i \rangle$  fueron calculadas para dos sitios distintos  $i = 1, 2$ . Calculadas como

$$\langle n_i \rangle = \langle \psi_{GS} | n_i | \psi_{GS} \rangle$$

,

$$\Delta n_i = \sqrt{\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2}$$

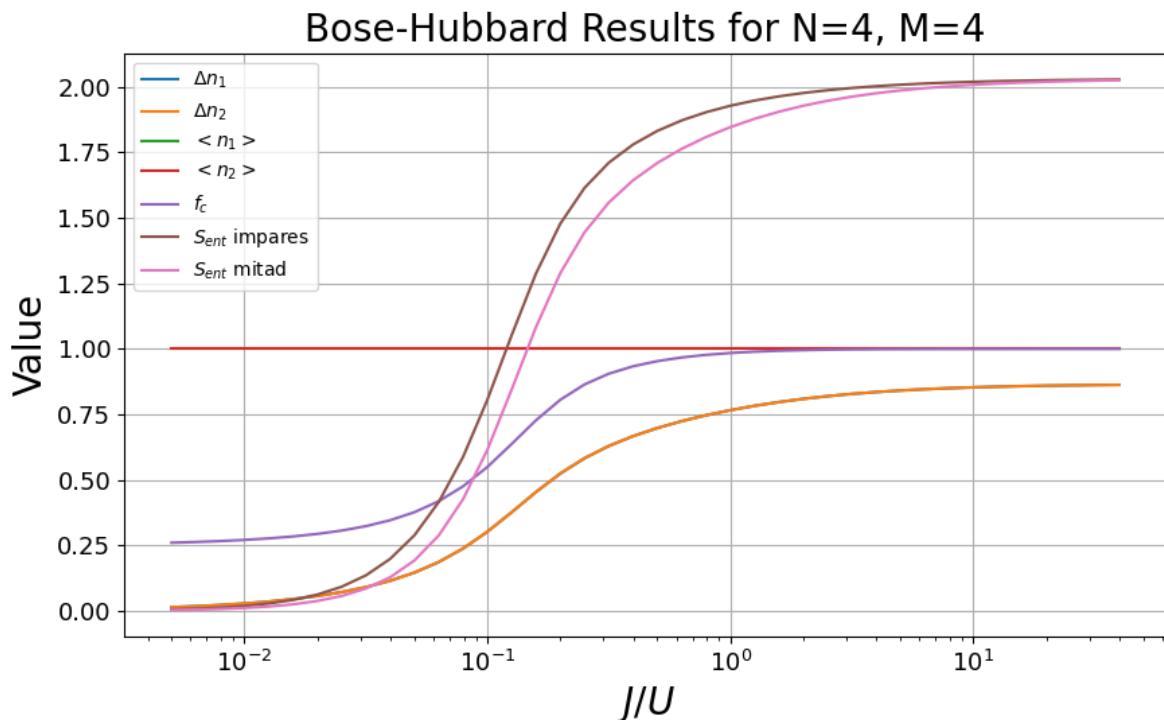


FIGURA 5.4: Resultados por diagonalización exacta del modelo de Bose-Hubbard para 4 bosones en 4 sitios.

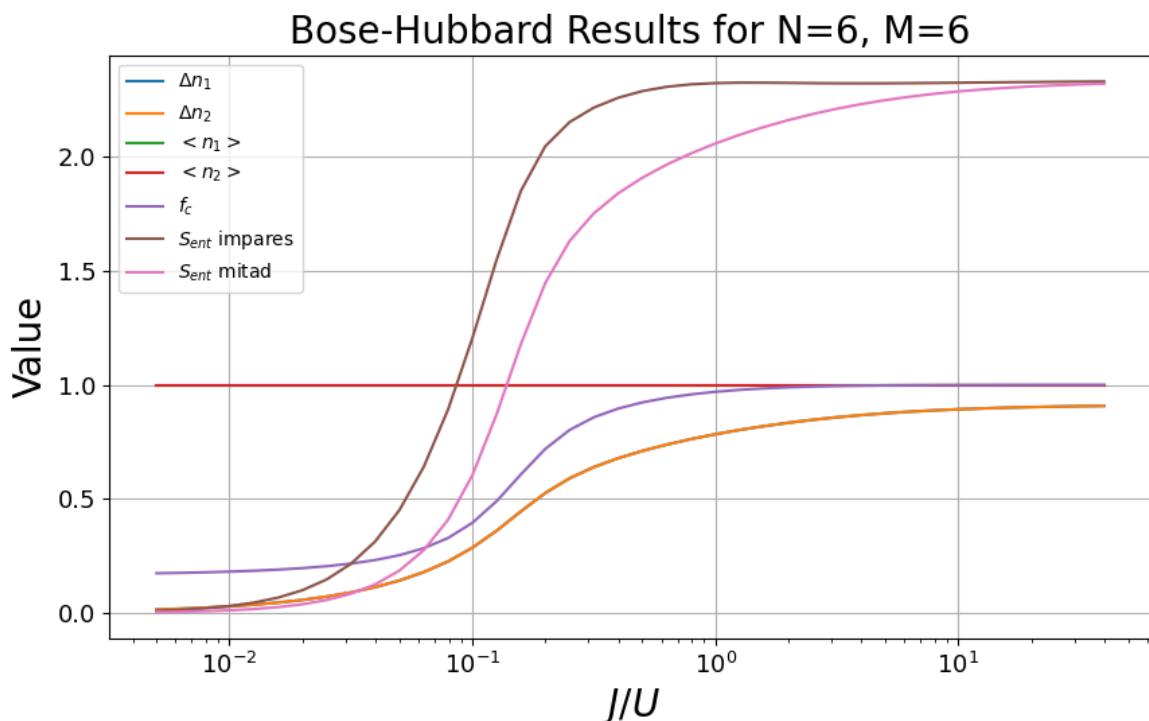


FIGURA 5.5: Resultados por diagonalización exacta del modelo de Bose-Hubbard para 6 bosones en 6 sitios.

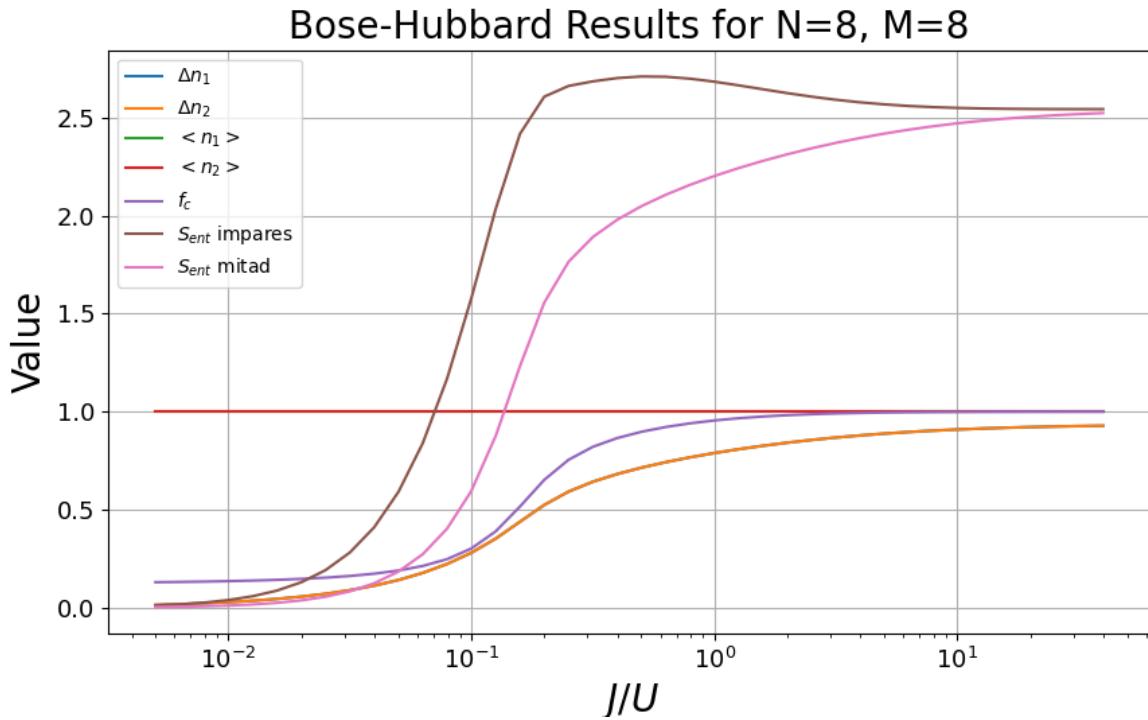


FIGURA 5.6: Resultados por diagonalización exacta del modelo de Bose-Hubbard para 8 bosones en 8 sitios.

## 5.2. Entropía de entrelazamiento en modelo extendido con cavidad

Para realizar el cálculo para el modelo extendido de Bose-Hubbard visto en el Cap. 2 el algoritmo es el mismo, añadiendo al Hamiltoniano el término de la cavidad

$$H^{\text{cav}} = \frac{g_{\text{eff}}}{M} J_D^2 \hat{D}_-^2 \quad (5.1)$$

con

$$\hat{D}_- = \sum_{i=1}^M (-1)^i n_i. \quad (5.2)$$

Acorde a los arreglos típicos [3], se escogió una intensidad de interacción  $g_{\text{eff}} J_D^2 / U = -4$ .

Además de añadir el cálculo de  $\mathcal{O}_{DW}$  en el paso 4.3 del algoritmo presentado en la sección 5.1.

Sin embargo, resulta que el estado base del modelo extendido de Bose-Hubbard es degenerado en la fase de MI, resultando la gráfica 5.7.

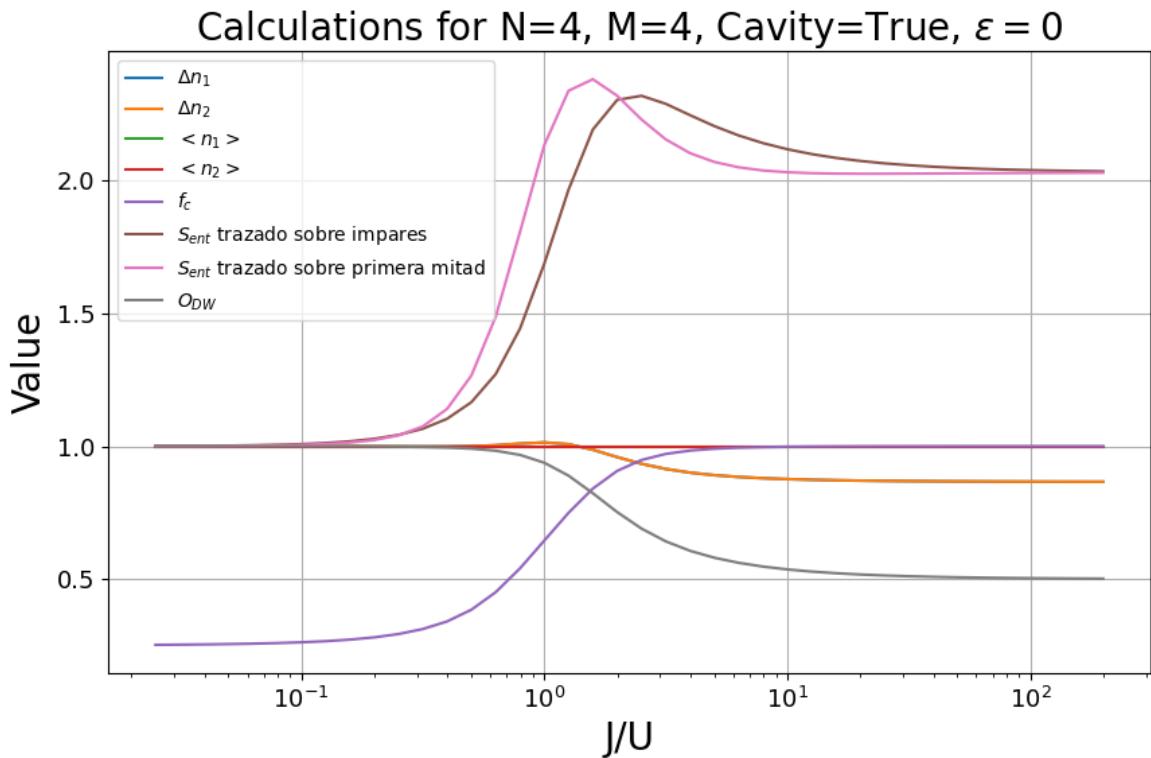


FIGURA 5.7: Resultados por diagonalización exacta del modelo extendido con interacción de cavidad óptica de alta reflectancia para 4 bosones en 4 sitios previo al tratamiento de la degeneración.

Por lo cual fue necesario añadir al Hamiltoniano un término perturbativo que rompa la simetría del sistema en  $lim \rightarrow 0$ , pero mantenga el estado degenerado si  $\epsilon = 0$ . En este trabajo se usó

$$H^{\text{pert}} = \epsilon \hat{D}_- \quad (5.3)$$

con  $\epsilon = 10^{-4}$ .

Habiendo hecho dicha corrección resultan las gráficas 5.8-5.10.

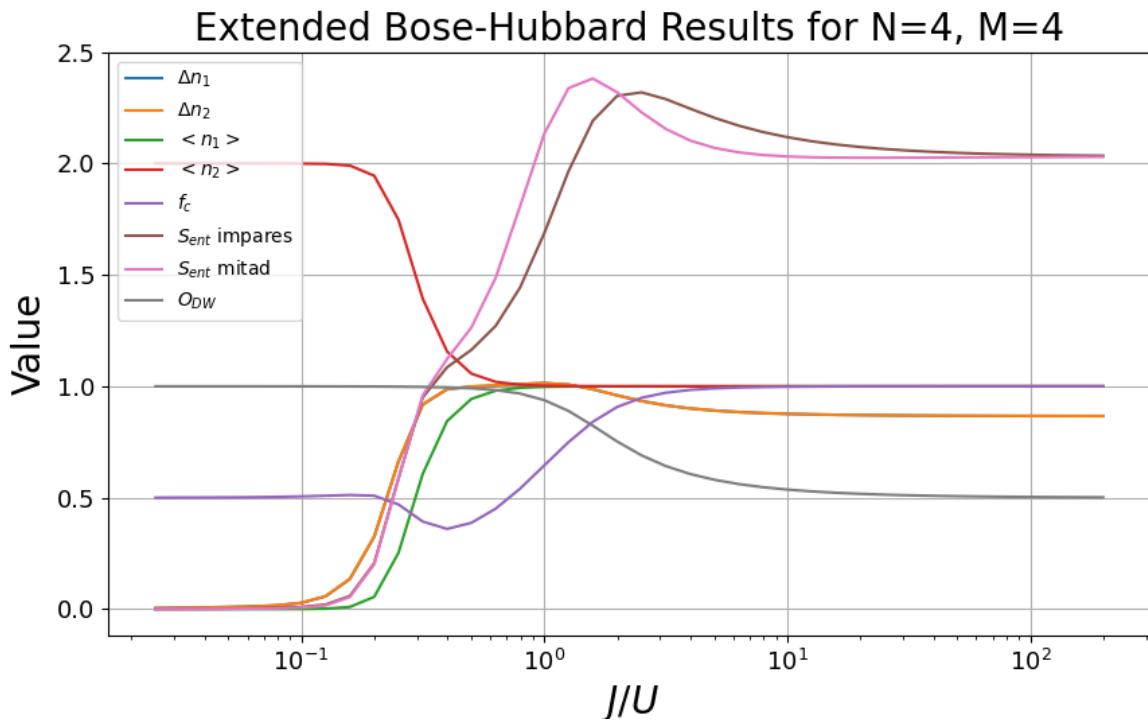


FIGURA 5.8: Resultados por diagonalización exacta del modelo extendido con interacción de cavidad óptica de alta reflectancia para 4 bosones en 4 sitios.

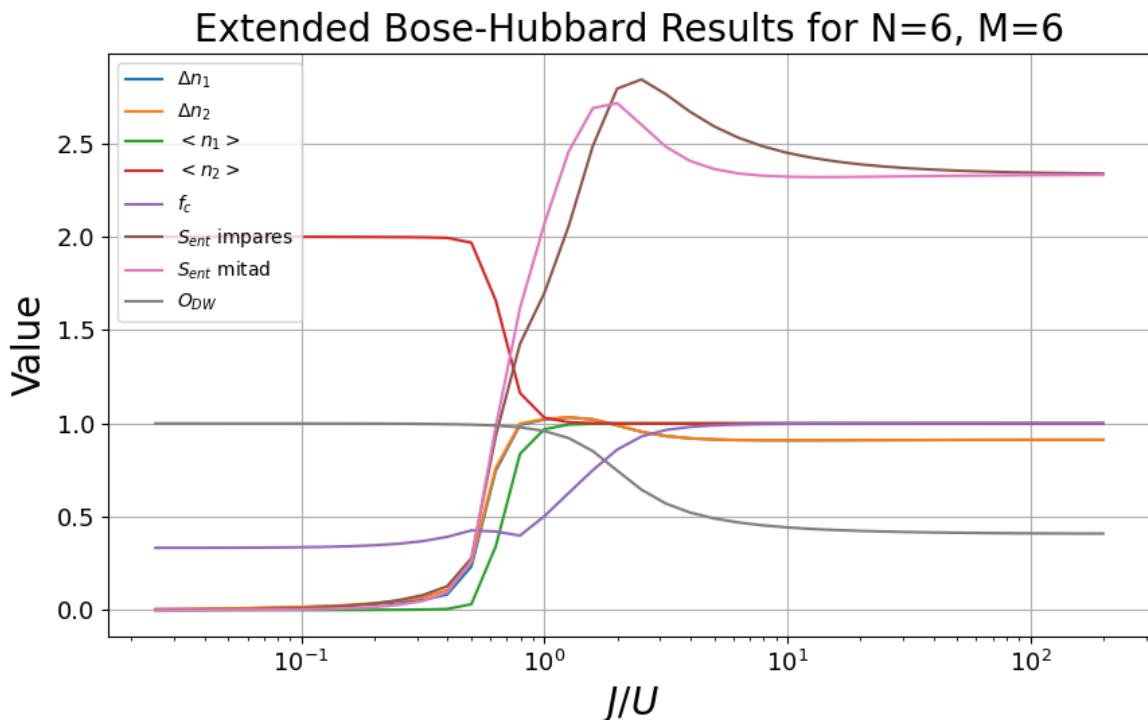


FIGURA 5.9: Resultados por diagonalización exacta del modelo extendido con interacción de cavidad óptica de alta reflectancia para 6 bosones en 6 sitios.

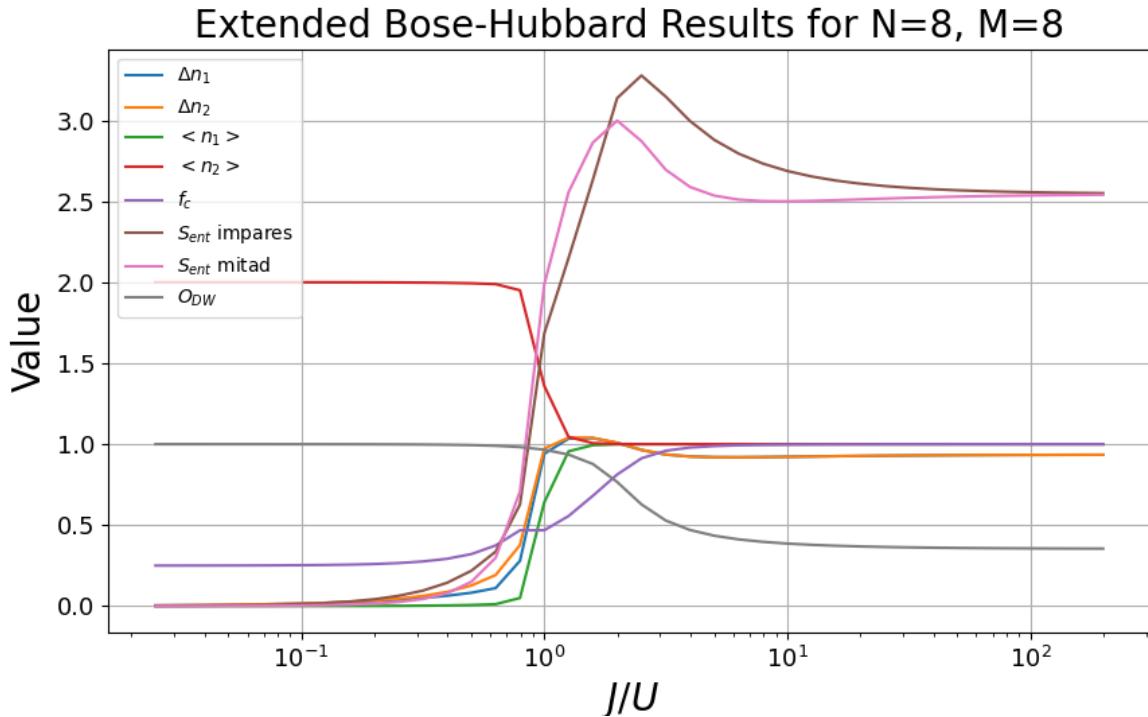


FIGURA 5.10: Resultados por diagonalización exacta del modelo extendido con interacción de cavidad óptica de alta reflectancia para 8 bosones en 8 sitios.

La convergencia de algunas de las variables es dependiente del tamaño. Pueden además presentar picos máximos o mínimos para el modelo extendido con interacción de cavidad. Tales resultados son condensados en las tablas 5.1-5.3, que sirven también de comparativa entre el modelo de BH y el extendido.

Resultados $\Delta n_i$					
Sistema	$J/U \rightarrow 0$		$J/U \rightarrow \infty$		Extremo $\Delta n_i(J/U)$ en EBH
	BH	EBH	BH	EBH	
$N = M = 4$	0	0	0.86	0.87	$\Delta n_i(1.00) = 1.01$ (MAX)
$N = M = 6$	0	0	0.91	0.91	$\Delta n_i(1.26) = 1.03$ (MAX)
$N = M = 8$	0	0	0.93	0.93	$\Delta n_i(1.56) = 1.04$ (MAX)

TABLA 5.1: Resultados de  $\Delta n_i$  para modelo de Bose-Hubbard (BH) y Bose-Hubbard extendido con interacción de cavidad (EBH). Se muestran las convergencias en regímenes MI y SF, así como los valores de sus picos máximos. Los resultados concuerdan para  $i = 1, 2$

<b>Sistema</b>	<b>Resultados <math>f_c</math></b>			
	$J/U \rightarrow 0$		$J/U \rightarrow \infty$	<b>Extremo <math>f_c(J/U)</math> en EBH</b>
BH	EBH	BH	EBH	
$N = M = 4$	0.26	0.5	1	1
$N = M = 6$	0.17	0.33	1	1
$N = M = 8$	0.13	0.25	1	1

TABLA 5.2: Resultados de  $f_c$  para modelo de Bose-Hubbard (BH) y Bose-Hubbard extendido con interacción de cavidad (EBH). Se muestran las convergencias en regímenes MI y SF, así como un pico mínimo.

<b>Sistema</b>	<b>Resultados <math>S_{ent}</math> con bipartición pares-impares</b>			
	$J/U \rightarrow 0$		$J/U \rightarrow \infty$	<b>Extremo <math>S_{ent}(J/U)</math> en EBH</b>
BH	EBH	BH	EBH	
$N = M = 4$	0	0	2.03	$S_{ent}(2.51) = 2.32$ (MAX)
$N = M = 6$	0	0	2.33	$S_{ent}(2.51) = 2.84$ (MAX)
$N = M = 8$	0	0	2.54	$S_{ent}(2.51) = 3.27$ (MAX)

<b>Sistema</b>	<b>Resultados <math>S_{ent}</math> con bipartición mitad-mitad</b>			
	$J/U \rightarrow 0$		$J/U \rightarrow \infty$	<b>Extremo <math>S_{ent}(J/U)</math> en EBH</b>
BH	EBH	BH	EBH	
$N = M = 4$	0	0	2.02	$S_{ent}(1.58) = 2.38$ (MAX)
$N = M = 6$	0	0	2.32	$S_{ent}(2.00) = 2.72$ (MAX)
$N = M = 8$	0	0	2.52	$S_{ent}(2.00) = 2.99$ (MAX)

TABLA 5.3: Resultados de  $S_{ent}$  para modelo de Bose-Hubbard (BH) y Bose-Hubbard extendido con interacción de cavidad (EBH). Se muestran las convergencias en regímenes MI y SF, así como los valores de sus picos máximos.

### 5.3. Método de bosones esclavos aplicado

A partir de soluciones numéricas de campo medio se utilizaron las ecuaciones 4.34-4.36 para construir la matriz  $\hat{H}_k^{(2)}$

$$\hat{H}_k^{(2)} = \begin{pmatrix} A_k & B_k \\ B_k^* & A_k^* \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

que conforma el Hamiltoniano cuadrático (4.37)

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} \gamma_k^\dagger & \gamma_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_k & B_k \\ B_k^* & A_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Para la cual se encontró la transformación adecuada  $T_k$  mediante la diagonalización de  $\Gamma \hat{H}_k^{(2)}$  (ec. 4.55), que diagonaliza  $\hat{H}_k^{(2)}$  (ec. 4.53) tal que

$$T_k^\dagger \hat{H}_k^{(2)} T_k = \begin{pmatrix} \omega_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\omega_k \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Con lo que se puede inspeccionar el espectro para diferentes valores de  $J, U$  y  $\mu$  a lo largo de toda la primera zona de Brilloin  $k_y \in [-\pi, \pi]$ .

### Espectro para fase MI

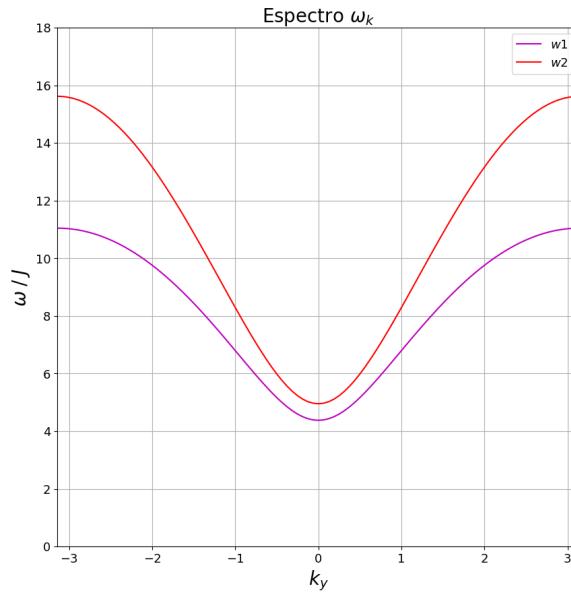


FIGURA 5.11: Espectro físico del Hamiltoniano de Bose-Hubbard para MI. Se calculó con valores  $Jz/U = 0.15$ ,  $\mu/U = \sqrt{2} - 1$

### Espectro para fase SF

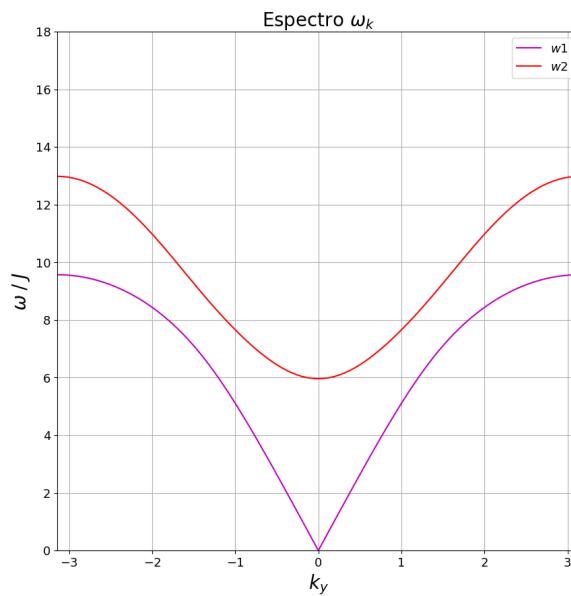


FIGURA 5.12: Espectro físico del Hamiltoniano de Bose-Hubbard para MI. Se calculó con valores  $Jz/U = 0.2$ ,  $\mu/U = \sqrt{2} - 1$

### Espectro para transición tipo O(2)

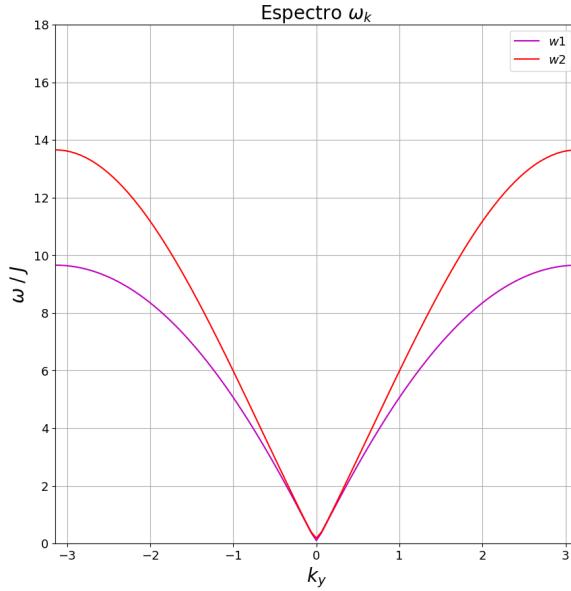


FIGURA 5.13: Espectro físico del Hamiltoniano de Bose-Hubbard para MI. Se calculó con valores  $Jz/U = 3 - 2\sqrt{2}$ ,  $\mu/U = \sqrt{2} - 1$

### Espectro para transición tipo CI

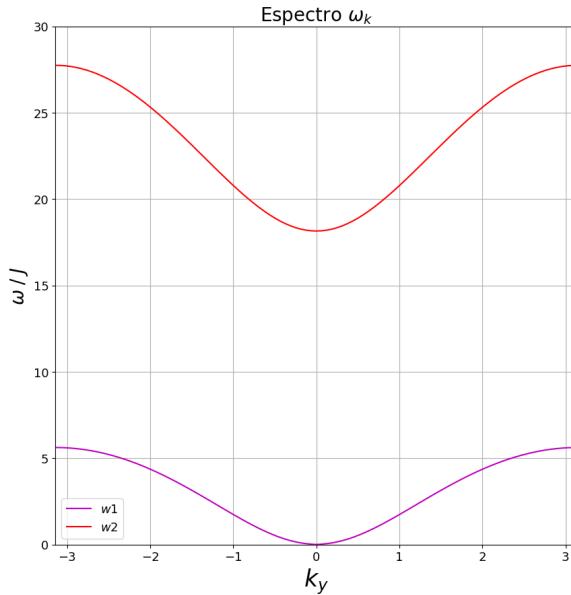


FIGURA 5.14: Espectro físico del Hamiltoniano de Bose-Hubbard para MI. Se calculó con valores  $Jz/U = 0.12$ ,  $\mu/U = 0.168$

De la diagonalización del Hamiltoniano cuadrático se obtienen los modos de ocupación  $n_{k_y}$  (ec. 4.78)

$$n_{k_y}^{(i)} = \frac{1}{e^{\lambda_{k_y}^{(i)}} - 1}. \quad (5.7)$$

Con lo que se puede calcular la Entropía de Entrelazamiento como (ec. 4.79)

$$S_{ent} = \sum_{\alpha} [(1 + n_{\alpha}) \ln (1 + n_{\alpha}) - n_{\alpha} \ln (n_{\alpha})]. \quad (5.8)$$

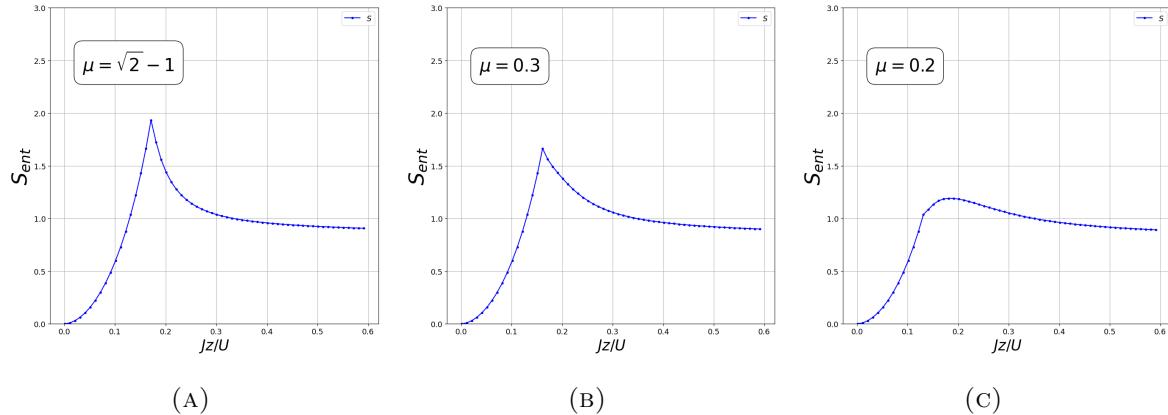


FIGURA 5.15: Entropía de Entrelazamiento para  $L_A = 8$  con  $\mu u = \sqrt{2} - 1, 0.3, 0.2$ , de izquierda a derecha.

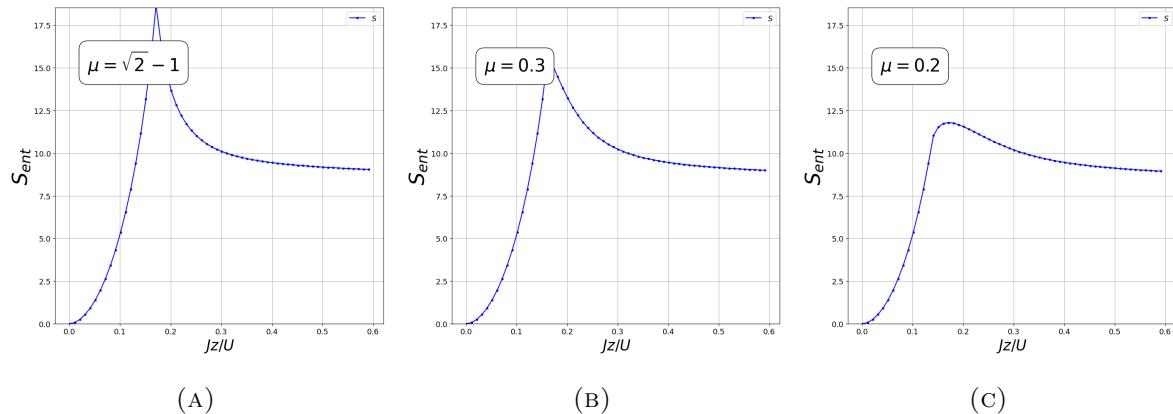


FIGURA 5.16: Entropía de Entrelazamiento para  $L_A = 50$  con  $\mu u = \sqrt{2} - 1, 0.3, 0.2$ , de izquierda a derecha.

# Capítulo 6

## Discusión

Las figuras 5.4-5.6 muestran que el método de diagonalización exacta aplicado al modelo de Bose-Hubbard define perfectamente la transición de fase bien conocida por la teoría. Muestra de ello son las fluctuaciones  $\Delta n$  y el factor de condensado  $f_c$ , que varían de 0 a 1 de forma consistente a las cotas presentadas en la Tabla 1.1, según es mostrado en las tablas 5.1 y 5.2.

La entropía de entrelazamiento  $S_{ent}$  es nula en el estado de aislante de Mott, como es de esperar, pues los bosones se encuentran perfectamente ordenados distribuidos por los sitios sin presentar fluctuaciones. A su vez, va aumentando hasta llegar a un aparente máximo en la fase superfluida. Curiosamente al aumentar el tamaño del sistema (ver Fig. 5.6) ocurre un aumento inesperado en la entropía medida sobre los sitios impares justo en la región de transición de fase.

Con el fin de entender por qué ocurre esto se puede inspeccionar la función de onda del estado base en puntos representativos. Veamos como ejemplo el caso con  $N = M = 6$ .

Recordemos que el estado base es una combinación lineal de estados de Fock, dados por la ec. 4.5

$$|\psi\rangle = \sum_{\beta}^D c_{\beta} |\beta\rangle$$

### Región MI

Numéricamente resulta

$$|\psi\rangle \approx |111111\rangle \tag{6.1}$$

Aportando este estado de Fock  $> .99$  a la amplitud de probabilidad total.

### Región SF

El estado que más aporta es  $|111111\rangle$  con una amplitud de  $c \approx 0.0155$ , y los siguientes estados que más aportan con  $c \approx 0.077$  son los que poseen una estructura similar a

$$|211110\rangle, |211101\rangle, |211011\rangle, |210111\rangle, \text{etc} \quad (6.2)$$

Es decir, partiendo del estado MI, uno de los sitios mueve un bosón a otro sitio cualquiera.

### Region de transición

Inspeccionando el punto  $J/U = 10^{-0.6}$  resulta que, curiosamente, el estado que más aporta no es  $|111111\rangle$ , con solo  $c \approx 0.0141$ , sino los estados con una estructura similar a los de ec. 6.2, pero favoreciendo una estructura sobre otra del siguiente modo:

Si la distancia entre el sitio vacío y el que ganó un bosón es de 1 o 3 sitios de red (tomando en cuenta periodicidad), entonces su amplitud es  $c \approx 0.0195$ . Ejemplos:  $|121101\rangle, |111201\rangle$

Si la distancia, por otro lado, es de 2 sitios (o 4), entonces su amplitud es  $c \approx 0.0141$ . Ejemplos:  $|121011\rangle, |111210\rangle$ .

Tal cuestión ocasiona que en el proceso en el que se van permitiendo las fluctuaciones, sitios con separación impar están correlacionados.

Dicho comportamiento se puede observar de manera sintetizada en las Figuras 6.1-6.3

De manera similar, en el modelo extendido con cavidad óptica se encuentran los picos de la entropía en la región que podríamos caracterizar como supersólida (SS) (Figs. 5.8-5.10), acorde al valor de los parámetros según la Tabla 2.1.

Un argumento similar al explicado respecto al modelo extendido de Bose-Hubbard aplica en este caso, pero considerando que el ordenamiento es de densidad periódica (ver Fig. 2.1).

Tal comportamiento puede observarse en las Figuras 6.4-6.6.

### Evolución de $|\psi_{GS}\rangle$ en modelo BH (M=N=4)

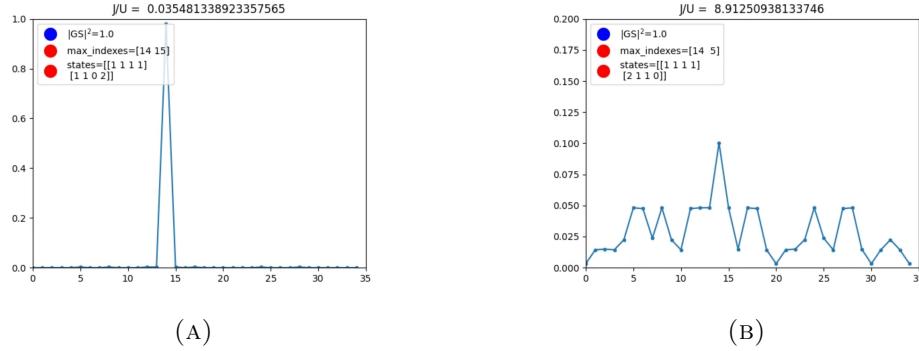


FIGURA 6.1: Evolución de las amplitudes de probabilidad del estado base para el modelo BH con  $M = N = 4$  a través de las distintas fases: MI (A), SF (B); con valores  $J/U = 0.03, 8.91$ , respectivamente.

### Evolución de $|\psi_{GS}\rangle$ en modelo BH (M=N=6)

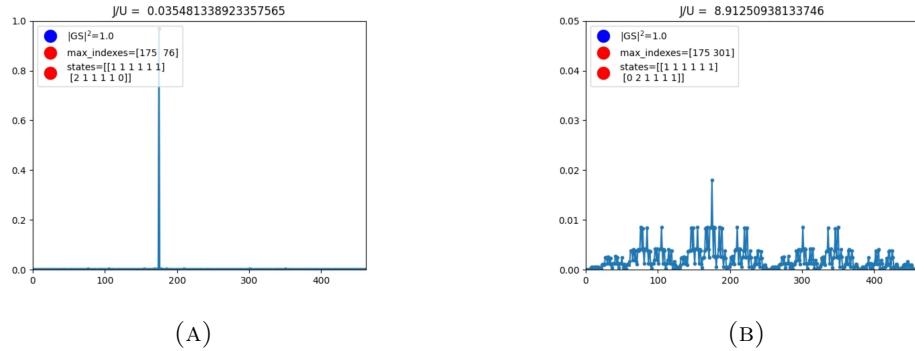


FIGURA 6.2: Evolución de las amplitudes de probabilidad del estado base para el modelo BH con  $M = N = 6$  a través de las distintas fases: MI (A), SF (B); con valores  $J/U = 0.03, 8.91$ , respectivamente.

### Evolución de $|\psi_{GS}\rangle$ en modelo BH (M=N=8)

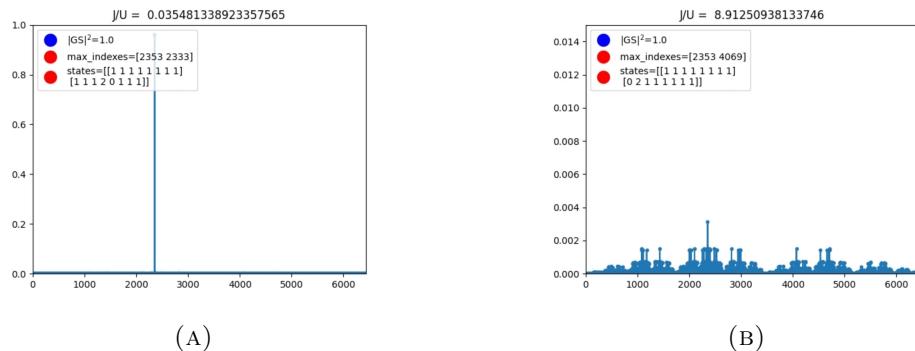


FIGURA 6.3: Evolución de las amplitudes de probabilidad del estado base para el modelo BH con  $M = N = 8$  a través de las distintas fases: MI (A), SF (B); con valores  $J/U = 0.03, 8.91$ , respectivamente.

## Evolución de $|\psi_{GS}\rangle$ en modelo EBH (M=N=4)

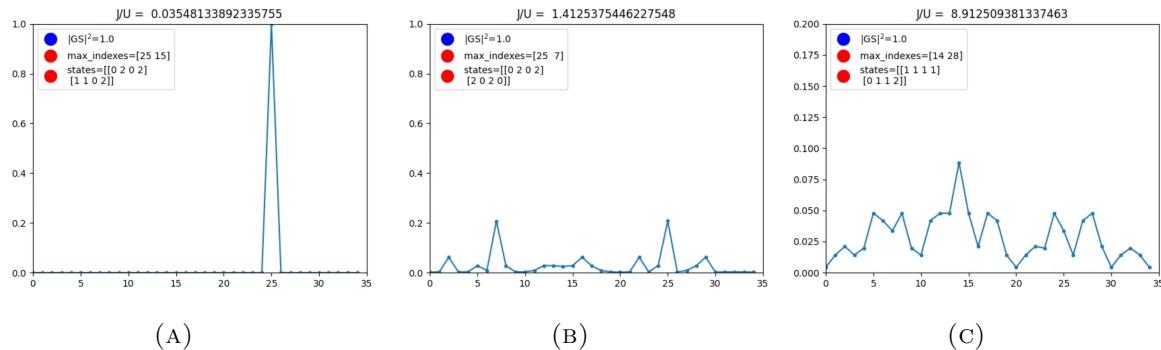


FIGURA 6.4: Evolución de las amplitudes de probabilidad del estado base para el modelo EBH con  $M = N = 4$  a través de las distintas fases: DW (A), SS (B), SF (C); con valores  $J/U = 0.03, 1.41, 8.91$ , respectivamente, con intensidad de interacción de cavidad  $g_{eff}J_D^2/U = -4$ .

## Evolución de $|\psi_{GS}\rangle$ en modelo EBH (M=N=6)

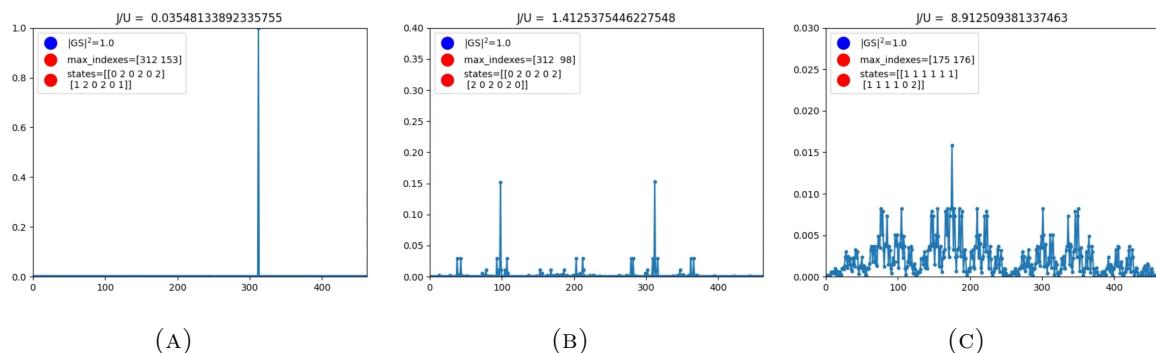


FIGURA 6.5: Evolución de las amplitudes de probabilidad del estado base para el modelo EBH con  $M = N = 6$  a través de las distintas fases: DW (A), SS (B), SF (C); con valores  $J/U = 0.03, 1.41, 8.91$ , respectivamente, intensidad de interacción de cavidad  $g_{eff}J_D^2/U = -4$ .

## Evolución de $|\psi_{GS}\rangle$ en modelo EBH (M=N=8)

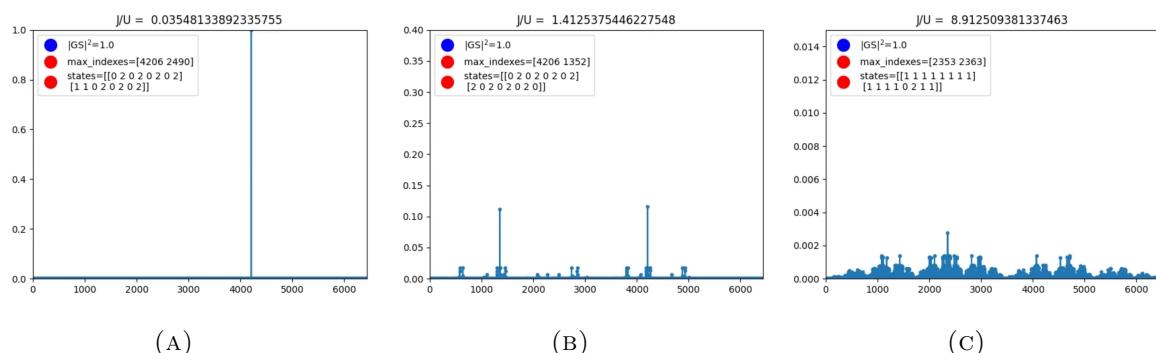


FIGURA 6.6: Evolución de las amplitudes de probabilidad del estado base para el modelo EBH con  $M = N = 8$  a través de las distintas fases: DW (A), SS (B), SF (C); con valores  $J/U = 0.03, 1.41, 8.91$ , respectivamente, con intensidad de interacción de cavidad  $g_{eff}J_D^2/U = -4$ .

# Conclusiones

Este trabajo presenta una metodología efectiva para calcular la entropía de entrelazamiento de una red de bosones basada en un modelo de Bose-Hubbard. Los resultados obtenidos mediante diagonalización exacta muestran concordancia con los resultados por teoría de campo medio con bosones esclavos, lo cual, junto con las predicciones teóricas, apunta a la validez de los resultados de medida de EE para el modelo extendido con cavidad óptica de alta reflectancia.

Tales resultados nos permiten caracterizar las transiciones de fase a partir de la EE. Para el modelo BH, la transición MI-SF muestra aumento en las correlaciones para la bipartición impar. En el caso de EBH, aparecen correlaciones de largo alcance, por lo que en la región SS la EE aumenta significativamente, a mayor velocidad para la bipartición impar, para luego volver a converger en la región SF. En otras palabras, la cavidad óptica efectivamente crea una fase de alta correlación causada por el mecanismo de interacción de largo alcance.

Se mostró que es posible, entonces, generar un simulador cuántico basado en átomos ultrafríos dentro de una cavidad óptica que posea una configuración de correlaciones deseada variando simplemente las características de la cavidad, siendo dichas correlaciones cuantificadas mediante la entropía de entrelazamiento.

## Trabajo a futuro

Durante el desarrollo de este trabajo, se identificó un desafío significativo relacionado con el costo computacional asociado al método de diagonalización exacta, por lo que desarrollar diferentes estrategias que mejoren el rendimiento es imperativo si se quieren estudiar sistemas con Hamiltonianos más complejos o redes con un mayor número de sitios y partículas. Sin embargo, el atractivo de este método es su simpleza operacional y la facilidad de realizar la bipartición a conveniencia. Encontramos un parche al costo computacional utilizando el método de bosones esclavos, que permite realizar cálculos

para un número mayor de sitios, con la complejidad teórico-matemática que implica adaptar de manera efectiva el modelo extendido u otros modelos más complejos. En definitiva, con un adecuado balance entre número de sitios computables, libertad de bipartición y facilidad operacional, el futuro apunta a caracterizar la EE para sistemas de Hubbard más complejos y más grandes.

El código del método está disponible para que cualquiera pueda utilizarlo y modificarlo para diferentes modelos (ver [D](#)).

# Apéndice A

## Proceso de trazado parcial

Usando la definición de ec. 3.7

$$\text{Tr}_B \left[ |a_i\rangle \langle a_j| \otimes |b_i\rangle \langle b_j| \right] = |a_i\rangle \langle a_j| \text{Tr} \left[ |b_i\rangle \langle b_j| \right] = |a_i\rangle \langle a_j| \langle b_i| b_j \rangle$$

### Trazado sobre dos sitios en caso $M = N = 4$

Haciendo la traza sobre los sitios impar ( $A = \{2, 4\}$ ,  $B = \{1, 3\}$ ) se tiene

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B &= \left( |n_2, n_4\rangle \langle n'_2, n'_4| \otimes |n_1, n_3\rangle \langle n'_1, n'_3| \right) \\ &= |n_2, n_4\rangle \langle n'_2, n'_4| \langle n'_1, n'_3| n_1, n_3 \rangle = |n_2, n_4\rangle \langle n'_2, n'_4| \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_3 n'_3}. \end{aligned}$$

Entonces cuando el elemento no sea cero, será mapeado en la nueva matriz de menor dimensión a la posición  $|n_2, n_4\rangle \langle n_2, n_4|$ .

Haciendo la traza sobre la primera mitad ( $A = \{3, 4\}$ ,  $B = \{1, 2\}$ ) se tiene

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B &= \left( |n_3, n_4\rangle \langle n'_3, n'_4| \otimes |n_1, n_2\rangle \langle n'_1, n'_2| \right) \\ &= |n_3, n_4\rangle \langle n'_3, n'_4| \langle n'_1, n'_2| n_1, n_2 \rangle = |n_3, n_4\rangle \langle n'_3, n'_4| \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2}. \end{aligned}$$

Entonces cuando el elemento no sea cero, será mapeado en la nueva matriz de menor dimensión a la posición  $|n_3, n_4\rangle \langle n_3, n_4|$ .

Entonces el mapeo a la base reducida para el caso  $N = M = 4$  se hace tal como en la tabla A.1.

De ese modo, se obtiene cada elemento de la matriz trazada como suma de los coeficientes que aporten.

Trazado					
Sobre primera mitad			Sobre impares		
$ 4000\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$	$ 4000\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$
$ 3100\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$	$ 3100\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$
$ 3010\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$	$ 3010\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$
$ 3001\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$	$ 3001\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$
$ 2200\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$	$ 2200\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 20\rangle$
$ 2110\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$	$ 2110\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$
$ 2101\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$	$ 2101\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 11\rangle$
$ 2020\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 20\rangle$	$ 2020\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$
$ 2011\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 11\rangle$	$ 2011\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$
$ 2002\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 02\rangle$	$ 2002\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 02\rangle$
$ 1300\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$	$ 1300\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 30\rangle$
$ 1210\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$	$ 1210\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 20\rangle$
$ 1201\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$	$ 1201\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 21\rangle$
$ 1120\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 20\rangle$	$ 1120\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$
$ 1111\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 11\rangle$	$ 1111\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 11\rangle$
$ 1102\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 02\rangle$	$ 1102\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 12\rangle$
$ 1030\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 30\rangle$	$ 1030\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$
$ 1021\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 21\rangle$	$ 1021\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$
$ 1012\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 12\rangle$	$ 1012\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 02\rangle$
$ 1003\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 03\rangle$	$ 1003\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 03\rangle$
$ 0400\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$	$ 0400\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 40\rangle$
$ 0310\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$	$ 0310\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 30\rangle$
$ 0301\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$	$ 0301\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 31\rangle$
$ 0220\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 20\rangle$	$ 0220\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 20\rangle$
$ 0211\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 11\rangle$	$ 0211\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 21\rangle$
$ 0202\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 02\rangle$	$ 0202\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 22\rangle$
$ 0130\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 30\rangle$	$ 0130\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 10\rangle$
$ 0121\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 21\rangle$	$ 0121\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 11\rangle$
$ 0112\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 12\rangle$	$ 0112\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 12\rangle$
$ 0103\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 03\rangle$	$ 0130\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 13\rangle$
$ 0040\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 40\rangle$	$ 0040\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 00\rangle$
$ 0031\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 31\rangle$	$ 0031\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 01\rangle$
$ 0022\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 22\rangle$	$ 0022\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 02\rangle$
$ 0013\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 13\rangle$	$ 0013\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 03\rangle$
$ 0004\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 04\rangle$	$ 0004\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 04\rangle$

TABLA A.1: Mapeo de vectores a una nueva base reducida según el trazado.

### Trazando sobre primera mitad

$$|10\rangle \langle 01| = \alpha_{|3010\rangle\langle 3001|} + \alpha_{|2110\rangle\langle 2101|} + \alpha_{|1210\rangle\langle 1201|} + \alpha_{|0310\rangle\langle 0321|}$$

### Trazando sobre impares

$$|10\rangle \langle 01| = \alpha_{|3100\rangle\langle 3001|} + \alpha_{|2110\rangle\langle 2011|} + \alpha_{|1120\rangle\langle 1021|} + \alpha_{|0130\rangle\langle 0031|}$$

Para el estado base dado por

$$|\psi_{GS}\rangle = \sum_i^D C_i |\beta\rangle_i, \quad |\beta\rangle = \text{Estado de Fock}$$

Entonces  $\alpha$  estan dadas por

$$\alpha_{|\beta\rangle_i\langle\beta|_j} = C_i C_j.$$

La matriz trazada resultante es Hermitiana y con traza unitaria, acorde a las propiedades de ecs. 3.9 y 3.10.

En la Fig. A.1 se muestra cuáles elementos de la matriz de densidad  $\rho = |\psi_{GS}\rangle \langle \psi_{GS}|$  son mapeados a la estructura de la Fig. A.2.

A continuación se muestra un ejemplo numérico para el caso  $M = N = 4$ , con  $J/U = 1$ , de lo cual se obtiene numéricamente el estado base  $|\psi_{GS}\rangle$  descrito en la figura A.3. En ella, nótese que observando a qué elemento de la base (ver Tabla A.1) pertenece cada elemento del vector  $|\psi_{GS}\rangle$  se puede ver que la amplitud de probabilidad es mayor cuando los bosones están bien distribuídos en la red (por ejemplo, para el elemento  $|1, 1, 1, 1\rangle$ ), y contrariamente para aquellos estados con alta concentración de bosones en un solo sitio ( $|4000\rangle, |0400\rangle, |0040\rangle, |0004\rangle$ ).

### Matriz trazada en primera mitad

$$\left( \begin{array}{cccccccccccccccc} 0.0325 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1212 & 0.1200 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1200 & 0.1212 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0900 & 0.1564 & 0.0900 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1564 & 0.2641 & 0.1564 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0900 & 0.1564 & 0.0900 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0179 & 0.0430 & 0.0430 & 0.0179 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0430 & 0.1033 & 0.1031 & 0.0430 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0430 & 0.1031 & 0.1033 & 0.0430 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0179 & 0.0430 & 0.0430 & 0.0179 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0008 & 0.0024 & 0.0035 & 0.0024 & 0.0008 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0024 & 0.0076 & 0.0109 & 0.0076 & 0.0024 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0035 & 0.0109 & 0.0150 & 0.0109 & 0.0035 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0024 & 0.0076 & 0.0109 & 0.0076 & 0.0024 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0008 & 0.0024 & 0.0035 & 0.0024 & 0.0008 & 0 \end{array} \right)$$

con eigenvalores:

$$\lambda_{\rho_A} = (4.494 \times 10^{-01}, \quad 2.421 \times 10^{-01}, \quad 2.421 \times 10^{-01}, \quad 3.251 \times 10^{-02}, 3.251 \times 10^{-02}, \quad 7.041 \times 10^{-04}, \quad 3.280 \times 10^{-04}, \quad 3.280 \times 10^{-04}, 1.227 \times 10^{-06}, \quad 2.138 \times 10^{-17}, \quad -2.299 \times 10^{-18}, \quad 7.352 \times 10^{-19}, 2.972 \times 10^{-19}, \quad -2.328 \times 10^{-20}, \quad -1.261 \times 10^{-20})$$

### Matriz trazada en impares

$$\left( \begin{array}{cccccccccccccccc} 0.0451 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1238 & 0.1238 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1238 & 0.1238 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0804 & 0.1428 & 0.0803 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1428 & 0.2536 & 0.1428 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0803 & 0.1428 & 0.0804 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0153 & 0.0407 & 0.0407 & 0.0153 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0407 & 0.1085 & 0.1085 & 0.0407 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0407 & 0.1085 & 0.1085 & 0.0407 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0153 & 0.0407 & 0.0407 & 0.0153 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0008 & 0.0028 & 0.0042 & 0.0028 & 0.0008 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0028 & 0.0103 & 0.0154 & 0.0103 & 0.0028 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0042 & 0.0154 & 0.0230 & 0.0154 & 0.0042 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0028 & 0.0103 & 0.0154 & 0.0103 & 0.0028 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0008 & 0.0028 & 0.0042 & 0.0028 & 0.0008 & 0 \end{array} \right)$$

con eigenvalores:

$$\lambda_{\rho_A} = (4.144 \times 10^{-01}, \quad 2.477 \times 10^{-01}, \quad 2.477 \times 10^{-01}, \quad 4.513 \times 10^{-02}, 4.513 \times 10^{-02}, \quad 1.450 \times 10^{-06}, \quad 8.379 \times 10^{-17}, \quad -5.623 \times 10^{-17}, -3.075 \times 10^{-18}, \quad -2.047 \times 10^{-18}, \quad -9.799 \times 10^{-19}, \quad -8.052 \times 10^{-19}, 6.810 \times 10^{-19}, 5.378 \times 10^{-19}, \quad 1.197 \times 10^{-19})$$

Siguiendo el algoritmo presentado en Cap. 4.1 se realiza entonces la descomposición en valores propios de  $\rho^A$  para calcular  $\ln \rho^A = W_{\rho^A} \ln D_{\rho^A} W_{\rho^A}^{-1}$ , con lo cual resulta numéricamente el producto

### Trazado sobre primera mitad

$$\rho^A \ln \rho^A =$$

$$\left( \begin{array}{cccccccccccccc} -0.160 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.253 & -0.241 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.241 & -0.253 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.105 & -0.180 & -0.105 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.180 & -0.308 & -0.180 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.105 & -0.180 & -0.105 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.036 & -0.088 & -0.088 & -0.036 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.088 & -0.212 & -0.209 & -0.088 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.088 & -0.209 & -0.212 & -0.088 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.036 & -0.088 & -0.088 & -0.036 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.004 & -0.012 & -0.017 & -0.012 & -0.004 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.012 & -0.038 & -0.053 & -0.038 & -0.012 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.017 & -0.053 & -0.075 & -0.053 & -0.017 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.012 & -0.038 & -0.053 & -0.038 & -0.012 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.004 & -0.012 & -0.017 & -0.012 & -0.004 & 0 \end{array} \right) \quad (\text{A.1})$$

### Trazado sobre impares

$$\rho^A \ln \rho^A =$$

$$\left( \begin{array}{cccccccccccccc} -0.201 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.249 & -0.249 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.249 & -0.249 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.102 & -0.181 & -0.101 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.181 & -0.322 & -0.181 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.101 & -0.181 & -0.102 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.031 & -0.081 & -0.081 & -0.031 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.081 & -0.218 & -0.218 & -0.081 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.081 & -0.218 & -0.218 & -0.081 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.031 & -0.081 & -0.081 & -0.031 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.003 & -0.012 & -0.018 & -0.012 & -0.003 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.012 & -0.046 & -0.068 & -0.046 & -0.012 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.018 & -0.068 & -0.102 & -0.068 & -0.018 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.012 & -0.046 & -0.068 & -0.046 & -0.012 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.003 & -0.012 & -0.018 & -0.012 & -0.003 & 0 \end{array} \right) \quad (\text{A.2})$$

La traza es la suma de los elementos de la diagonal, con lo que resulta

$$S(\rho^A)_{MITAD} = -\text{Tr}[\rho^A \ln \rho^A] = 1.84$$

$$S(\rho^A)_{IMPARES} = -\text{Tr}[\rho^A \ln \rho^A] = 1.93$$

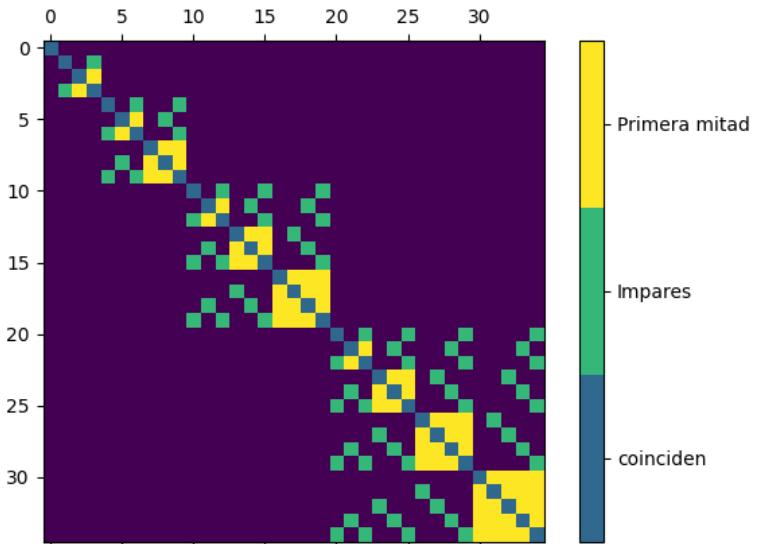


FIGURA A.1: Mapeo de la matriz de densidad para diferente elección de subsistema. Los colores indican cuáles elementos serán mapeados a la estructura reducida acorde a la tabla A.1

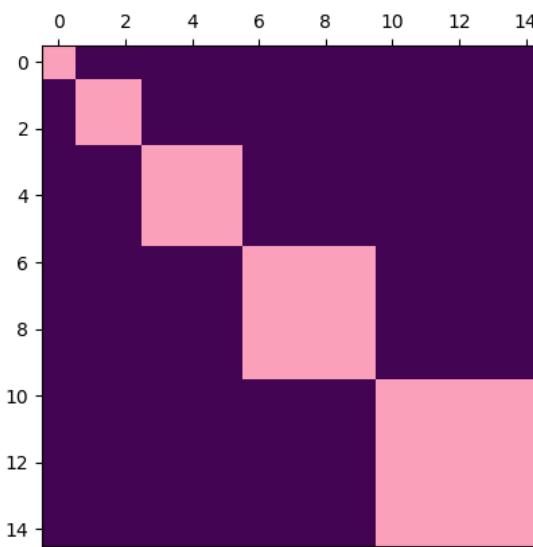


FIGURA A.2: Estructura de la matriz de densidad reducida, obtenida después de hacer un trazado. Se muestran en rosa los elementos no nulos.

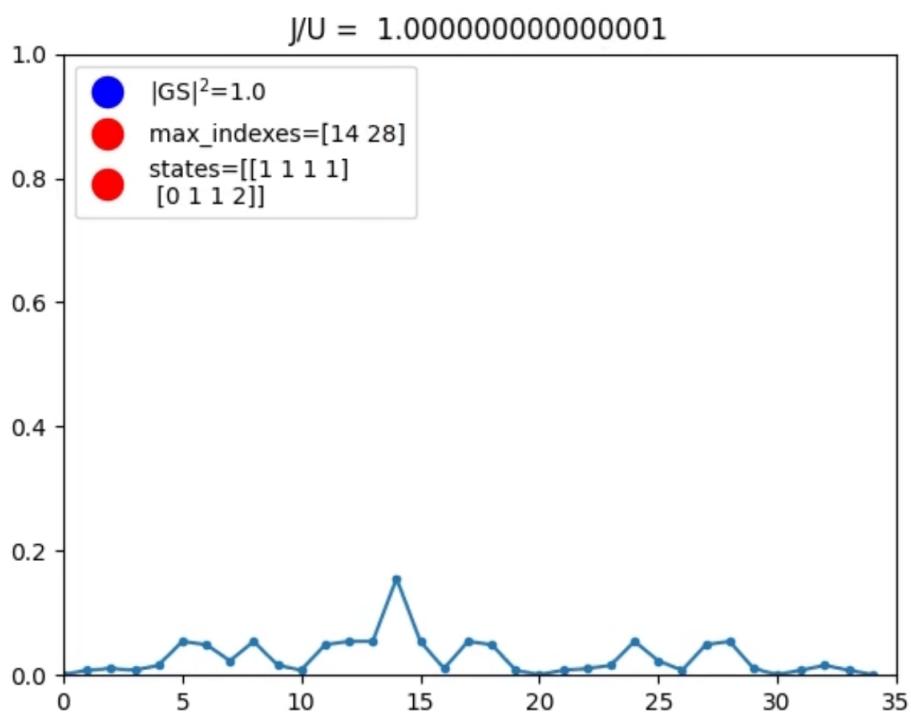


FIGURA A.3: Distribución de la amplitud de probabilidad del estado base para  $J/U = 1$  y  $N = M = 4$ . El eje x marca el índice, que corresponde a su respectivo estado de Fock según el orden lexicográfico (ver Cap. 4.1) y Tabla A.1.

## Apéndice B

### Solución por diagonalización exacta: ejemplo ilustrativo

#### Caso M=N=3

Con ec. 1.25 se calcula que la dimensión del espacio de Hilbert es  $D = 10$ , con lo que los estados de Fock ya ordenados lexicográficamente son

$ 300\rangle$
$ 210\rangle$
$ 201\rangle$
$ 120\rangle$
$ 111\rangle$
$ 102\rangle$
$ 030\rangle$
$ 021\rangle$
$ 012\rangle$
$ 003\rangle$

En este caso considérese  $\mu = 0$  y  $J = U = 1$ , por lo que el Hamiltoniano de Bose-Hubbard (Ec. 1.4) tiene la siguiente forma matricial de  $10 \times 10$ :

$$\hat{H} \rightarrow \begin{pmatrix} 3U & -J\sqrt{3} & -J\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -J\sqrt{3} & U & -J & -2J & -J\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -J\sqrt{3} & -J & U & 0 & -J\sqrt{2} & -2J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2J & 0 & U & -J\sqrt{2} & 0 & -J\sqrt{3} & -J & 0 & 0 \\ 0 & -J\sqrt{2} & -J\sqrt{2} & -J\sqrt{2} & 0 & -J\sqrt{2} & 0 & -J\sqrt{2} & -J\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & -2J & 0 & -J\sqrt{2} & U & 0 & 0 & -J & -J\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & -J\sqrt{3} & 0 & 0 & U & -J\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J & -J\sqrt{2} & 0 & -J\sqrt{3} & U & -2J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -J\sqrt{2} & -J & 0 & -2J & U & -J\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J\sqrt{3} & 0 & 0 & -J\sqrt{3} & 3U \end{pmatrix}$$

Diagonalizando se obtiene el estado base

$$|\psi_{GS}\rangle = \begin{pmatrix} -0.14014353 \\ -0.32752864 \\ -0.32752864 \\ -0.32752864 \\ -0.5453708 \\ -0.32752864 \\ -0.14014353 \\ -0.32752864 \\ -0.32752864 \\ -0.14014353 \end{pmatrix}.$$

Se construye la matriz de densidad reducida como

$$\rho_{ij} = \langle \psi_{GS} | b_i^\dagger b_j | \psi_{GS} \rangle$$

con el estado base obtenido

$$\rho = \begin{pmatrix} 1. & 0.98605737 & 0.98605737 \\ 0.98605737 & 1. & 0.98605737 \\ 0.98605737 & 0.98605737 & 1. \end{pmatrix}$$

Dicha matriz tiene eigenvalor  $n^{OBDM} = 0.577$  con multiplicidad 3. Por lo que en este caso el factor de condensado es  $f_c = \frac{0.577}{3} = 0.192$ .

Por otro lado, la matriz de densidad del sistema es

$$\rho^{AB} = \begin{pmatrix} 0.0196 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0764 & 0.0459 & 0.0196 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0196 \\ 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1786 & 0.1072 & 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.0459 \\ 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1786 & 0.1072 & 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.0459 \\ 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1786 & 0.1072 & 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.0459 \\ 0.0764 & 0.1786 & 0.1786 & 0.1786 & 0.2974 & 0.1786 & 0.0764 & 0.1786 & 0.1786 & 0.0764 \\ 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1786 & 0.1072 & 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.0459 \\ 0.0196 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0764 & 0.0459 & 0.0196 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0196 \\ 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1786 & 0.1072 & 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.0459 \\ 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1072 & 0.1786 & 0.1072 & 0.0459 & 0.1072 & 0.1072 & 0.0459 \\ 0.0196 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0764 & 0.0459 & 0.0196 & 0.0459 & 0.0459 & 0.0196 \end{pmatrix} \quad (B.1)$$

Con la cual se puede calcular la entropía de entrelazamiento (Consulte el Apéndice A), eligiendo alguna partición de subsistemas. En este caso, el número de sitios es impar, por lo que la partición será asimétrica. Eligiendo mapear sobre dos sitios arbitrarios (por condición periódica de la red la elección es indistinguible) se construye el mapeo (similar a la construcción en Tabla A.1).

Trazado sobre sitios 1 y 2		
$ 300\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 0\rangle$
$ 210\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 0\rangle$
$ 201\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 1\rangle$
$ 120\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 0\rangle$
$ 111\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 1\rangle$
$ 102\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 2\rangle$
$ 030\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 0\rangle$
$ 021\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 1\rangle$
$ 012\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 2\rangle$
$ 003\rangle$	se mapea a $\rightarrow$	$ 3\rangle$

TABLA B.1: Mapeo de vectores a una nueva base reducida según el trazado.

Entonces

$$\rho^A = \begin{pmatrix} 0.2536 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5118 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2144 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0196 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Siguiendo el algoritmo presentado en Cap. 4.1 se realiza entonces la descomposición en valores propios de  $\rho^A$  para calcular  $\ln \rho^A = W_{\rho^A} \ln D_{\rho^A} W_{\rho^A}^{-1}$ , con lo cual resulta numéricamente el producto

$$\rho^A \ln \rho^A = \begin{pmatrix} -0.3479 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.3428 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.3301 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.0770 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

entonces

$$S(\rho^A) = -\text{Tr}[\rho^A \ln \rho^A] = 1.097$$

# Apéndice C

## Matriz de correlación

A continuación de construye  $C_{k_y}(x, x')$  (ec. 4.74) para un caso específico,  $n_{max} = 2$

De ec. 4.66

$$C_{k_y}^{(11)}(x, x') = \langle \begin{pmatrix} \vec{\gamma}_{x, k_y}^T \vec{\gamma}_{x', k_y}^\dagger & \vec{\gamma}_{x, k_y}^T \vec{\gamma}_{x', k_y + \pi}^\dagger \\ \vec{\gamma}_{x, k_y + \pi}^T \vec{\gamma}_{x', k_y}^\dagger & \vec{\gamma}_{x, k_y + \pi}^T \vec{\gamma}_{x', k_y + \pi}^\dagger \end{pmatrix} \rangle \quad (\text{C.1})$$

De ec. 4.70

$$\vec{\gamma}_{x, k_y}^T \vec{\gamma}_{x', k_y}^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger \\ \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x, k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x, k_y), 2}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

Y los bloques  $\vec{\gamma}_{x, k_y}^T \vec{\gamma}_{x', k_y + \pi}^\dagger$ ,  $\vec{\gamma}_{x, k_y + \pi}^T \vec{\gamma}_{x', k_y}^\dagger$ ,  $\vec{\gamma}_{x, k_y + \pi}^T \vec{\gamma}_{x', k_y + \pi}^\dagger$  tienen una estructura similar, sólo modificando la coordenada en  $k_y$ . Entonces C.1 queda

$$C_{k_y}^{(11)}(x, x') =$$

$$\begin{pmatrix} \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \\ \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \\ \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \\ \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{C.3})$$

Y esta matriz conforma un bloque de  $C_{k_y}(x, x')$  (ec. 4.74). Siguiendo ec. 4.71, ec. 4.72 y ec. 4.73 con el mismo procedimiento se construyen los siguientes bloques

$$C_{k_y}^{(12)}(x, x') =$$

$$\begin{pmatrix} \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, k_y), 1} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \\ \gamma_{(x, -k_y), 2} \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, k_y), 2} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \\ \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, k_y + \pi), 1} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \\ \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, k_y + \pi), 2} \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

$$C_{k_y}^{(21)}(x, x') =$$

$$\begin{pmatrix} \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \\ \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \\ \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \\ \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y), 2}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 1}^\dagger & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', k_y + \pi), 2}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

$$C_{k_y}^{(22)}(x, x') =$$

$$\begin{pmatrix} \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, -k_y), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \\ \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, -k_y), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \\ \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 1}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \\ \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 1} & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y), 2} & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 1} & \gamma_{(x, -k_y + \pi), 2}^\dagger \gamma_{(x', -k_y + \pi), 2} \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

De modo que se tiene completa la matriz  $C_{k_y}(x, x')$  de  $8 \times 8$

$$C_{k_y}(x, x') = \begin{pmatrix} C_{k_y}^{(11)}(x, x') & C_{k_y}^{(12)}(x, x') \\ C_{k_y}^{(21)}(x, x') & C_{k_y}^{(22)}(x, x') \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

# Apéndice D

## Código de diagonalización exacta en python

### Código principal

---

```
import math as ma
from Exact_diag_functions import create_hamiltonian, calculate_expected_values,
                                 calculate_ground_state, create_ordered_basis,
                                 define_tags_and_ind, plot_results, calculate_condensate_factor,
                                 time_convert, create_dictionaries, calculate_entropy,
                                 create_index_mapping, calculate_entropy_V2, write_results_txt

def main():

    # expected values arrays
    nvariance = []
    nvariance2 = []
    n1 = []
    n2 = []
    O_DW = []
    f = []
    S_ent = []
    S_ent2 = []

    #system configuration
    N=8
    M=8
    Cavity=True

    # constants
    BASIS_DIM = int(ma.factorial(N + M - 1) / (ma.factorial(N) * ma.factorial(M - 1)))
    U = 1

    # begins diagonalization method
    ordered_basis = create_ordered_basis(N, M)
    sorted_tags, ind = define_tags_and_ind(BASIS_DIM, ordered_basis, M)
```

```

#dictionaries for tracing
diccionario, diccionario2 = create_dictionaries(M, ordered_basis, BASIS_DIM)
index_mapping_1 = create_index_mapping(diccionario)
index_mapping_2 = create_index_mapping(diccionario2)

# cicle from MI to SF regimes
ratio = []
CORTE = 40
step = -2.4
for i_step in range(0, CORTE):

    step += 0.1
    print('\n current: ', i_step, '/', CORTE - 1)
    J = U * ma.pow(10, step)
    ratio.append(J / U)

    # Hamiltonian creation and solution
    H_total, D_sq = create_hamiltonian(M, sorted_tags, ind, BASIS_DIM,
                                         ordered_basis, U, J, CAVITY)
    GS, GS_transposed, E_g = calculate_ground_state(H_total)

    # expected values calculation
    nvariance, nvariance2, n1, n2, O_DW = calculate_expected_values(GS, BASIS_DIM,
                                                                     ordered_basis, M, D_sq, nvariance, nvariance2,
                                                                     n1, n2, O_DW)
    f = calculate_condensate_factor(M, BASIS_DIM, ordered_basis, sorted_tags, ind, GS,
                                     f, N)
    S_ent, S_ent2 = calculate_entropy_V2(GS, M, N, ordered_basis, BASIS_DIM, S_ent, S_ent2,
                                         diccionario, diccionario2, index_mapping_1,
                                         index_mapping_2)

    #plotting
    plot_results(ratio, O_DW, nvariance, nvariance2, n1, n2, N, M, f, CAVITY, S_ent, S_ent2)

    #store results in txt
    write_results_txt("txt_results/results(N={},M={},Cav={})".format(N,M,CAVITY), ratio,
                      nvariance, nvariance2, n1, n2, f, S_ent, S_ent2, O_DW)

if __name__ == "__main__":
    main()

```

El código completo con la librería *Exact\_diag\_functions* puede ser consultado en

[https://github.com/humbertoehl/Exact\\_Diagonalization\\_BH](https://github.com/humbertoehl/Exact_Diagonalization_BH)

# Apéndice E

## Código de bosones esclavos

### Código principal

---

```
import numpy as np
import math as ma
import primme
from scipy.sparse import lil_matrix
from scipy.linalg import eig, inv
import matplotlib.pyplot as plt

def main():

    # constants
    n_max=6
    U = 1
    mu = np.sqrt(2)-1
    d = 2
    z = 2*d
    L_A=8

    CORTE = 60
    step = 0.01

    # Definition of Operators
    def Ham(phi):
        return -(b_op.todense() + b_op_tr.todense())*z*phi + I.todense()*z*(phi**2) + (U/(2*J))*(n_sq-n_op)

    def F_ab (alpha,beta,asterisco):
        psi_alpha=H_eigsh[1][:,alpha].reshape(n_max+1,1)
        psi_beta=H_eigsh[1][:,beta].reshape(n_max+1,1)
        psi_alpha=psi_alpha.reshape(1,n_max+1)
        if asterisco==False:
            return psi_alpha*b_op_tr.todense()*psi_beta
        if asterisco==True:
            return psi_beta.reshape(1,n_max+1)*b_op.todense()*psi_alpha.reshape(n_max+1,1)
```

```

def EE(vn):
    return np.sum((1 + vn) * np.log(1 + vn) - vn * np.log(vn + 0.00001))

n_op = lil_matrix((n_max+1,n_max+1))
for i in range (0,n_max+1):
    n_op[i,i]=i

b_op = lil_matrix((n_max+1,n_max+1))
for i in range (0,n_max+1):
    b_op[i,i-1]=np.sqrt(i)

b_op_tr=b_op.transpose()
I=lil_matrix((n_max+1,n_max+1))
for i in range (0,n_max+1):
    I[i,i]=1
n_sq=np.matmul(n_op.todense(),n_op.todense())

GAMMA=lil_matrix((2*n_max,2*n_max))
for i in range(0,2*n_max):
    if i<n_max:
        GAMMA[i,i]=1
    else:
        GAMMA[i,i]=-1

# Arrays for result storage
ratio = []
EE_array = []
wa1 = []
wa2 = []
wa3 = []
wa4 = []
wa5 = []
wa6 = []

# Initialization for the run over k
ee = 0
wa1_n = 0
wa2_n = 0
wa3_n = 0
wa4_n = 0
wa5_n = 0
wa6_n = 0

#Run over interaction factor J
for i_step in range(0, CORTE):

    J=(0.001+step*i_step)/z
    ratio.append(J*z / U)
    print('\n current: ', i_step, '/', CORTE - 1, '*5, 'J=' , J*z/U)

    # Mean-Field selfconsistent solution
    err=1
    phi=0.1
    while err>ma.pow(10,-6):
        H=Ham(phi)

```

```

H_eigsh=primme.eigsh(H,k=n_max+1, which='SA')
GS=H_eigsh[1][:,0].reshape(n_max+1,1)
GS_T=GS.reshape(1,n_max+1)
E_0=H_eigsh[0][0]
phi_new=(GS_T*b_op.todense()*GS)[0,0]
err=abs(phi_new-phi)
phi=phi_new

# Run over k-subspace
ee = 0
for i_k in range(0,int((int(L_A)+1))):
    k=(2*ma.pi/L_A)*((-L_A/2)+i_k)
    if k==0:
        break

# Construction of quadratic Hamiltonian
kx = ma.pi*0
eta_k=(ma.cos(k)+ma.cos(kx))/d

A_0= lil_matrix((n_max,n_max))
for i in range(0,n_max):
    A_0[i,i]=(H_eigsh[0][i+1]-E_0)*J

A_1= lil_matrix((n_max,n_max))
for i in range(0,n_max):
    for j in range(0,n_max):
        A_1[i,j]= -J* (F_ab(i+1,0,False)*F_ab(j+1,0,True) + F_ab(0,j+1,False)*F_ab(0,i+1,True))

B= lil_matrix((n_max,n_max))
for i in range(0,n_max):
    for j in range(0,n_max):
        B[i,j]= -J* (F_ab(0,i+1,False)*F_ab(j+1,0,True) + F_ab(0,j+1,False)*F_ab(i+1,0,True))

A_k=A_0+z*eta_k*A_1
B_k=z*eta_k*B

Matrix_AB= lil_matrix((2*n_max,2*n_max))
for i in range(0,2*n_max):
    for j in range(0,2*n_max):
        if i<n_max and j<n_max:
            Matrix_AB[i,j]=A_k[i,j]
        if i<n_max and j>=n_max:
            Matrix_AB[i,j]=B_k[i,j-n_max]
        if i>=n_max and j<n_max:
            Matrix_AB[i,j]=B_k[j,i-n_max]
        if i>=n_max and j>=n_max:
            Matrix_AB[i,j]=A_k[j-n_max,i-n_max]

# Construction of Correlation Matrix
Y = np.block([[np.eye(n_max), np.zeros((n_max, n_max))], [np.zeros((n_max, n_max)), -np.eye(n_max)]])
MM = np.dot(Y, Matrix_AB.todense())
Qo = np.linalg.eig(MM)[1]
sp = np.argsort(np.diag(np.dot(np.linalg.inv(Qo), np.dot(Y, np.dot(Matrix_AB.todense(), Y)))))

lv = np.concatenate((sp[n_max:], sp[:n_max][::-1]))

```

```

QQBO = Qo[:, 1v]
Spectrum = np.diag((    np.dot( np.linalg.inv(QQBO) , np.dot( Y , np.dot( Matrix_AB.todense() ,
Omega = (    np.dot( np.linalg.inv(QQBO) , np.dot( Y , np.dot( Matrix_AB.todense() , QQBO)))
MP = np.block([[np.eye(n_max), np.zeros((n_max, n_max))], [np.zeros((n_max, n_max)), np.zeros((n_
CC = np.dot(np.dot(QQBO, MP), QQBO.transpose())
lc, qc = np.linalg.eig(np.dot(Y, CC))
QCo = qc.transpose()
vn = (np.sort(lc)[n_max:2*n_max]-1)

wa1_n += np.log(1+1/(abs(vn[0])+0.00001))
wa2_n += np.log(1+1/(abs(vn[1])+0.00001))
wa3_n += np.log(1+1/(abs(vn[2])+0.00001))
wa4_n += np.log(1+1/(abs(vn[3])+0.00001))
wa5_n += np.log(1+1/(abs(vn[4])+0.00001))
wa6_n += np.log(1+1/(abs(vn[5])+0.00001))

#Entanglement Entropy for specific k
ee+=EE(abs(vn))

wa1.append(wa1_n)
wa2.append(wa2_n)
wa3.append(wa3_n)
wa4.append(wa4_n)
wa5.append(wa5_n)
wa6.append(wa6_n)

#Entanglement Entropy as f(J)
EE_array.append(ee)

# Plot Results
plt.figure(figsize=(10,10))
plt.plot(ratio, EE_array, 'b', label='$$', marker='.', linestyle='--')
plt.xlabel('J z /U$', fontsize=25)
plt.ylabel('$S_{ent}$', fontsize=35)
plt.yticks(fontsize=13)
plt.xticks(fontsize=13)
#plt.ylim(bottom=0, top=18.5)
plt.title('')
axes = plt.gca()
plt.legend(fontsize=13)
plt.grid()
plt.text(0.08, 0.9, '$L_A=$'+str(L_A), transform=plt.gca().transAxes, fontsize=20, bbox=dict(facecolor='white', edgecolor='black', boxstyle='square'))
if mu!=np.sqrt(2)-1:
    plt.text(0.08, 0.80, '$\mu=$'+str(mu), transform=plt.gca().transAxes, fontsize=20, bbox=dict(facecolor='white', edgecolor='black', boxstyle='square'))
else:
    plt.text(0.08, 0.80, '$\mu=\sqrt{2}-1$', transform=plt.gca().transAxes, fontsize=20, bbox=dict(facecolor='white', edgecolor='black', boxstyle='square'))
plt.show()

if __name__ == "__main__":
    main()

```

El código completo puede ser consultado en

[https://github.com/humbertoehl/SB\\_Approach\\_for\\_BH](https://github.com/humbertoehl/SB_Approach_for_BH)

## Bibliografía

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221):198–201, Jul 1995. [2](#)
- [2] Santiago F. Caballero-Benitez and Igor B. Mekhov. Quantum optical lattices for emergent many-body phases of ultracold atoms. *Physical Review Letters*, 115(24), 2015. [2](#), [15](#), [21](#)
- [3] Santiago F Caballero-Benitez and Igor B Mekhov. Bond order via light-induced synthetic many-body interactions of ultracold atoms in optical lattices. *New Journal of Physics*, 18(11):113010, 2016. [2](#), [15](#), [16](#), [18](#), [19](#), [54](#)
- [4] Renate Landig, Lorenz Hruby, Nishant Dogra, Manuele Landini, Rafael Mottl, Tobias Donner, and Tilman Esslinger. Quantum phases from competing short- and long-range interactions in an optical lattice. *Nature*, 532(7600):476–479, 2016. [15](#), [18](#), [21](#)
- [5] Maciej Lewenstein, Anna Sanpera Trigueros, and Verònica Ahufinger. *Ultracold atoms in optical lattices: Simulating quantum many-body systems*. Oxford University Press, 2017. [2](#), [4](#), [8](#), [9](#), [10](#), [12](#), [25](#), [30](#)
- [6] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*, 47(10):777–780, 1935. [2](#), [20](#)
- [7] E. Schrodinger. Die gegenwartige situation in der quantenmechanik. *Die Naturwissenschaften*, 23(48):807–812, 1935. [2](#), [20](#)
- [8] J. Ignacio Cirac and Peter Zoller. New frontiers in quantum information with atoms and ions. *Physics Today*, 57(3):38–44, Mar 2004. [2](#)
- [9] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. R. Soc. Lond*, 276(1365):238–257, Nov 1963. [2](#)
- [10] Martin C. Gutzwiller. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Physical Review Letters*, 10(5):159–162, Mar 1963. [2](#)
- [11] Junjiro Kanamori. Electron correlation and ferromagnetism of transition metals. *Progress of Theoretical Physics*, 30(3):275–289, Sep 1963. [2](#)

- [12] Santiago F. Caballero-Benitez, Gabriel Mazzucchi, and Igor B. Mekhov. Quantum simulators based on the global collective light-matter interaction. *Physical Review A*, 93(6), 2016. [2](#), [15](#), [16](#), [18](#), [19](#), [21](#)
- [13] Karen Lozano-Méndez, Alejandro H. Cásares, and Santiago F. Caballero-Benítez. Spin entanglement and magnetic competition via long-range interactions in spinor quantum optical lattices. *Physical Review Letters*, 128(8), 2022. [2](#), [15](#), [21](#)
- [14] Ryszard Horodecki, Paweł Horodecki, Michał Horodecki, and Karol Horodecki. Quantum entanglement. *Reviews of Modern Physics*, 81(2):865–942, 2009. [2](#), [20](#), [21](#), [24](#)
- [15] Tobias J. Osborne and Michael A. Nielsen. Entanglement in a simple quantum phase transition. *Physical Review A*, 66(3), 2002. [2](#), [21](#)
- [16] Matthew P. Fisher, Peter B. Weichman, G. Grinstein, and Daniel S. Fisher. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Physical Review B*, 40(1):546–570, 1989. [4](#), [12](#)
- [17] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, 80(3):885–964, 2008. [4](#), [6](#)
- [18] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Physical Review Letters*, 81(15):3108–3111, 1998. [5](#)
- [19] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Hänsch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, 2002. [5](#), [6](#)
- [20] Thilo Stöferle, Henning Moritz, Christian Schori, Michael Köhl, and Tilman Esslinger. Transition from a strongly interacting 1d superfluid to a mott insulator. *Physical Review Letters*, 92(13), Mar 2004. [5](#), [7](#)
- [21] Jonas Larson, Bogdan Damski, Giovanna Morigi, and Maciej Lewenstein. Mott-insulator states of ultracold atoms in optical resonators. *Physical Review Letters*, 100(5), Feb 2008. [6](#)
- [22] P Blair Blakie and Charles W Clark. Wannier states and bose–hubbard parameters for 2d optical lattices. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(7):1391–1404, 2004. [10](#)
- [23] Subir Sachdev and Bernhard Keimer. Quantum criticality. *Physics Today*, 64(2):29–35, 2011. [10](#)

- [24] Steven H. Simon. *The Oxford Solid State Basics*. Oxford University Press, 2019. [10](#)
- [25] J. K Freericks and H Monien. Phase diagram of the bose-hubbard model. *Europhysics Letters (EPL)*, 26(7):545–550, 1994. [10](#)
- [26] N. Elstner and H. Monien. Dynamics and thermodynamics of the bose-hubbard model. *Physical Review B*, 59(19):12184–12187, 1999. [12](#)
- [27] David Raventós, Tobias Graß, Maciej Lewenstein, and Bruno Juliá-Díaz. Cold bosons in optical lattices: A tutorial for exact diagonalization. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 50(11):113001, 2017. [12](#)
- [28] Robert Roth and Keith Burnett. Phase diagram of bosonic atoms in two-color superlattices. *Physical Review A*, 68(2), 2003. [12](#), [13](#)
- [29] Michael Aaron Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2001. [13](#), [21](#), [23](#), [24](#)
- [30] T Lahaye, C Menotti, L Santos, M Lewenstein, and T Pfau. The physics of dipolar bosonic quantum gases. *Reports on Progress in Physics*, 72(12):126401, 2009. [15](#), [26](#)
- [31] Alexey V. Gorshkov, Johannes Otterbach, Michael Fleischhauer, Thomas Pohl, and Mikhail D. Lukin. Photon-photon interactions via rydberg blockade. *Physical Review Letters*, 107(13), 2011. [15](#)
- [32] Helmut Ritsch, Peter Domokos, Ferdinand Brennecke, and Tilman Esslinger. Cold atoms in cavity-generated dynamical optical potentials. *Reviews of Modern Physics*, 85(2):553–601, 2013. [15](#), [16](#)
- [33] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Sylvain Nascimbène. Quantum simulations with ultracold quantum gases. *Nature Physics*, 8(4):267–276, 2012. [16](#)
- [34] D. Schmidt, H. Tomczyk, S. Slama, and C. Zimmermann. Dynamical instability of a bose-einstein condensate in an optical ring resonator. *Physical Review Letters*, 112(11), 2014. [17](#)
- [35] J. S. Douglas, H. Habibian, C.-L. Hung, A. V. Gorshkov, H. J. Kimble, and D. E. Chang. Quantum many-body models with cold atoms coupled to photonic crystals. *Nature Photonics*, 9(5):326–331, 2015. [19](#)
- [36] J. Bünenmann. A slave-boson mean-field theory for general multi-band hubbard models. *physica status solidi (b)*, 248(1):203–211, 2011. [20](#)

- [37] Benjamin Schumacher and M. A. Nielsen. Quantum data processing and error correction. *Physical Review A*, 54(4):2629–2635, 1996. [21](#)
- [38] V. Vedral. The role of relative entropy in quantum information theory. *Reviews of Modern Physics*, 74(1):197–234, 2002. [21](#)
- [39] Pasquale Calabrese and John Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2004(06), 2004. [21](#)
- [40] H Casini and M Huerta. Entanglement entropy in free quantum field theory. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(50):504007, 2009. [21](#)
- [41] Luca Bombelli, Rabinder K. Koul, Joohan Lee, and Rafael D. Sorkin. Quantum source of entropy for black holes. *Physical Review D*, 34(2):373–383, 1986. [21](#)
- [42] Luigi Amico, Rosario Fazio, Andreas Osterloh, and Vlatko Vedral. Entanglement in many-body systems. *Reviews of Modern Physics*, 80(2):517–576, 2008. [21](#)
- [43] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. Stoof. Quantum phases in an optical lattice. *Physical Review A*, 63(5), 2001. [21](#)
- [44] D. B. Dickerscheid, D. van Oosten, P. J. Denteneer, and H. T. Stoof. Ultracold atoms in optical lattices. *Physical Review A*, 68(4), 2003.
- [45] Shraddha Sharma, Simon B. Jäger, Rebecca Kraus, Tommaso Roscilde, and Giovanna Morigi. Quantum critical behavior of entanglement in lattice bosons with cavity-mediated long-range interactions. *Physical Review Letters*, 129(14), 2022. [45](#)
- [46] Irénée Frérot and Tommaso Roscilde. Entanglement entropy across the superfluid-insulator transition: A signature of bosonic criticality. *Physical Review Letters*, 116(19), 2016. [21, 33, 34, 45](#)
- [47] A. Osterloh, Luigi Amico, G. Falci, and Rosario Fazio. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature*, 416(6881):608–610, 2002. [21](#)
- [48] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev. Entanglement in quantum critical phenomena. *Physical Review Letters*, 90(22), 2003. [21](#)
- [49] Alioscia Hamma, Radu Ionicioiu, and Paolo Zanardi. Bipartite entanglement and entropic boundary law in lattice spin systems. *Physical Review A*, 71(2), 2005.
- [50] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio. colloquium: Area laws for the entanglement entropy. *Reviews of Modern Physics*, 82(1):277–306, 2010. [21](#)

- [51] Alexei Kitaev and John Preskill. Topological entanglement entropy. *Physical Review Letters*, 96(11), 2006. [21](#)
- [52] Michael Levin and Xiao-Gang Wen. Detecting topological order in a ground state wave function. *Physical Review Letters*, 96(11), 2006. [21](#)
- [53] Alfred Wehrl. General properties of entropy. *Reviews of Modern Physics*, 50(2):221–260, 1978. [24](#)
- [54] J M Zhang and R X Dong. Exact diagonalization: The bose–hubbard model as an example. *European Journal of Physics*, 31(3):591–602, 2010. [26](#)
- [55] C. Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 45(4):255, 1950. [26](#)
- [56] P. J. Cameron. *Combinatorics: Topics, techniques, algorithms*. Cambridge University Press, 1994. [27](#)
- [57] Piers Coleman. New approach to the mixed-valence problem. *Physical Review B*, 29(6):3035–3044, 1984. [34](#)
- [58] Ricardo Zarzuela and Jairo Sinova. Effective spin-charge transport theory and spin-transfer physics in frustrated magnets within the slave-boson approach. *Physical Review B*, 105(2), 2022. [34](#)
- [59] Gabriel Kotliar and Jialin Liu. Superexchange mechanism andd-wave superconductivity. *Physical Review B*, 38(7):5142–5145, 1988. [34](#)
- [60] Irénée Frerot and Tommaso Roscilde. Area law and its violation: A microscopic inspection into the structure of entanglement and fluctuations. *Physical Review B*, 92(11), 2015. [45](#)