

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CENTRO FACULTAD DE QUÍMICA

UNIVERSIDAD DE MURCIA

# **Sistemas cuánticos interactuantes en baja dimensionalidad**

Memoria presentada para optar al grado de doctor en físicas por:

Manuel Pino García

2013

---

Directores:

Miguel Ortuño Ortín

Andrés M. Somoza Gimeno



# Agradecimientos

En primer lugar, quiero expresar mi agradecimiento a los profesores Miguel Ortuño Ortín y Andrés M. Somoza Gimeno por haberme dado la oportunidad de realizar la tesis bajo su atenta supervisión, por sus numerosas enseñanzas y por su enorme generosidad humana e intelectual.

Quiero agradecer al profesor Dieter Jaksch por haberme acogido en su grupo de investigación en la Universidad de Oxford y al doctor Stephen Clark por todo el tiempo que me dedicó cuando estuve allí. Asimismo, me gustaría expresar mi gratitud al doctor Javier Prior por la ayuda que siempre me ha prestado junto a su inestimable ánimo.

A Pablo Serna, le agradezco su ayuda y compañía durante estos años, además del haber compartido conmigo momentos un tanto difíciles en el despacho. También estoy en deuda con el resto de personas que me han ayudado, de una u otra forma, o simplemente han hecho mucho más agradable el tiempo que he empleado en la realización de esta tesis. Algunos de ellos son; Manuel Caravaca, Sonia Jerez, Raquel Llorente, Elisa Palacios, Juan José Gómez, Rafael García Molina, Rocío Baró...

A mis padres: Francisco y Mercedes, y a mis hermanos les tengo que agradecer infinidad de cosas. Una de ellas es el apoyo que siempre me han prestado. A Carmen, los buenos ratos que hemos pasado durante estos cuatro años.



# Publicaciones

El trabajo que presentamos en esta memoria ha dado lugar a las siguientes publicaciones y contribuciones a congresos:

## Artículos:

- M. PINO, A. M. SOMOZA Y M. ORTUÑO, Quantum Coulomb gap in low dimensions, *Physical Review B*, **86**, 094202 (2012).
- M. PINO, J. PRIOR, A. M. SOMOZA, D. JAKSCH Y S. R. CLARK, Reentrance and entanglement in the one-dimensional Bose-Hubbard model, *Physical Review A*, **86**, 023631 (2012).
- M. PINO, J. PRIOR Y S. R. CLARK, Capturing the re-entrant behavior of one-dimensional Bose-Hubbard model. *Physica Status Solidi B*, 48308 (2012)
- M. PINO, A. M. SOMOZA Y M. ORTUÑO, Quantum Coulomb gap, *Journal of Physics: Conference Series* **376** (2012) 012007.

## Contribuciones a congresos:

- M. PINO, A. M. SOMOZA Y M. ORTUÑO. Quantum Coulomb gap. Póster presentado en: *Strongly correlated electronic systems, beyond Fermi liquid theory*. Les Houches (Francia), abril 11 – 21, 2011.
- M. ORTUÑO, A. M. SOMOZA Y M. PINO. Transport in Electron Glasses. Charla presentada en: *Nanomediterraneo – 3*. Palma de Mallorca (España), junio 10, 2011.

- M. PINO, A. M. SOMOZA Y M. ORTUÑO. Quantum Coulomb gap. Charla invitada en: *Transport in Interacting Disordered Systems* – 14. Acre (Israel), septiembre 5 – 8, 2011.
- M. PINO, A. M. SOMOZA Y M. ORTUÑO. Localization for long range interactions. Póster presentado en: *Transport in Interacting Disordered Systems* – 14. Acre (Israel), septiembre 5 – 8, 2011.
- M. PINO, A. M. SOMOZA Y M. ORTUÑO. Simulación en sistemas cuánticos desordenados. Charla invitada en: *Programación en el supercomputador Ben Arabi* – 2. Murcia (España), marzo 9, 2012.

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Generalidades</b>	<b>9</b>
1.1. Modelos . . . . .	11
1.1.1. Modelo de fuerte ligadura . . . . .	11
1.1.2. Modelos interactuantes . . . . .	13
1.2. Transiciones de fase cuánticas . . . . .	15
1.3. Sistemas fermiónicos desordenados . . . . .	19
1.3.1. Materiales desordenados . . . . .	21
1.3.2. Localización inducida por el desorden . . . . .	22
1.3.3. Gap de Coulomb clásico . . . . .	29
1.3.4. Conductividad en aislantes de Anderson . . . . .	35
1.4. Modelo de Bose-Hubbard . . . . .	39
1.4.1. Redes ópticas . . . . .	41
1.4.2. Simetrías y parámetro de orden superfluido . . . . .	43
1.4.3. Localización inducida por la interacción . . . . .	44
1.4.4. Transición de fase . . . . .	46
1.5. Entrelazado . . . . .	55
<b>2. Métodos numéricos</b>	<b>59</b>
2.1. Sistemas electrónicos e interactuantes en el regimen clásico . . . . .	60
2.2. Espacio de estados en sistemas interactuantes . . . . .	61
2.2.1. Simetrías . . . . .	62

---

2.3.	Diagonalización exacta . . . . .	63
2.4.	Cálculo del gap de Coulomb mediante diagonalización exacta . . . .	68
2.5.	Simulación a entrelazado limitado . . . . .	71
2.6.	Estados producto de matrices . . . . .	73
2.6.1.	Estados en la forma de Vidal . . . . .	77
2.7.	Evolución en el tiempo con un método de diezmado infinito (iTEBD)	78
2.7.1.	Resultados previos . . . . .	79
2.7.2.	Implementación . . . . .	84
<b>3.</b>	<b>Gap de Coulomb cuántico</b>	<b>89</b>
3.1.	Efectos cuánticos en el gap de Coulomb . . . . .	90
3.1.1.	Trabajos previos . . . . .	92
3.1.2.	Modelo . . . . .	94
3.2.	Diagonalización exacta . . . . .	95
3.2.1.	Efectos de tamaño finito . . . . .	96
3.2.2.	Resultados . . . . .	96
3.3.	Teoría de perturbaciones en el espacio de configuraciones . . . . .	97
3.3.1.	Correcciones a los elementos de matriz . . . . .	101
3.3.2.	Correcciones a las energías . . . . .	104
3.3.3.	Implementación del cálculo . . . . .	107
3.4.	Resultados numéricos mediante teoría de perturbaciones . . . . .	110
3.4.1.	Densidad de estados en el nivel de Fermi . . . . .	111
3.4.2.	Ocupación un tercio . . . . .	112
3.5.	Análisis de resultados . . . . .	113
<b>4.</b>	<b>Localización e interacción</b>	<b>123</b>
4.1.	Resultados previos . . . . .	124
4.2.	Modelo . . . . .	126
4.3.	Longitud de localización en sistemas interactuantes . . . . .	127
4.3.1.	Cálculo . . . . .	129
4.4.	Interacciones de largo alcance en el extremo de la banda. . . . .	131

---

4.5. Extremo <i>vs.</i> centro de la banda . . . . .	132
4.6. Centro de la banda . . . . .	134
<b>5. Diagrama de fases del modelo Bose-Hubbard unidimensional</b>	<b>141</b>
5.1. Modelo de BH unidimensional . . . . .	142
5.1.1. Trabajos previos . . . . .	143
5.1.2. Modelo . . . . .	145
5.2. Tres aproximaciones al diagrama de fases . . . . .	146
5.2.1. Campo medio en <i>clusters</i> finitos . . . . .	146
5.2.2. Diagonalización exacta . . . . .	149
5.2.3. Grupo de renormalización . . . . .	151
5.3. Entrelazado finito . . . . .	158
5.3.1. Transición de fase . . . . .	159
5.3.2. Marcas de la criticalidad . . . . .	161
5.3.3. Espectro de Schmidt . . . . .	164
5.3.4. Diagrama de fases en función del entrelazado . . . . .	167
5.3.5. Punto Kosterlitz-Thouless a densidad unidad . . . . .	173
<b>Summary</b>	<b>181</b>
<b>Acrónimos</b>	<b>199</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>201</b>



# Introducción

Las interacciones entre diferentes objetos son algo cotidiano en nuestras vidas. Como ejemplo podemos citar la fricción que aparece entre las superficies de dos objetos o el intercambio de calor entre distintos cuerpos cercanos. También en el mundo microscópico las interacciones juegan un papel fundamental siendo responsables, por ejemplo, de las fases líquida o sólida. Es cuanto menos curioso que, a pesar de esta importancia, los modelos más estudiados en física no suelen contener interacciones entre los diferentes constituyentes que los forman. La explicación a esta aparente paradoja reside en que los modelos interactuantes son, habitualmente, muy difíciles de resolver mediante técnicas analíticas. Éstas han sido las únicas herramientas disponibles para abordar los problemas en física, al menos hasta la década de los 50. La situación ha cambiado en los últimos años debido al espectacular aumento en la capacidad de cálculo de los ordenadores modernos. Hoy en día, los métodos computacionales son una herramienta muy importante que permite el estudio de sistemas interactuantes extremadamente difíciles de tratar mediante métodos exactos.

El trabajo que aquí presentamos puede ser englobado dentro de la física de muchos cuerpos o *many-body physics*. En esta área, se trabaja con sistemas compuestos por multitud de partículas que interactúan entre sí. En la física de muchos cuerpos no se pretende estudiar las entidades básicas que conforman el sistema, pues sus características suelen ser conocidas de antemano, sino el análisis de nuevas propiedades que aparecen debido a las interacciones entre las diferentes partículas. Estos comportamientos colectivos pueden dar lugar a que el sistema *many-body* exhiba características radicalmente distintas a las que poseen las partículas que lo

forman. A este tipo de propiedades se les suele llamar fenómenos emergentes.

En esta memoria hemos examinado ciertos modelos bosónicos y fermiónicos en los que las interacciones juegan un papel fundamental. Nuestro interés se centra en sistemas cuánticos unidimensionales (1D) y bidimensionales (2D). En un principio, podría parecer demasiado restrictivo considerar sistemas de baja dimensionalidad. Por el contrario, estos casos son muy interesantes porque las fluctuaciones cuánticas son mayores para dimensiones pequeñas. Además, las interacciones suelen ser más importantes cuando la dimensión es reducida, pues los impactos entre partículas son mucho más frecuentes. De hecho, los sistemas 1D exhiben propiedades muy interesantes que en numerosas ocasiones no tienen análogo en sistemas de mayor dimensionalidad. Por ejemplo, el líquido de Luttinger, que exhibe separación de los grados de libertad de espín y de carga, sólo ocurre en sistemas fermiónicos interactuantes en 1D. En dimensiones mayores, los electrones interactuantes suelen formar un líquido de Fermi con características similares a las de los electrones no interactuantes.

Los sistemas fermiónicos que tratamos son los sólidos no cristalinos o desordenados. Estos materiales se caracterizan por tener propiedades locales aleatorias que destruyen la simetría translacional del sistema. Los materiales desordenados son muy abundantes. De hecho, todos los sólidos en la naturaleza tienen cierto grado de desorden debido, por ejemplo, a las imperfecciones de la red o a la existencia de impurezas. Algunos materiales desordenados relevantes en física son los semiconductores dopados, sólidos amorfos o las capas de inversión.

En concreto, nosotros estudiamos el modelo de Anderson que describe electrones sin espín en redes en las que en cada sitio existe un potencial más o menos aleatorio. Anderson (1958) probó que, debido a la carencia de simetría translacional, el desorden puede llegar a localizar a los electrones en regiones relativamente pequeñas del sistema. Cuando esto ocurre no es posible el transporte de carga a temperatura cero y diremos que el sistema es un aislante de Anderson. En esta fase, las cargas poseen una movilidad reducida siendo incapaces de apantallar la interacción de manera efectiva. Esta es la razón por la que es muy importante tener en cuenta las

---

interacciones en la fase localizada.

Parte de este trabajo lo dedicamos al estudio de los aislantes de Anderson cuando los electrones están localizados en una región muy pequeña, del orden del espaciado de la red, y las interacciones son de largo alcance. En este régimen, hemos obtenido la densidad de estados (DDE) del sistema. Intuitivamente, esta magnitud da información acerca de la cantidad de estados en los que se puede introducir, o eliminar, un electrón en el sistema para una energía dada. Hasta ahora, se ha alcanzado un conocimiento relativamente bueno de la DDE en el régimen clásico, es decir, cuando los electrones están completamente localizados y no poseen movilidad alguna. En este caso, la interacción de Coulomb provoca una disminución en la DDE cerca del nivel de Fermi conocida como gap de Coulomb (Pollak, 1970; Efros y Shklovskii, 1975). En cambio, la situación cuando se introducen efectos cuánticos no está nada clara. Hemos de notar la existencia de varios trabajos previos que tratan este problema y que obtienen conclusiones contradictorias entre sí. Uno de los objetivos principales de esta tesis es caracterizar el gap de Coulomb cuando los efectos cuánticos son pequeños pero no nulos.

La localización de Anderson puede ocurrir tanto en los estados de una partícula como en los estados de muchos-cuerpos. A día de hoy se ha logrado un buen entendimiento de las condiciones bajo las cuales las partículas no interactuantes se localizan. En resumen, cualquier desorden finito localiza todos los estados de una partícula en sistemas 1D y 2D. El caso 3D es un tanto más complejo pues los estados de una partícula pueden estar localizados o deslocalizados dependiendo de su energía. Esto puede dar lugar a una transición metal-aislante al variar la densidad de electrones en el sistema a temperatura cero. No está nada claro si las interacciones entre electrones pueden producir cambios cualitativos en las propiedades de localización respecto al caso no interactuante. Por ejemplo, algunos experimentos en sistemas 2D parecen indicar la existencia de una fase deslocalizada que se piensa es consecuencia de las interacciones (Kravchenko y Sarachik, 2004). Basko *et al.* (2006) han postulado la existencia de una fase extendida a temperaturas suficientemente altas cuando se incluyen interacciones de corto alcance para sistemas, en los que

en ausencia de interacción, todos los estados de una partícula están localizados. El mecanismo por el cual aparece esta fase suele ser denominado *many-body localization* e implica que los estados con energía cercana a cero han de estar deslocalizados. Motivados por este último problema, estudiaremos las propiedades de localización de electrones interactuantes en sistemas 1D con desorden para diferentes energías.

Una de las consecuencias más llamativas que provoca la interacción entre sistemas cuánticos es la capacidad de éstos para exhibir entrelazado. El concepto de entrelazado, acuñado en primera instancia por Schrödinger, juega un papel muy importante en diversos campos de la física como la criptografía o la computación cuántica. Muchos de los fenómenos más sorprendentes de la mecánica cuántica, como la paradoja de Einstein, Podolsky y Rosen, se deben a que las diferentes partes de un sistema están entrelazadas. De manera muy resumida, podemos decir que el entrelazado es el responsable de que un sistema exhiba correlaciones cuánticas entre sus componentes. Por ello, esta magnitud tiene gran importancia en el análisis de las transiciones de fase cuánticas.

En general, la simulación de sistemas cuánticos interactuantes mediante métodos usuales, como diagonalización de una matriz, no es factible. Sin embargo, existen algoritmos que simulan eficientemente sistemas cuánticos 1D con interacciones de corto alcance, al menos lejos de un punto crítico. Para ello, aproximan el estado del sistema a temperatura cero utilizando un entrelazado acotado. El método *Density Matrix Renormalization Group* desarrollado por White (1992) fue el primero en explotar este tipo de aproximaciones. Este algoritmo y sus subsecuentes extensiones son, en buena parte, responsables de la gran atención que han recibido los sistemas 1D fuertemente correlacionados en los últimos 20 años. En esta memoria hemos empleado uno de estos métodos, conocido como *infinite Time-Evolving Block Decimation* (iTEBD) e introducido por Vidal (2007), para obtener ciertas propiedades del modelo que comentamos a continuación.

En lo referente a sistemas bosónicos vamos a analizar el modelo de Bose-Hubbard (BH). Éste describe bosones con interacciones de contacto en una red periódica sin desorden. De manera general, los sistemas de bosones con interacciones de corto

---

alcance poseen dos fases a temperatura cero. La fase aislante de Mott (MI) se caracteriza por la existencia de un gap, o región prohibida en energías, entre el estado fundamental y los estados excitados menos energéticos. Debido a este gap no hay transporte de materia a bajas temperaturas. La otra fase sí que permite este transporte y se suele denominar como superfluida (SF). Esta fase posee excitaciones colectivas a bajas energías, similares a los fonones, con un momento bien definido y relación de dispersión lineal. Esto último, hace que la fase SF cumpla el criterio de Landau para la existencia de circulación de un fluido sin disipación.

El modelo de BH ha despertado un renovado interés debido a su utilidad para describir la física de ciertos montajes experimentales conocidos como redes ópticas (Jaksch *et al.*, 1998). En estos dispositivos experimentales se utiliza la luz de varios láseres para producir un potencial periódico en los átomos neutros confinados mediante campos magnéticos. Las propiedades de las redes ópticas son en muchos casos análogas a las de los sólidos que podemos encontrar en la naturaleza. Gracias al gran control que se posee sobre los parámetros del sistema, estos dispositivos experimentales son un banco de pruebas formidable para el estudio de fenómenos comunes a muchos sistemas cuánticos interactuantes.

El modelo BH exhibe un diagrama de fases reentrante en sistemas 1D a temperatura cero y densidades cercanas a la unidad. Suponemos dos fase A y B, la reentrada aparece cuando variando monótonamente un parámetro del sistema obtenemos una sucesión de transiciones de fase A-B-A-B. Por ejemplo, en el caso de que el agua exhibiese un diagrama de fases térmico reentrante, tendríamos que calentando la misma podría pasar de líquido a vapor, luego a líquido y finalmente acabar siendo vapor. Este comportamiento en el modelo BH se debe al carácter interactuante del sistema y es difícil de analizar. La existencia de reentrada ha sido establecida en trabajos previos utilizando métodos bastante sofisticados (Elstner y Monien, 1999; Kühner *et al.*, 2000). En cambio, nuestra intención es describir este fenómeno utilizando aproximaciones simples que permitan obtener una mayor intuición del mismo. En concreto, veremos cuáles son las correlaciones cuánticas mínimas que ha de exhibir el sistema para que aparezca un diagrama de fases reen-

trante.

De manera única en sistemas 1D, la transición entre la fase MI y la SF en el modelo BH puede ocurrir sin discontinuidades en la energía ni en ninguna de sus derivadas. Esto ocurre en los puntos críticos de Kosterlitz-Thouless (KT). La caracterización de este tipo de transiciones es compleja y su estudio requiere, en numerosas ocasiones, métodos diferentes a los que se emplean en otras transiciones de fase como las de segundo orden. La determinación del punto KT en el modelo de BH para densidad unidad ha sido objeto de numerosos trabajos sin llegar a un acuerdo unánime al respecto. En nuestro desarrollo, utilizamos una extrapolación en el entrelazado para hallar la localización de este punto. Hemos de notar que nuestros resultados han sido obtenidos en el límite termodinámico y en consecuencia, nuestra estimación del punto KT no contiene correcciones logarítmicas en el tamaño. También intentaremos establecer ciertas conexiones entre este punto crítico y el fenómeno de la reentrada.

En vistas de lo ya expuesto, podemos enumerar en cuatro los objetivos principales que perseguimos en esta tesis:

- (1) Caracterización de la DDE en sistemas con interacciones de largo alcance cuando los efectos cuánticos son pequeños en sistemas 1D y 2D.
- (2) Estudio de la influencia de las interacciones en las propiedades de localización de estados aislante de Anderson a diferentes energías en sistemas 1D.
- (3) Determinación de las correlaciones cuánticas mínimas necesarias que debe poseer el sistema BH para exhibir reentrada.
- (4) Localización del punto crítico KT en el modelo de BH a densidad unidad utilizando un análisis a entrelazado finito.

La tesis que presentamos a continuación está estructurada en 5 capítulos. En el primero introducimos propiedades básicas de los sistemas fermiónicos desordenados y del modelo de BH. La mayoría de los resultados que hemos encontrado han sido obtenidos utilizando métodos computacionales. Por esta razón, hemos creído

necesario dedicar el segundo capítulo a introducir algunos de los algoritmos que utilizamos. El primer punto, gap de Coulomb cuántico, de los objetivos que acabamos de enumerar se aborda en el capítulo 3, mientras que el capítulo 4 contiene los resultados que conciernen al segundo punto, es decir, longitud de localización de estados excitados. Los puntos tercero y cuarto de los objetivos, que son los relativos al modelo de BH, se tratan en el capítulo 5. En la primera parte de este último capítulo también describimos un método, basado en grupo de renormalización, capaz de producir un diagrama de fases para el modelo BH que exhibe reentrada. Finalizamos esta memoria con un resumen y exponiendo las conclusiones más importantes que se derivan de nuestro trabajo.



# Generalidades

Los problemas que nos ocupan en esta memoria tienen que ver con la transición entre las fases metálica y aislante a temperatura cero, así como con la caracterización de cada una de estas fases en ciertos modelos fermiónicos y bosónicos interactuantes. En este primer capítulo introducimos ciertos conceptos y resultados preliminares necesarios para entender los desarrollos posteriores.

Los sistemas fermiónicos que analizamos son los sólidos no cristalinos o desordenados. La localización debida a la ausencia de simetría translacional es una de las nociones más importantes en sistemas desordenados. Este fenómeno da lugar a la existencia de una fase conocida como aislante de Anderson en la que las cargas poseen movilidad reducida y no son capaces de apantallar la interacción de manera efectiva. Esta es la razón por la cual las interacciones suelen ser importantes en este tipo de aislantes. Otro concepto muy importante para nuestro trabajo es la existencia de un gap en la DDE, conocido como gap de Coulomb, cuando las partículas están completamente localizadas y las interacciones son de largo alcance.

En lo relativo a sistemas bosónicos, nuestro trabajo gira en torno la transición entre la fase MI y la SF en el modelo BH. Es por ello importante caracterizar adecuadamente cada una de estas fases y la transición. Entre las propiedades más interesantes que exhibe el modelo de BH en sistemas 1D, encontramos la aparición de un diagrama de fases reentrante o la existencia de puntos críticos KT.

La estructura de este capítulo es la siguiente. En la sección 1.1, analizamos diversos modelos con relevancia para nuestro trabajo. En la siguiente sección, hacemos una breve introducción de las transiciones de fase cuánticas. Éstas son transiciones que aparecen a temperatura cero variando alguno de los parámetros del sistema

distintos a la temperatura.

En la sección 1.3, revisamos resultados básicos para sistemas fermiónicos desordenados: caracterización de las funciones de onda de una partícula localizada y condiciones bajo las cuales ocurre la localización en el caso no interactuante. Después de esto, procedemos al análisis del gap de Coulomb que aparece en la DDE para sistemas fermiónicos completamente localizados con interacciones de largo alcance. También veremos las propiedades de conducción en esta clase de sistemas a bajas temperaturas.

La sección 1.4 está dedicada a analizar el modelo BH. Para ello, examinamos las características de la fase MI y SF, así como la existencia de la transición. Especial énfasis pondremos en el análisis de los puntos críticos KT. Finalizamos calculando el diagrama de fases a temperatura cero utilizando dos aproximaciones diferentes. La primera está basada en teoría de perturbaciones y la segunda en campo medio. Ninguna de ellas consigue reproducir un diagrama de fases reentrante.

Por último, en la sección 1.5, introducimos la noción de entrelazado en sistemas cuánticos y discutimos la importancia de este concepto en métodos del tipo DMRG.

## 1.1. Modelos

Uno de los objetivos capitales de la física es predecir el comportamiento de sistemas reales utilizando modelos matemáticos. Estos han de contener los ingredientes claves para reproducir las propiedades del sistema en cuestión, pero recurriendo a la mínima complejidad matemática posible. A continuación, examinamos algunos modelos con relevancia para nuestro trabajo.

En primer lugar vamos a analizar dos modelos no interactuantes. Todos los hamiltonianos se expresan en segunda cuantización. Para referirnos a operadores de creación o destrucción fermiónicos empleamos la letra  $c$ , mientras que los bosónicos serán denotados con la letra  $b$ . Cuando no se especifique la naturaleza de las partículas a tratar, utilizaremos la letra  $a$ .

### 1.1.1. Modelo de fuerte ligadura

Hay muchas situaciones en las que es necesario estudiar el comportamiento de partículas que experimentan un potencial con multitud de mínimos, o pozos de potencial. Por ejemplo, este potencial puede ser creado por los iones de un sólido o por la luz de un láser en las redes ópticas. La aproximación de fuerte ligadura consiste en expresar el hamiltoniano en una base de estados localizados alrededor de cada pozo de potencial. De esta forma, un hamiltoniano de fuerte ligadura debe contener, al menos, un término asociado a la energía que posee una partícula por estar en un pozo de potencial y otro que describe la probabilidad de que una partícula en un determinado pozo pase a estar en otro mediante un proceso de túnel. Hemos de notar que el modelo de fuerte ligadura es una buena aproximación cuando la energía de las partículas es pequeña comparada con la amplitud de los pozos de potencial.

En el caso de un potencial periódico y en ausencia de interacciones entre las partículas, podemos expresar el hamiltoniano de fuerte ligadura en segunda cuantización como:

$$H = - \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij} \left( a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma} + a_{j,\sigma}^{\dagger} a_{i,\sigma} \right) - \mu \sum_i n_{i,\sigma} , \quad (1.1)$$

donde la suma en  $i, j$  se extiende sobre todos los sitios de la red y en  $\sigma$  sobre los posibles valores del espín de la partícula en la dirección  $z$ . Los símbolos  $a_{i,\sigma}^{\dagger}$ ,  $a_{i,\sigma}$  y  $n_{i,\sigma}$  representan los operadores creación, destrucción y número relativos a una partícula con espín  $\sigma$  en un cierto orbital atómico en el sitio  $i$ -ésimo de la red. Por otro lado, los parámetros  $t_{ij}$  corresponden a la probabilidad de que una partícula en el sitio  $i$  pase a estar en el sitio  $j$  mediante un proceso de túnel. En nuestro trabajo siempre utilizamos redes cúbicas y establecemos  $t_{ij} = 0$  si los sitios  $i, j$  no son primeros vecinos. Cuando  $i, j$  son primeros vecinos hacemos  $t_{ij} = t$  y nos referimos a  $t$  como parámetro de *hopping*. Finalmente, el potencial químico es  $\mu$ .

#### Modelo de Anderson

El Hamiltoniano de fuerte ligadura que aparece en la ecuación (1.1) no describe bien las propiedades de los electrones en muchos de los sólidos que encontramos en la

naturaleza. Esto se debe a que, en mayor o menor grado, todos los materiales tienen ciertas imperfecciones que hacen que el potencial que experimentan las partículas no sea del todo periódico. Una forma de emular muchas de las propiedades de estos sólidos no cristalino es añadir al hamiltoniano anterior una energía diferente en cada sitio de la red. De esta forma obtenemos el hamiltoniano de Anderson como:

$$H = \sum_{i,\sigma} (\phi_i - \mu) n_{i,\sigma} - t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} (a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma} + a_{j,\sigma}^{\dagger} a_{i,\sigma}), \quad (1.2)$$

donde el símbolo  $\langle i, j \rangle$  significa que  $i, j$  son primeros vecinos y las energías de sitio  $\phi_i$  toman valores aleatorios en el intervalo  $[-W/2, W/2]$ . Para el límite  $t/W \gg 1$  se obtiene de nuevo la ecuación (1.1).

### 1.1.2. Modelos interactuantes

A partir de los dos modelos que acabamos de examinar podemos construir los sistemas bosónicos y fermiónicos interactuantes que estudiamos en esta memoria. Para ello, será necesario añadir al hamiltoniano un término que simule las interacciones entre partículas. Éste ha de tener la forma:

$$\sum_i \sum_{j>i} V_{i,j} n_i n_j, \quad (1.3)$$

donde  $n_i, n_j$  son los operadores número de partículas en el sitio  $i$  y  $j$  respectivamente y  $V_{i,j}$  son coeficientes reales que determinan el tipo de interacción. Seguidamente, examinamos algunos ejemplos de modelos interactuantes importantes en nuestro trabajo.

#### Modelo de Vidrios de Coulomb

En un aislante de Anderson en el que los electrones están fuertemente localizados, podemos despreciar el término de *hopping* frente a las otras energías del sistema. En este régimen, las interacciones cobran importancia. Los vidrios de Coulomb son sistemas electrónicos en el régimen completamente localizado y con interacciones de Coulomb. Un hamiltoniano que describe adecuadamente muchas de sus propiedades

es:

$$H = \sum_i \phi_i (n_i - \mu) + V \sum_i \sum_{j>i} \frac{(n_i - K)(n_j - K)}{r_{i,j}}, \quad (1.4)$$

donde  $K$  es la constante de compensación que se incluye para asegurar la neutralidad de carga, mientras que el parámetro  $V$  controla la importancia de las interacciones. La cantidad  $r_{i,j}$  es la distancia entre los sitios  $i$  y  $j$ . El análisis del hamiltoniano que acabamos de presentar puede ser realizado dentro del marco de la física clásica.

### Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard incluye interacciones entre electrones en el mismo sitio. El hamiltoniano de Hubbard es:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (1.5)$$

donde el último término es una interacción entre electrones en el mismo sitio de la red y con espín diferente. Gracias al término interactuante, el modelo de Hubbard puede describir una transición metal-aislante.

### Modelo de Bose-Hubbard

La versión bosónica del hamiltoniano anterior es el modelo de Bose-Hubbard:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^{\dagger} b_j + b_j^{\dagger} b_i) - \mu \sum_j n_j + \frac{U}{2} \sum_j n_j (n_j - 1), \quad (1.6)$$

donde hemos utilizado los símbolos  $b_i, b_i^{\dagger}$  para representar los operadores creación y destrucción de un bosón en el sitio  $i$ . En este hamiltoniano no se tiene en cuenta los grados de libertad del espín. Analizaremos con más detalle el hamiltoniano de BH en la sección 1.4.

## 1.2. Transiciones de fase cuánticas

Las transiciones entre distintas fases de una misma sustancia son fenómenos habituales en nuestras vidas. Un ejemplo de ello es la ebullición o la vaporización

del agua. Las transiciones de fase ocurren cuando hay un cambio cualitativo en las propiedades del sistema debido a una modificación pequeña de alguno de los parámetros externos. Cuando este parámetro es la temperatura diremos que es una transición térmica. Las transiciones de fase cuánticas ocurren a temperatura cero cuando se varía alguno de los parámetros del hamiltoniano. Clasificamos en dos grandes grupos las transiciones de fase. En el primero, existe coexistencia de fases y diremos que la transición es de primer orden. Cuando la transición ocurre sin coexistencia diremos que es continua. Estas últimas transiciones también suelen ser referidas como puntos críticos. En lo que sigue suponemos transiciones continuas.

Una transición térmica puede ser entendida de manera general como la competición entre la energía y la entropía de un sistema. A bajas temperaturas, el estado del sistema es el de mínima energía que suele pertenecer a una fase ordenada. A altas temperaturas, dominan los estados macroscópicos con mayor entropía, que son los que pertenecen a la fase desordenada. En muchos casos existe un parámetro de orden asociado a la transición. Esto es, una magnitud que toma un valor cero en la fase desordenada y es distinta de cero en la ordenada.

Como ejemplo, consideramos la transición ferromagnética en sistemas tridimensionales (3D). Para este tipo de transiciones el parámetro de orden es la magnetización  $|\vec{m}|$ . Consideramos una red de espines donde el estado de mínima energía consiste en tener todos los espines apuntando en la misma dirección. A temperatura arbitraria  $T$ , el estado del sistema ha de minimizar la energía libre de Helmholtz:

$$A = E - TS, \quad (1.7)$$

donde  $E$  es la energía del sistema y  $S$  es la entropía. A bajas temperaturas, el estado del sistema es el de mínima energía y todos los espines apuntan en la misma dirección dando lugar a una magnetización distinta de cero,  $|\vec{m}| > 0$ . Esta es la fase ordenada. A temperaturas suficientemente altas, el sistema adopta el estado de máxima entropía de forma que cada espín apunta en una dirección aleatoria y la magnetización se anula,  $|\vec{m}| = 0$ . Ésta es la fase desordenada.

Un dominio en la fase ordenada consiste en una región en la que los espines apuntan en una dirección diferente a la de la magnetización global del sistema. Este

tipo de excitaciones poseen una energía proporcional a la frontera del dominio. En sistemas 1D, esta energía se desvanece en el límite termodinámico. Los dominios pueden establecerse en cualquier región del sistema y por ello la entropía será del orden de  $S \sim \ln(N)$ , donde  $N$  es el tamaño del sistema. Por esta razón, la inclusión de dominios es estable a temperatura finita, pues reducen la energía libre de Helmholtz. De esto concluimos que la fase ordenada sólo existe a temperatura estrictamente cero para sistemas 1D. Este argumento fue utilizado en primer lugar por Landau para mostrar que los sistemas 1D clásicos con interacciones de corto alcance no poseen fases ordenadas a temperaturas distintas de cero y, en consecuencia, no pueden sufrir una transición de fase térmica. No está claro hasta que punto los efectos cuánticos pueden dar lugar a transiciones de fase térmicas en sistemas 1D (Basko *et al.*, 2006).

En la fase ordenada hay fluctuaciones térmicas del parámetro de orden alrededor de su valor promedio. Además, pueden existir correlaciones entre las fluctuaciones en sitios cercanos. En concreto, existe una longitud de correlación bien definida,  $\xi$ , que controla el decaimiento exponencial de estas correlaciones en la fase desordenada. La hipótesis de escala consiste en asumir que cerca de la transición la longitud de correlación es la única escala de longitudes típica del sistema y, además, diverge en el punto crítico. Esta divergencia suele venir dada por una ley de potencias:

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (1.8)$$

donde:

$$t = (T - T_c) / T_c. \quad (1.9)$$

La temperatura crítica es  $T_c$  y  $\nu$  es un exponente crítico. Justo en el punto crítico, el sistema no posee ninguna longitud característica y es invariante bajo transformaciones de escala.

En muchas transiciones de fase cuánticas también es posible definir un parámetro de orden que diferencia la fase ordenada y la desordenada. En este caso, las fluctuaciones cuánticas en el parámetro de orden son las responsables del fenómeno crítico.

Al igual que la longitud de correlación,  $\xi$ , controla el decaimiento exponencial de las fluctuaciones en el espacio, existe un tiempo característico,  $\tau$ , que controla el tiempo promedio de vida de estas fluctuaciones. Según las hipótesis de escala, cerca del punto crítico  $\tau$  es la única escala de tiempos relevante del sistema. Además de una divergencia en  $\xi$ , similar a la de la ecuación (1.8), asumimos que  $\tau$  también diverge según una ley de potencias:

$$\tau \sim \xi^z, \quad (1.10)$$

donde  $z$  es el exponente dinámico crítico. En consecuencia, el punto crítico se caracteriza por tener invarianza bajo cambios de escala espacial y temporal. Para el caso  $z = 1$ , es posible comprobar que la transición ocurrirá de forma muy parecida al caso térmico en dimensión espacial  $d + 1$ . En el caso general, una transición de fase cuántica en dimensión  $d$  está relacionada con una transición de fase térmica en dimensión  $d + z$  (Vojta, 2003).

Las fluctuaciones cuánticas cerca de la transición consisten en excitaciones con una frecuencia típica  $\omega \sim 1/\tau$ . La energía de estas fluctuaciones,  $\Delta E$ , viene dada por:

$$\Delta E = \hbar\omega \sim |r|^{-\nu z}, \quad (1.11)$$

donde

$$r = (R - R_c) / R_c, \quad (1.12)$$

y  $R_c$  es el valor crítico del parámetro  $R$  cuya variación causa la transición. Esto implica que en el punto crítico el estado fundamental aparecerá degenerado en energías y el sistema no poseerá gap.

Examinamos el papel que juegan las simetrías del sistema en las transiciones de fase cuánticas. Decimos que un operador  $\mathcal{S}$  es una simetría del sistema cuando conmuta con el hamiltoniano. Utilizando resultados básicos de mecánica cuántica, un autoestado del hamiltoniano no degenerado debe ser autoestado de  $\mathcal{S}$ . En este caso, decimos que el autoestado conserva la simetría. En cambio, los niveles energéticos degenerados no tienen por qué conservar la simetría del hamiltoniano. En

el párrafo anterior hemos visto que el estado fundamental pasa a estar degenerado en un punto crítico. En este caso, puede ocurrir que el estado fundamental no sea invariante bajo alguna de las simetrías originales del hamiltoniano. El fenómeno por el cual un sistema simétrico bajo ciertas operaciones adopta un estado asimétrico se conoce como rotura espontánea de simetrías.

Un punto crítico cuántico en el que aparecen discontinuidades en la  $k$ -ésima derivada de la energía es una transición de orden  $k$ . Los fenómenos críticos de segundo orden son los más usuales. También puede ocurrir que la transición entre dos fases bien diferenciadas ocurra sin ningún tipo de discontinuidad. Nos referimos a este caso como transiciones de orden infinito. Este tipo de transiciones ocurren en los puntos críticos KT (Kosterlitz y Thouless, 1973), los cuales poseen características diferentes a otros puntos críticos más comunes. Por ejemplo, en un punto KT la longitud de correlación no diverge como una ley de potencias si no que lo hace según (Sachdev, 2001):

$$\xi \sim \exp\left(\frac{A}{\sqrt{|R - R_c|}}\right), \quad (1.13)$$

donde  $R_c$  es el valor crítico del parámetro  $R$  cuya variación causa la transición y  $A$  una constante real.

### 1.3. Sistemas fermiónicos desordenados

Los sistemas compuestos por muchos fermiones tienen gran relevancia en la física del estado sólido. Hoy en día se ha alcanzado una comprensión relativamente buena de los sólidos cristalinos. Estos se caracterizan por tener simetría translacional y, gracias al teorema de Bloch, podemos encontrar que sus estados electrónicos poseen una estructura de bandas. En cada una de estas bandas, los estados de una partícula están deslocalizados en toda la muestra y forman un continuo en energías. La diferencia en energías entre bandas depende del potencial periódico que forman los iones de la red. En general, una banda parcialmente llena contribuye al transporte de carga. Cuando todas las bandas están llenas o vacías y la distancia entre la

última banda ocupada y la primera vacía es mayor que la energía térmica  $k_B T$ , no habrá transporte de carga. Decimos en este caso que el material es aislante. Hemos de notar que las interacciones entre electrones no producen cambios cualitativos en el comportamiento de los sólidos cristalinos, al menos en sistemas 2D y 3D.

En muchas ocasiones, un sólido no cristalino posee propiedades locales sujetas a cierta aleatoriedad, que destruyen la simetría translacional del sistema. Por ejemplo, la distancia entre diferentes sitios puede variar dentro de un cierto rango o la energía de los estados electrónicos en cada ion de la red puede seguir una cierta distribución de probabilidad. Nos referimos a esta clase de materiales como desordenados.

En los sólidos desordenados no podemos utilizar el teorema de Bloch para simplificar el problema, pues no hay simetría translacional. Aún en el caso no interactuante, es muy difícil diagonalizar un hamiltoniano con desorden sin recurrir a métodos computacionales. Sin embargo, se han conseguido extraer conclusiones muy útiles acerca de los estados electrónicos utilizando herramientas analíticas como teoría de perturbaciones o grupo de renormalización. Uno de los resultados más importantes es que un desorden arbitrariamente pequeño puede llegar a localizar los estados de una partícula (Anderson, 1958). Un estado localizado no tiene un momento bien definido y el electrón está confinado en una región relativamente pequeña del sistema. En este caso, la conducción se anula a temperatura cero dando lugar a un aislante diferente a los que encontramos en sistemas cristalinos. Estos se conocen como aislantes de Anderson.

### 1.3.1. Materiales desordenados

A continuación enumeramos algunos materiales desordenados con relevancia en la física del estado sólido.

- **Semiconductores dopados.** Un semiconductor cristalino es un sólido que posee un gap, o franja de energías prohibidas, entre la banda de valencia y la de conducción. Al incluir impurezas en estos materiales, se elimina la simetría translacional de la red y el semiconductor puede exhibir caracterís-

ticas propias de los materiales desordenados (Shklovskii y Efros, 1984). Las impurezas añadidas poseen estados electrónicos en la franja prohibida de energías del semiconductor. Al conjunto de estos estados se les conoce como la banda de impurezas. Debido a que las impurezas se distribuyen aleatoriamente, los electrones en la banda de impurezas sienten un potencial en el que la distancia entre los mínimos, que corresponden a cierto orbital atómico en cada una de las impurezas, es también aleatoria. Cuando la densidad de impurezas es alta, los electrones pueden cambiar fácilmente de impureza mediante procesos de túnel. Esto es más difícil cuando la densidad de impurezas es pequeña. En este segundo caso, los estados electrónicos en la banda de impurezas están muy localizados y las interacciones entre electrones son importantes. Es posible inducir una transición metal aislante en los estados electrónicos variando la concentración de impurezas (Hess *et al.*, 1982). Como ejemplo de estos materiales podemos citar el germanio o silicio dopado.

- **Sólidos amorfos.** Los sólidos amorfos son aquellos que no poseen estructura cristalina. En algunos de estos materiales, como en el germanio amorfo, ocurre que la energía típica de desorden es mucho mayor que las involucradas en las interacciones entre electrones. En cambio, la inclusión de las interacciones es importante en otros materiales como el óxido de indio amorfo (Ovadyahu y Pollak, 1997).
- **Capas de inversión.** Suponemos un sistema experimental en el que emparedamos una capa de material aislante entre un semiconductor y un electrodo metálico. Al aplicar una diferencia de potencial entre el semiconductor y el electrodo, las bandas energéticas del semiconductor se curvan y se produce una redistribución de carga. De esta manera, se crea en el semiconductor una delgada capa, conocida como capa de inversión, con portadores de signo opuesto a las del resto del semiconductor. La capa de inversión es un gas de electrones 2D que posee cierto grado de desorden provocado por las inhomogeneidades del aislante (Mason *et al.*, 1995).

- **Metales granulares.** Estos materiales se componen de metales y aislantes. En el régimen aislante, se forman islas metálicas en un continuo de material aislante. En este caso, los estados electrónicos están localizados en las islas metálicas. Además del desorden debido a la localización aleatoria de estas islas, también existen fluctuaciones debidas al tamaño y forma de los granos metálicos. En estos materiales es importante tener en cuenta las interacciones electrostáticas entre los granos metálicos (White *et al.*, 1986).

### 1.3.2. Localización inducida por el desorden

Estudiamos las propiedades de localización de fermiones no interactuantes en un sólido desordenado. Suponemos que las partículas están sujetas a un potencial periódico debido a iones dispuestos en una red. Estos contienen impurezas de algún tipo que eliminan la periodicidad del sistema, dando lugar a un potencial aleatorio que depende del sitio. Los electrones están fuertemente ligados a los iones pero pueden cambiar de posición en la red gracias a procesos de túnel. Asumimos que la energía de interacción entre dos electrones en el mismo sitio de la red es mucho mayor que las otras energías relevantes del problema y restringimos la ocupación de cada sitio a  $n = 0, 1$ . En virtud de esta propiedad, podemos obviar los grados de libertad relativos al espín. De esta forma, el hamiltoniano de Anderson en la ecuación (1.2) queda reducido a:

$$H = \sum_i (\phi_i - \mu) n_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i). \quad (1.14)$$

Recordamos que las variables  $\phi_i$  representan el potencial aleatorio en cada sitio producido por las impurezas de la muestra. Nosotros utilizamos una distribución de probabilidad uniforme en el intervalo  $[-W/2, W/2]$ , donde  $W$  es uno de los parámetros del sistema. Se puede comprobar que la desviación estándar para esta distribución es  $\sigma = \sqrt{W/6}$ . Consideramos una red  $d$ -dimensional con condiciones periódicas y asumimos un sistema con  $N$  sitios. En cada dirección espacial escogemos el número de sitios igual a  $L = N^{1/d}$ . Tomamos el potencial químico  $\mu = 0$ .

En el caso sin desorden  $W = 0$ , el hamiltoniano puede ser diagonalizado usando

ondas planas. Cada partícula ocupará un estado con momento bien definido:

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle, \quad (1.15)$$

donde  $|\mathbf{x}\rangle$  es el estado de una partícula en el sitio de la red  $\mathbf{x}$ , el sumatorio se lleva a cabo sobre todos los sitios y el momento está cuantizado:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (k_1, k_2, \dots, k_d), \quad (1.16)$$

donde  $k_1, k_2, \dots, k_d$  son enteros. La energía de una partícula en función de su momento es:

$$E_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{i=1}^d \cos\left(\frac{2\pi}{L} k_i\right). \quad (1.17)$$

Nos referimos a los estados con energía cercana a cero como los estados en el centro de la banda. Llamamos estados en los extremos de la banda a aquellos que poseen energía cercana a la máxima,  $2td$ , o a la mínima,  $-2td$ .

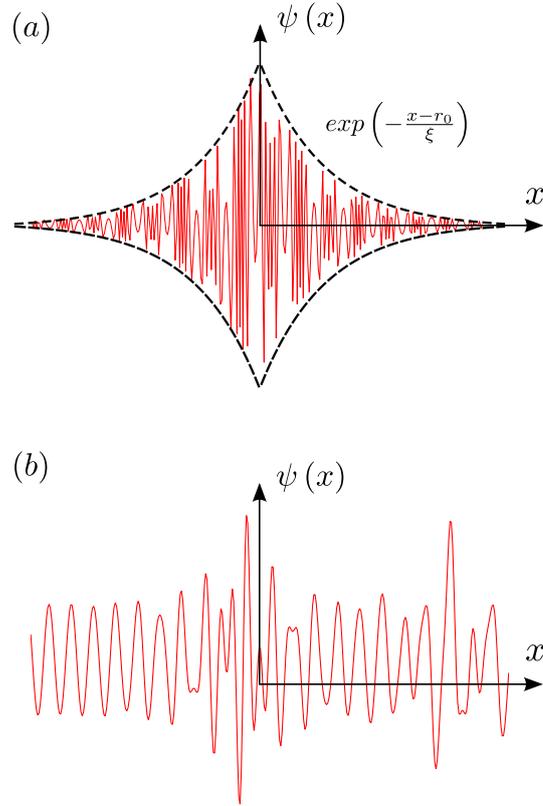
Aún en presencia de cierto grado de desorden, pueden existir estados extendidos. En este caso, la función de onda tiene una distribución de momentos con desviación estándar pequeña, comparada con el valor medio, y el electrón tiene probabilidades similares de estar en cualquier región del sistema. Cuando el desorden es suficientemente grande existe localización. Los estados localizados de una partícula tienen la forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle, \quad (1.18)$$

donde la función de onda  $\psi(\mathbf{x})$  exhibe un decaimiento exponencial que depende de la longitud de localización  $\xi$ :

$$|\psi(\mathbf{x})| \sim \exp\left(-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_0|}{\xi}\right). \quad (1.19)$$

Esto es, el electrón está localizado en una región de tamaño  $\xi^d$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema, con centro en el punto  $\mathbf{r}_0$ . En la figura 1.1 podemos observar la función de onda de un estado localizado, panel (a), y de uno extendido, panel (b).



**Figura 1.1:** Esquema de una función de onda típica para un electrón en sistemas 1D no interactuantes y desordenados. (a) Estado localizado. La función de onda  $\psi(x)$  decae exponencialmente con una longitud de localización  $\xi$ . (b) Estado extendido.

A continuación analizamos bajo que circunstancias un desorden pequeño produce localización (Dominguez-Adame y Malyshev, 2004). Los elementos de matriz del hamiltoniano de la ecuación (1.14) entre estados con momento diferente son en general distintos de cero cuando el sistema es desordenado. Asumimos un desorden suficientemente pequeño y aplicamos teoría de perturbaciones al estado en forma de onda plana  $|\mathbf{k}\rangle$ . A primer orden en teoría de perturbaciones tenemos:

$$|\mathbf{k}_p\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}} |\mathbf{k}'\rangle, \quad (1.20)$$

donde:

$$U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k}' | \sum_{i=1}^N \phi_i c_i^\dagger c_i | \mathbf{k} \rangle \quad (1.21)$$

De forma intuitiva, la localización se produce cuando el estado  $|\mathbf{k}_p\rangle$  es superposición de un número grande de vectores con momentos diferentes. Esto es, la partícula permanecerá deslocalizada cuando el segundo término de la derecha de la ecuación (1.20) sea suficientemente pequeño. Para analizar este término, comparamos los elementos de matriz,  $U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ , frente a la distancia típica de niveles en el caso sin desorden,  $\delta E$ .

Las variables  $U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  cumplen:

$$\langle U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{x}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} = 0, \quad (1.22)$$

donde  $\langle \dots \rangle_{\mathbf{k}'}$  denota promedio respecto al momento  $\mathbf{k}'$ . Debido a que  $\langle U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}$  se anula, la cantidad relevante para nuestro análisis es la desviación estándar:

$$\sigma_U^2 = \langle |U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}|^2 \rangle_{\mathbf{k}'} = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}}^2 = \frac{\sigma^2}{N}, \quad (1.23)$$

donde  $\sigma$  es la desviación estándar del desorden. La cantidad  $\sigma_U$  controla las fluctuaciones típicas de los elementos de matriz  $U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ . A continuación, comparamos  $\sigma_U$  con la distancia entre niveles energéticos sin desorden para diferentes regiones del espectro de energías.

En primer lugar, analizamos la distancia típica entre los niveles en los extremos de la banda,  $\delta E_{\text{eb}}$ . Ésta es:

$$\delta E_{\text{eb}} \sim \frac{4\pi^2}{N^{\frac{2}{d}}}. \quad (1.24)$$

Tanto  $\delta E_{\text{eb}}$  como  $\sigma_U$  tienden a cero en el límite termodinámico. En este límite y para dimensión  $d$  tendremos:

$$\frac{\sigma_U}{\delta E_{\text{eb}}} \sim N^{\frac{2}{d}-\frac{1}{2}} \quad (1.25)$$

Esto implica que el segundo sumando de la ecuación (1.20) diverge cuando  $d < 4$  y no hay estados extendidos al incluir un desorden arbitrariamente pequeño. Así,

nuestro argumento indica que en dimensión  $d < 4$  los estados en los extremos de la banda están localizados al incluir cualquier desorden distinto de cero. Analizamos a continuación los estados de una partícula en el centro de la banda. La distancia entre niveles típica para estos estados es:

$$\delta E_{\text{cb}} \sim \frac{2\pi}{N^{\frac{1}{d}}}. \quad (1.26)$$

Con un argumento similar al anterior vemos que:

$$\frac{\sigma_U}{\delta E_{\text{cb}}} \sim N^{\frac{1}{d}-\frac{1}{2}}, \quad (1.27)$$

y la localización ocurrirá para dimensión  $d < 2$ . En consecuencia, los estados en el centro de la banda también están localizados para sistemas 1D. Estos poseen la mayor distancia entre niveles y en consecuencia, todos los estados de una partícula en sistemas 1D han de estar localizados. Para el caso tridimensional y en el límite termodinámico:

$$\frac{\sigma_U}{\delta E_{\text{cb}}} \sim N^{-\frac{1}{6}} \longrightarrow 0. \quad (1.28)$$

Concluimos que los estados de una partícula en el centro de la banda y en sistemas 3D permanecen deslocalizados al introducir un desorden suficientemente pequeño. Nuestro razonamiento predice para el caso 2D un coeficiente  $\sigma_U/\delta E_{\text{cb}}$  constante en el límite termodinámico y no podemos decir si habrá o no estados extendidos en el centro de la banda.

El desarrollo que hemos realizado indica que al incluir un desorden pequeño en sistemas 3D los autoestados menos energéticos están localizados mientras que los del centro de la banda no. En concreto, variando la ocupación se puede inducir una transición metal-aislante. Hemos de notar que nuestro análisis está basado en teoría de perturbaciones y ha de fallar cuando el desorden es grande. De hecho, un desorden suficientemente grande localiza todos los autoestados del sistema en 3D. Por ello, también será posible inducir una transición para los estados en el centro de la banda aumentando el desorden,  $W$ .

Mediante argumentos más rigurosos es posible probar que estas conclusiones son ciertas y aclarar el comportamiento de los sistemas 2D. Para esta dimensión, Abra-

hams *et al.* (1979) comprobaron que cualquier valor del desorden no nulo localiza todos los estados de un electrón y utilizaron para ello el grupo de renormalización. Un ingrediente importante es la interferencia constructiva de caminos cerrados iguales pero que el electrón recorre en direcciones opuestas. Estas interferencias cuánticas son determinantes a la hora de localizar a los electrones en el caso 2D.

La localización de los electrones debido al desorden en sistemas no interactuantes se comprende relativamente bien. No está claro hasta que punto las interacciones pueden cambiar el comportamiento del caso no interactuante.

### 1.3.3. Gap de Coulomb clásico

En los aislantes de Anderson, las cargas poseen una movilidad reducida y no pueden apantallar la interacción de manera efectiva (Pollak *et al.*, 2012). En este apartado estudiamos el modelo de Anderson en presencia de interacciones de largo alcance y en el régimen completamente localizado, es decir, cuando el parámetro de *hopping* es nulo. Utilizamos el hamiltoniano de vidrios de Coulomb que aparece en la ecuación (1.4), pero con una interacción de largo alcance genérica:

$$H = \sum_i \phi_i (n_i - \mu) + V \sum_i \sum_{j>i} \frac{(n_i - K)(n_j - K)}{r_{i,j}^\alpha}, \quad (1.29)$$

donde el coeficiente  $\alpha$  controla el decaimiento de la interacción.

Dado que el *hopping* es nulo, todos los autoestados tienen una ocupación bien definida en cada sitio de la red. Nos referimos al estado fundamental en el colectivo gran canónico como  $|\psi_0\rangle$ , mientras que denotamos los estados excitados dependiendo de la ocupación relativa a éste:

$$|\psi_{i_1, \dots, i_r}^{j_1, \dots, j_s}\rangle = c_{i_1}^\dagger \dots c_{i_r}^\dagger c_{j_1} \dots c_{j_s} |\psi_0\rangle, \quad (1.30)$$

donde cada uno de los subíndices  $i_1, i_2 \dots i_r$  y  $j_1 \dots j_s$  corresponde a una coordenada de la red. Utilizamos  $\Delta E_{i_1, \dots, i_r}^{j_1, \dots, j_s}$  para referirnos al exceso de energía de este estado respecto al fundamental.

A continuación, averiguamos las energías a las cuales podemos añadir una partícula o hueco al sistema en el estado de mínima energía. La única forma de hacer esto es

introducir la partícula en un sitio sin ocupar y el hueco en uno ocupado. Después de ambas operaciones obtendremos un autoestado del hamiltoniano con energía bien definida. Así, podemos obtener las DDE para las partículas y huecos calculando todas las energías de autoestados con una partícula o hueco más que el estado fundamental. Esbozamos a continuación un argumento que permite realizar su cálculo fácilmente. Suponemos que el estado de mínima energía está caracterizado por ocupaciones  $\{n_1, n_2, \dots, n_N\}$  donde  $N$  es el tamaño de la muestra.

Independiente de la ocupación del sitio  $i$ , resulta conveniente definir su energía de sitio como (Efros y Shklovskii, 1975):

$$\epsilon_i = \phi_i + V \sum_{k \neq i} \frac{n_k - K}{r_{i,k}^\alpha}, \quad (1.31)$$

Con esta cantidad podemos calcular el exceso de energía,  $\Delta E_i$ , del estado con un electrón añadido en  $i$ :

$$\Delta E_i = E_i - E_0 = \epsilon_i - \mu, \quad (1.32)$$

mientras que la energía del estado con un hueco añadido en el sitio  $j$  es:

$$\Delta E^j = E^j - E_0 = -(\epsilon_j - \mu) \quad (1.33)$$

Como  $E_0$  es la energía del estado fundamental en el conjunto gran canónico,  $\Delta E_i > 0$  y  $\Delta E^j > 0$  para cualesquiera sitios  $i, j$ . Esto implica que  $\epsilon_i > \mu$  si el sitio está vacío, mientras que  $\epsilon_j < \mu$  si está ocupado y existe una energía de Fermi,  $\epsilon_F \equiv \mu$ , bien definida. La DDE es igual a la densidad de energías de sitio. En lo que sigue asumimos que el origen de energías se sitúa a la energía de Fermi  $\epsilon_F$  a no ser que se diga explícitamente lo contrario.

En el caso no interactuante,  $V = 0$ , las energías de sitio son iguales a los potenciales de desorden,  $\epsilon_i = \phi_i$ . Así, la DDE ha de seguir una distribución uniforme dada por:

$$\rho_0(\epsilon) = \begin{cases} (W a^d)^{-1}, & \text{si } \epsilon \in [-W/2, W/2] \\ 0, & \text{si } \epsilon \notin [-W/2, W/2] \end{cases}, \quad (1.34)$$

donde  $d$  es la dimensión del sistema y  $a$  es la distancia típica entre sitios. A continuación vemos como la interacción afecta dramáticamente a la DDE a la energía de Fermi.

Analizamos las restricciones que hemos de imponer a las energías de sitio en el caso interactuante. Para ello, calculamos las excitaciones partícula-hueco respecto al estado de mínima energía. Este tipo de excitaciones para sitios  $i, j$  consisten en añadir una partícula al sitio  $i$  y eliminar otra del  $j$ , con  $i \neq j$ . El estado del sistema después de este proceso es:

$$|\psi_i^j\rangle = c_i^\dagger c_j |\psi_0\rangle. \quad (1.35)$$

Calculamos el exceso de energía de este tipo de estados respecto al fundamental. Incluyendo correctamente la interacción entre los sitios  $i$  y  $j$ , podemos obtener:

$$\Delta E_i^j = \epsilon_i - \epsilon_j - \frac{V}{r_{i,j}^\alpha} > 0, \quad (1.36)$$

donde la última desigualdad se cumple porque el estado fundamental es estable bajo cualquier excitación partícula-hueco. A continuación vemos como la desigualdad anterior es suficiente para suprimir la DDE en el nivel de Fermi (Efros y Shklovskii, 1975).

Deducimos el número de partículas por unidad de volumen  $N_p(\epsilon)$  con energías en el intervalo  $[-\epsilon/2, \epsilon/2]$ . De acuerdo con la ecuación (1.36), la distancia promedio mínima entre un sitio ocupado y otro vacío en este intervalo de energías es  $r^\alpha \lesssim V/\epsilon$ . Si asumimos una distribución homogénea de los sitios ocupados y vacíos, la distancia promedio entre dos sitios en el rango de energías mencionado ha de tener una cota superior dada por  $r^\alpha < V/\epsilon$ , salvo un factor constante. Para sistemas de dimensión espacial  $d$  tendremos que  $N_p(\epsilon) \lesssim (\epsilon/V)^{d/\alpha}$ . La DDE viene dada por la derivada de  $N(\epsilon)$  y obtenemos que:

$$\rho(\epsilon) \sim \frac{\epsilon^{\frac{d}{\alpha}-1}}{V^{\frac{d}{\alpha}}}, \quad (1.37)$$

donde recordamos que el nivel de Fermi se estableció como origen de energías. El decrecimiento de la DDE cerca de la energía de Fermi que predice esta ecuación para dimensión  $d = 2, 3$  e interacciones de Coulomb,  $\alpha = 1$ , es conocido como gap

de Coulomb. La constante de proporcionalidad puede ser hallada usando una teoría auto consistente (Efros, 1976). Esta predice que suficientemente cerca del nivel de Fermi y para  $\alpha = 1$ , la DDE obedece la ecuación integral:

$$\rho(\epsilon) = \rho_0 \exp\left(-C \int_{-\infty}^0 \frac{\rho(x) dx}{(x - \epsilon)^d}\right), \quad (1.38)$$

donde

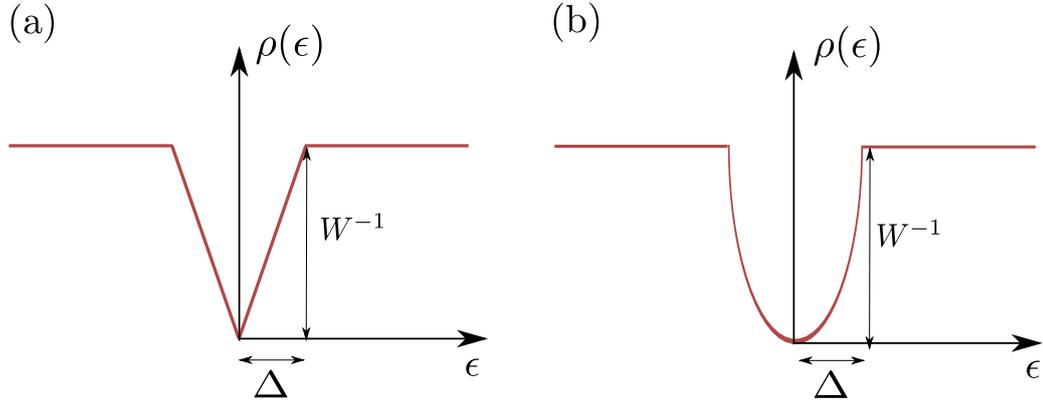
$$C = \frac{1}{2} (2V)^d v_d, \quad (1.39)$$

y  $v_d$  es el volumen de una esfera de radio unidad en un espacio  $d$ -dimensional. Con este método y para  $d > 1$ , se obtiene una constante de proporcionalidad igual a  $d/\pi$  en unidades de  $V$  (Baranovskii *et al.*, 1980). Este es el valor de la constante comúnmente aceptado.

La deducción que hemos realizado anteriormente, predice una DDE constante en el caso 1D con interacciones de Coulomb. El cálculo autoconsistente obtiene en su lugar un gap logarítmico (Raikh y Efros, 1987). Una interacción  $V(r) \sim r^{-1/2}$  en el caso 1D produce un gap lineal. En algunos casos puede ser útil estudiar este tipo de interacciones en sistemas 1D, pues permiten obtener un gap similar al del caso 2D en sistema 1D, siendo esta última dimensión más fácil de tratar numéricamente.

El gap de Coulomb es consecuencia de la estabilidad del estado fundamental respecto a todas las excitaciones partícula-hueco. El estado de mínima energía tiene muchas más condiciones de estabilidad que cumplir que las de los saltos de una partícula. En concreto, las excitaciones en las que un número arbitrario de electrones cambian de posición han de ser positivas y esto puede limitar aún más la DDE cerca del nivel de Fermi (Davies, 1985; Chicón *et al.*, 1988). En varios de los primeros trabajos sobre el gap de Coulomb se argumenta que imponer estabilidad frente a las excitaciones polarónicas, un salto largo revestido por saltos pequeños, ha de producir una mayor limitación a la DDE en el caso 3D (Efros, 1976; Baranovskii *et al.*, 1979). En esta geometría se ha propuesto que la DDE tiene un gap duro a la energía de Fermi dado por:

$$\rho(\epsilon) \sim \exp\left(-a_1 \sqrt{\frac{a_2}{|\epsilon|}}\right), \quad (1.40)$$



**Figura 1.2:** Representación esquemática de la DDE para electrones completamente localizados e interacción de largo alcance. En las dos figuras el gap de Coulomb aparece para energías  $|\epsilon| \lesssim \Delta$ , donde el último parámetro depende de la dimensión según la ecuación (1.41) y el origen de energías se fija a la energía de Fermi. Fuera del gap de Coulomb, la DDE es constante e igual a  $1/W$  como en el caso no interactuante. (a) Gap de Coulomb clásico para sistemas 2D con interacción de Coulomb y sistemas 1D con interacción  $1/\sqrt{r}$ . (b) Gap de Coulomb clásico para sistemas 3D con interacción de Coulomb.

donde  $a_1, a_2$  son reales y el segundo coeficiente es igual a la amplitud del gap. Este resultado ha sido cuestionado por Ruiz *et al.* (1994). Recientemente, Palassini y Goethe (2012) han obtenido resultados numéricos que confirman el comportamiento exponencial de la DDE cerca del nivel de Fermi en sistemas 3D. En sistemas 1D y 2D, estas restricciones adicionales no producen alteraciones apreciables a la DDE dada por la ecuación (1.37). Como estos casos son los de mayor relevancia para nuestro trabajo, asumiremos que la estabilidad frente a excitaciones partícula-hueco supone la mayor restricción a la DDE.

Es interesante determinar la región de energías en la que la restricción a la DDE causada por la interacción es importante. Esto ocurre para energías donde la DDE dada por ecuación (1.37) es menor que la de la ecuación (1.34). Esto implica que los

efectos del gap de Coulomb son esenciales en un rango de energías  $|\epsilon| \ll \Delta$  donde:

$$\Delta = \begin{cases} W^{-1} \frac{V^2}{a}, & \text{si } d = 1 \text{ e interacción } \frac{1}{\sqrt{r}} \\ W^{-1} \left(\frac{V}{a}\right)^2, & \text{si } d = 2 \text{ e interacción Coulomb} \\ W^{-1} \left(\frac{V}{a}\right)^{3/2}, & \text{si } d = 3 \text{ e interacción Coulomb.} \end{cases} \quad (1.41)$$

En la figura 1.2, representamos de forma aproximada el gap de Coulomb utilizando estas consideraciones. La competición entre la interacción  $V$  y el desorden fija la amplitud aproximada del gap  $\Delta$ . Pero la DDE a la energía de Fermi es nula independientemente de los parámetros del sistema siempre y cuando  $V$  no sea estrictamente cero. Así, el gap de Coulomb no puede ser calculado utilizando teoría de perturbaciones en la interacción. Por último, es importante destacar que el gap de Coulomb aparece a la energía de Fermi para cualquier ocupación.

### 1.3.4. Conductividad en aislantes de Anderson

En el régimen aislante y a bajas temperaturas, los sistemas desordenados exhiben propiedades de conducción interesantes (Shklovskii y Efros, 1984). La conducción se produce mediante un mecanismo conocido como *hopping* de rango variable (VRH), en el que los electrones localizados saltan por efecto del *scattering* con fonones. La probabilidad de estos procesos depende exponencialmente de la distancia, de la diferencia de energías entre los estados inicial y final del electrón y de la temperatura. Mott (1968) dedujo que la conductividad en el caso no interactuante y a bajas temperaturas sigue la ley:

$$\sigma \sim \exp \left[ - \left( \frac{T_0}{T} \right)^\beta \right], \quad (1.42)$$

donde  $\beta = 1/(d + 1)$  y  $T_0$  es la temperatura característica, que depende de las propiedades de cada material.

El problema es más complicado cuando las interacciones entre los electrones se tienen en cuenta. Efros y Shklovskii (1975) propusieron una extensión del VRH no interactuante en el que utilizaron la DDE del caso interactuante en el régimen completamente localizado o clásico. La presencia del gap de Coulomb limita los saltos

de electrones a bajas energías y por tanto, reduce la conductividad a temperaturas pequeñas. El resultado es conocido como la ley de Efros-Shklovskii:

$$\sigma \sim \exp \left[ - \left( \frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \right], \quad (1.43)$$

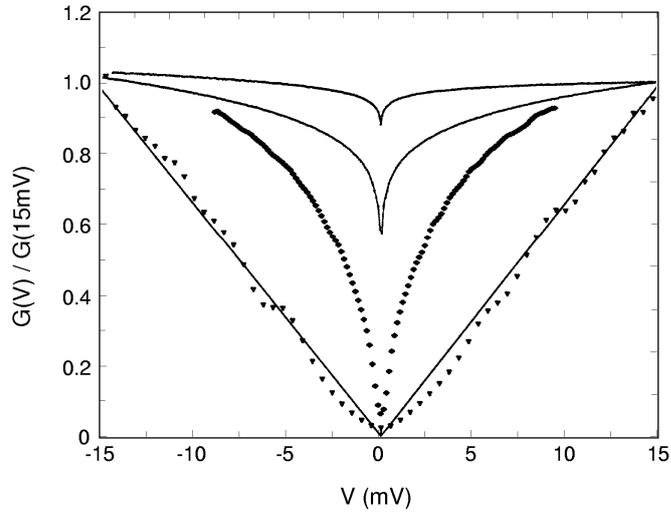
para dimensiones  $d = 2, 3$  y  $T_0$  es otra temperatura característica distinta de la de Mott. Notamos que el valor de la temperatura característica  $T_0$  que predice la teoría de Efros-Shklovskii parece sobrestimar el valor que se encuentra en algunos experimentos (Massey y Lee, 2000). Esto se interpreta como una prueba de la importancia de los saltos simultáneos de varios electrones en VRH aunque todavía no hay un acuerdo amplio al respecto.

Una de las características que tiene en cuenta la teoría de Efros-Shklovskii es que los electrones no están ligados a un solo sitio de la red sino que están deslocalizados en una longitud típica  $\xi > 0$ . Pero en la deducción de la ecuación (1.43) se emplea la DDE del caso en el que los electrones están completamente localizados  $\xi = 0$ . Es decir, en el argumento de Efros-Shklovskii se asume implícitamente que introducir una cierta probabilidad de túnel para los electrones en las impurezas no altera en absoluto la forma del gap de Coulomb.

### Semiconductores a bajas temperaturas

Estudiamos el transporte de carga en semiconductores dopados a temperaturas cercanas al cero absoluto. La conducción se debe a procesos en los que un electrón en una impureza salta a impurezas más o menos cercanas debido a fenómenos de *scattering* con los fonones de la red. En consecuencia, el transporte de carga en los semiconductores a bajas temperaturas ocurre mediante VRH. Como ejemplo, la temperatura a partir de la cual el mecanismo de VRH es responsable del transporte de carga en germanio es  $T \sim 7$  K (Shklovskii y Efros, 1984). Queremos destacar que en este mecanismo los electrones en la banda de impurezas adquieren movilidad sin visitar en ningún momento la banda de valencia ni la de conducción del semiconductor.

Los electrones involucrados en el VRH tienen movilidad reducida y no apantallan



**Figura 1.3:** Conductividad por efecto túnel en función del voltaje  $G(V)$  normalizada a  $G(15 \text{ mV})$  en capas ultra finas de Be según los resultados de Butko *et al.* (2000). Las resistencias de la película son desde la curva de arriba a la de abajo  $R = 530 \Omega$ ,  $2600 \Omega$ ,  $1600 \Omega$  y  $R = 2.6 \text{ M}\Omega$ . La línea sólida es un ajuste de los datos correspondientes a  $R = 2.6 \text{ M}\Omega$  a una curva  $G(V) = aV$ , donde  $a$  es el parámetro libre.

la interacción de forma eficiente. En este caso, son importantes los efectos del gap de Coulomb en las propiedades de conducción del sistema. Zhang *et al.* (1990) y Aharony *et al.* (1992) estudiaron el transporte a bajas temperaturas para el semiconductor CdSe en sistemas 3D. Estos trabajos muestran evidencias de un cambio de régimen entre la conducción producida por VRH no interactuante, dado en la ecuación (1.42), a uno característico de sistemas con interacción de Coulomb, ecuación (1.43). Este último régimen aparece a temperaturas  $T \lesssim 1 \text{ K}$ . Notamos que el cambio de régimen debe ocurrir cuando la energía térmica es menor que la amplitud del gap de Coulomb.

Un tanto más compleja es la medida de propiedades estáticas como la propia DDE en los semiconductores. Massey y Lee (1995) realizaron el primer intento de observar directamente el gap de Coulomb en semiconductores. Para ello emplearon espectroscopia de efecto túnel en silicio ligeramente dopado con boro, SiB,

a temperatura  $T = 1.15$  K. El resultado muestra una conducción por efecto túnel en función del voltaje,  $G(V)$ , con una forma parabólica característica del gap de Coulomb en sistemas 3D. En un trabajo posterior, Lee *et al.* (1999) presentaron resultados para el SiB en 3D y diferentes concentraciones de impurezas, de forma que pudieron observar la evolución de  $G(V)$  desde la región fuertemente localizada a la región metálica. Para bajas concentraciones se observa de nuevo una conductividad por efecto túnel parabólica. Al aumentar la concentración de impurezas,  $G(V)$  se estrecha progresivamente.

Butko *et al.* (2000) utilizaron películas ultra finas de Be con el fin de obtener resultados para  $G(V)$  en sistemas 2D. La conductividad por efecto túnel fue calculada para varias películas con resistencias diferentes y temperaturas  $T = 50$  mK. En la figura 1.3 reproducimos los resultados obtenidos en dicho trabajo. Como podemos observar, para resistencias pequeñas aparece una anomalía cerca del origen de energías. Al aumentar la resistencia,  $G(V)$  se ensancha para dar lugar a una conductividad lineal, típica del gap de Coulomb en dos dimensiones. Todos estos resultados han sido cuestionados pues no está clara la relación entre la conductividad por efecto túnel y la DDE debido fundamentalmente al apantallamiento del electrodo (Cuevas y Ortuño, 1992).

## 1.4. Modelo de Bose-Hubbard

Esta sección está íntegramente dedicada al estudio del modelo BH (Bloch *et al.*, 2008). Éste es un descendiente del hamiltoniano de Hubbard en el que los grados de libertad relativos al espín han sido eliminados y los fermiones reemplazados por bosones. Aún siendo éste uno de los modelos más sencillos que describe sistemas de muchos bosones, sus propiedades están muy lejos de ser triviales debido a la interacción. De hecho, no existe solución exacta del mismo y de ahí la importancia de los métodos numéricos en su estudio.

Un sistema BH contiene bosones en una red periódica que pueden cambiar de posición debido al *hopping* entre primeros vecinos. Por otro lado, varios bosones

en un mismo sitio de la red producen un aumento de la energía proporcional al número de bosones que comparten posición y a otro de los parámetros del sistema, la interacción  $U$ . Una vez especificados estas dos magnitudes y el potencial químico  $\mu$ , quedan fijadas todas las propiedades del sistema a temperatura cero. Como ya se ha dicho antes, el hamiltoniano de BH para una red en dimensión arbitraria con condiciones de contorno periódicas es:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i) - \mu \sum_j n_j + \frac{U}{2} \sum_j n_j(n_j - 1), \quad (1.44)$$

En lo que sigue, asumimos que el *hopping* y el potencial químico son positivos,  $t > 0$  y  $\mu > 0$ .

A temperatura cero, el modelo BH posee dos fases. Como ya hemos dicho previamente, éstas son las fases MI y SF. En la primera, las partículas están localizadas de forma que las correlaciones a dos puntos decaen exponencialmente,  $\langle b_j^\dagger b_i \rangle \sim \exp(-r_{i,j}/\xi)$ , con una longitud de localización bien definida  $\xi$ . Además, el espectro de energías posee un gap entre el estado fundamental y los estados con una partícula o hueco añadidos a éste. Dichas excitaciones tienen una relación de dispersión cuadrática. Por el contrario, un estado SF contiene partículas deslocalizadas a lo largo del sistema y las excitaciones partícula o hueco no poseen gap. Gracias a esta característica puede ocurrir que haya rotura de simetrías espontánea caracterizada por un parámetro de orden SF, que definiremos en breve, distinto de cero. Además, existen modos de energía arbitrariamente pequeña con relación de dispersión lineal. En dimensión espacial  $d > 1$ , la fase SF exhibe orden de largo alcance para las correlaciones a dos puntos. De forma única para el caso  $d = 1$ , las fluctuaciones cuánticas eliminan parcialmente el orden de largo alcance y la fase SF se caracteriza por correlaciones con decaimiento algebraico a lo que nos referimos como quasi-orden de largo alcance. De hecho, la fase SF en dimensión espacial  $d$  posee una teoría efectiva de bajas energías que se corresponde con el modelo X-Y en dimensión  $d + 1$  (Weng, 2004).

La transición entre las dos fases ocurre cuando el gap se cierra y suele ir acompañada de un cambio brusco en la densidad de bosones que exhibe el sistema. Las

transiciones en las que esto ocurre corresponden a puntos críticos de segundo orden. Sin embargo, hay ciertos valores de los parámetros en los que la transición MI-SF ocurre sin ningún tipo de discontinuidad. De manera única en  $d = 1$ , estos puntos constituyen transiciones KT de orden infinito. Nos referimos a los puntos críticos de segundo orden como transiciones genéricas para diferenciarlos de los puntos críticos KT.

La dimensión crítica es  $d_c = 2$  para las transiciones genéricas. Utilizando un cálculo basado en grupo de renormalización se obtiene que el valor de los exponentes críticos de campo medio se mantiene para dimensiones iguales o mayores que la dimensión crítica inferior  $d_{\text{inf}} = 1$  (Fisher *et al.*, 1989). Esto implica que el gap en la energía se desvanece linealmente en cualquier dimensión  $\Delta E \sim \mu - \mu_c$ .

El hamiltoniano de BH ha sido objeto de gran interés debido a su relevancia para modelar los *arrays* de uniones de Josephson o las redes ópticas (Bruder *et al.*, 2005). Estas últimas son examinadas en el siguiente apartado.

### 1.4.1. Redes ópticas

El confinamiento en una determinada región de átomos neutros, que se comportan como bosones, es posible gracias al uso de campos magnéticos. Además, utilizando luz láser se puede producir un potencial periódico para los átomos confinados. Eligiendo adecuadamente la frecuencia del láser  $\omega$ , los átomos experimentan un potencial conservativo de la forma:

$$V(x, y, z) = V_{0,x} \sin^2(x/\lambda) + V_{0,y} \sin^2(y/\lambda) + V_{0,z} \sin^2(z/\lambda), \quad (1.45)$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda del láser y la magnitud  $V_{0,i}$  es proporcional a la intensidad del láser en la dirección  $i$ -ésima. Al establecer,  $V_0 = V_{0,x} = V_{0,y} = V_{0,z}$ , obtendremos que el potencial es igual en las direcciones de los ejes  $x, y, z$ . Este potencial es muy parecido al que experimentan los electrones en su movimiento dentro de un sólido cristalino.

Jaksch *et al.* (1998) probaron que la dinámica de los átomos a muy bajas temperaturas en las redes ópticas puede ser descrita mediante el hamiltoniano de BH. Los

parámetros de este modelo, tales como la interacción o el *hopping*, se pueden controlar de forma ultra precisa mediante las características de la luz del láser empleados. De forma intuitiva, establecer pozos de potencial grandes dificulta los procesos de *hopping* entre diferentes mínimos y hace que la interacción entre partículas en el mismo pozo sea mayor. Las redes ópticas ofrecen una configuración experimental para reproducir de manera controlada fenómenos que exhibe el modelo BH comunes a muchos de los sistemas fuertemente correlacionados utilizados en la física de la materia condensada.

Greiner *et al.* (2002) fueron capaces de observar de forma directa la transición MI-SF a temperatura cero utilizando redes ópticas tridimensionales. El consiguiente cambio abrupto en las propiedades del sistema lo obtuvieron variando de forma continua la intensidad de los rayos láser utilizados. Para detectar la transición midieron el momento de los átomos en una red 3D. Esto se consigue eliminando de forma repentina el potencial periódico de la red y dejando que los átomos se propaguen de forma libre durante cierto tiempo, para luego medir su momento mediante detectores correctamente posicionados. Para valores pequeños de la intensidad del láser, el patrón de difracción obtenido indicaba valores del momento bien definido. En cambio, al aumentar esta magnitud existía un valor crítico para el que el patrón cambiaba drásticamente y no existían valores bien determinados de la misma magnitud, indicando localización. Posteriormente, se ha conseguido reproducir la transición MI-SF en sistemas 2D (Spielman *et al.*, 2007) y 1D (Stöferle *et al.*, 2004).

### 1.4.2. Simetrías y parámetro de orden superfluido

A continuación, estudiamos una transformación muy relevante a la hora de describir las distintas fases del modelo BH (Weng, 2004). Asumimos un operador  $\mathcal{S}(\theta)$  que actúa sobre el operador creación en un sitio  $i$  arbitrario:

$$\mathcal{S}(\theta) b_i^\dagger = e^{-i\theta} b_i^\dagger, \quad (1.46)$$

donde  $\theta$  es un número real. Es fácil ver que  $\mathcal{S}(\theta)$  tiene estructura de grupo, en concreto es el grupo  $U(1)$  de matrices complejas unitarias de dimensión uno. El

operador que hemos introducido actúa sobre un solo sitio de la red. Promocionamos  $\mathcal{S}(\theta)$  a un operador global que actúa sobre cada uno de los sitios de la red de forma idéntica a la ecuación (1.46). Esto es, para cualquier combinación de operadores creación, definimos el operador global:

$$\mathcal{S}(\theta)b_{i_1}^\dagger b_{i_2}^\dagger \dots b_{i_N}^\dagger = \left(e^{-i\theta}b_{i_1}^\dagger\right) \left(e^{-i\theta}b_{i_2}^\dagger\right) \dots \left(e^{-i\theta}b_{i_N}^\dagger\right). \quad (1.47)$$

Remarcamos la diferencia entre esta transformación global y la transformación local o transformación Gauge en la que el ángulo depende del sitio  $\theta = \theta_i$ .

El operador  $\mathcal{S}$  es una simetría del modelo BH debido a que conmuta con el hamiltoniano:

$$[H, \mathcal{S}] = 0. \quad (1.48)$$

Acabamos de ver que un estado MI no está degenerado y, en consecuencia, debe conservar la simetría del sistema  $\mathcal{S}$ . En cambio, un estado SF se caracteriza por la ausencia de gap entre el estado fundamental y los estados excitados con una partícula o hueco añadido. En este caso, el estado fundamental está degenerado y puede haber rotura espontánea de simetrías, es decir, el estado fundamental de la fase SF no conserva la simetría  $\mathcal{S}$ .

Hemos de notar que la rotura espontánea de simetrías puede ocurrir en dimensión  $d > 1$ . Para el caso 1D, las fluctuaciones cuánticas restauran la simetría original del hamiltoniano. Al utilizar una aproximación concreta para obtener el estado fundamental del modelo BH en sistemas 1D, puede que no se tengan en cuenta correctamente estas fluctuaciones. Esto a su vez, puede dar lugar a que se produzca rotura espontánea de simetrías para el estado fundamental aproximado. Como veremos en breve, esta situación se da al utilizar la aproximación de campo medio.

Examinamos una magnitud que permite distinguir cuando un estado  $|\psi\rangle$  conserva o no la simetría  $\mathcal{S}$ . Ésta es el parámetro de orden superfluido  $\Phi$ , definido como:

$$\Phi = \langle b_i \rangle = \langle \psi | b_i | \psi \rangle, \quad (1.49)$$

donde  $i$  puede ser cualquier sitio de la red debido a la simetría translacional del modelo BH. Un estado simétrico bajo  $\mathcal{S}$  cumple  $\Phi = 0$ . Cuando el estado es asimétrico entonces  $\Phi \neq 0$ .

### 1.4.3. Localización inducida por la interacción

Suponemos una red  $d$ -dimensional con  $N$  sitios y condiciones de contorno periódicas. Estudiamos el modelo de BH cuando la interacción es mucho mayor que el *hopping*,  $t/U \ll 1$  (Freericks y Monien, 1994). En este caso, el hamiltoniano se reduce a:

$$H = \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad (1.50)$$

Los autoestados del este hamiltoniano poseen en cada sitio una ocupación bien definida, pues no contiene ningún término que acople sitios diferentes. En consecuencia, la energía del sitio  $i$ -ésimo tan sólo depende de su ocupación,  $n_i$ , y viene dada por:

$$E_i = -\mu n_i + \frac{1}{2} n_i(n_i - 1). \quad (1.51)$$

El estado fundamental está compuesto por  $n_0$  bosones en cada punto de la red de forma que  $n_0$  minimiza la expresión anterior. Es fácil comprobar que esto ocurre cuando:

$$n_0 - 1 \leq \mu \leq n_0. \quad (1.52)$$

Utilizando los operadores creación y destrucción en la base de los sitios podemos escribir el estado fundamental cómo:

$$|\psi_{n_0}\rangle = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{n_0!}} (b_i^\dagger)^{n_0} |0\rangle. \quad (1.53)$$

A continuación analizamos las excitaciones de menor energía con una partícula o hueco añadido al estado fundamental en el sitio  $i$ . Estas son respectivamente:

$$|\psi_{n_0,p}^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_0 + 1}} b_i^\dagger |\psi_{n_0}\rangle, \quad (1.54)$$

$$|\psi_{n_0,h}^i\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_0}} b_i |\psi_{n_0}\rangle. \quad (1.55)$$

La energía de estos estados respecto al fundamental es:

$$\Delta_{n_0,p}^i(t=0, \mu) = n_0 - \mu > 0, \quad (1.56)$$

$$\Delta_{n_0,h}^i(t=0, \mu) = 1 - n_0 + \mu > 0, \quad (1.57)$$

donde hemos utilizado la desigualdad en la ecuación (1.52) para deducir que las energías necesarias para introducir una partícula o un hueco son mayores que cero. Vemos que tanto las excitaciones partícula como las excitaciones hueco poseen un gap. También destacamos que estas energías no depende del sitio  $i$  donde se introduce la partícula o hueco y en consecuencia, estos niveles energéticos están degenerados  $N$  veces. En lo que sigue obviaremos el subíndice  $i$  para referirnos a la energía de este tipo de excitaciones. Por último, la conducción de partículas no puede ocurrir a energías arbitrariamente pequeñas. Esto se debe a la inexistencia de estados con energías menores a la amplitud del gap. Es por ello que el estado fundamental en el límite  $t/U \ll 1$  es un aislante de MI.

La interacción entre los bosones es responsable de la aparición de la fase aislante en el modelo BH. Este aislante es diferente al de Anderson, examinado en la sección anterior. En un aislante de Anderson la localización se puede producir en los estados de una partícula no interactuante, mientras que en el modelo BH los estados no interactuantes están deslocalizados y la localización se produce tan solo en el sistema de muchos-cuerpos.

#### 1.4.4. Transición de fase

Utilizamos argumentos intuitivos para obtener una primera idea del diagrama de fases para el modelo BH en dimensión  $d$ . Fijamos la unidad de energía a  $U = 1$ . En el límite  $t = 0$ , hemos visto que existe un gap para la partícula  $\Delta_{n_0,p}(t=0, \mu) > 0$  y para el hueco  $\Delta_{n_0,h}(t=0, \mu) > 0$ . En este límite el sistema está en un estado MI. Para el límite  $t \rightarrow \infty$  y cualquier valor de  $\mu > 0$ , el sistema forma un condensado de Bose-Einstein en el que todas las partículas ocupan el estado de menor energía. En este caso puede haber transporte de materia a temperatura cero y el sistema está en un estado SF. En breve vamos a analizar el hamiltoniano BH utilizando

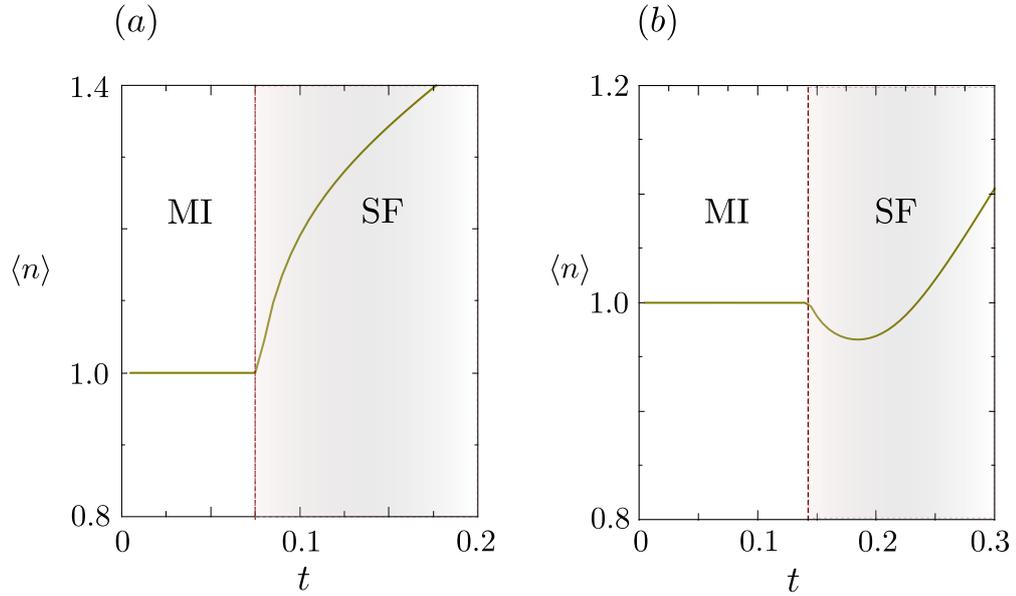
teoría de perturbaciones a primer orden en  $t$ . En este cálculo se puede comprobar que existen valores de  $t$  pequeños pero distintos de cero para los cuales el gap no se desvanece. Esto indica que la región MI persiste para valores finitos del *hopping*. Deducimos entonces la existencia de un valor crítico de  $t$  en el cual el gap se hace cero y ocurre la transición entre la fase MI y la SF.

De manera más precisa, al mantener  $\mu > 0$  constante y aumentar el hopping desde el límite  $t = 0$ , la partícula o hueco añadida en los estados excitados puede reducir su energía deslocalizándose. Así, cuando  $t$  aumenta, tanto  $\Delta_{n_0,p}(t, \mu)$  como  $\Delta_{n_0,h}(t, \mu)$  han de decrecer. Dependiendo de  $\mu$ , habrá un valor del hopping en el que se desvanecerá el gap para la partícula, o bien el gap para el hueco. Así, el sistema pasa de una densidad conmensurable  $n_0$ , a una inconmensurable produciéndose una discontinuidad en la derivada de la misma. Estos puntos marcan la frontera entre la fases MI y SF. En lo que sigue nos referimos a la frontera donde  $\Delta_{n_0,p}^i = 0$  como frontera de la partícula y llamaremos frontera del hueco cuando  $\Delta_{n_0,h}^i = 0$ . Cruzar la transición desde el MI al SF produce un incremento (frontera partícula) o detrimento (frontera hueco) de la densidad. En la figura 1.4 representamos la densidad de bosones  $\langle n \rangle$  en función  $t$  para dos valores de  $\mu$ , 0.7 en el panel (a) y 0.2 en el panel (b). En el panel (a), la transición ocurre cuando el gap para la partícula se cierra y es por ello que la densidad aumenta tras la transición. En el panel (b), el gap para el hueco es el que se cierra y la densidad decrece al cruzar la transición. Par valores grandes de  $t$ , la densidad acaba creciendo pues esto ha de ocurrir siempre para valores suficientemente grandes de  $t$ . De hecho, en el límite  $t \rightarrow \infty$  el sistema es un condensado de Bose-Einstein donde el número de partículas diverge.

La fase SF no posee gap y ha de estar caracterizada por una compresibilidad

$$\kappa = \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu} \neq 0. \quad (1.58)$$

Así, las regiones de densidad constante corresponden a curvas en el plano  $(t, \mu)$ . Esto obliga a que cada lóbulo MI con ocupación entera,  $n_0$ , colapse en una única curva con densidad constante e igual a  $n_0$  en la región SF. Concluimos entonces la existencia de un punto en cada lóbulo de la fase MI en el que la transición ocurre



**Figura 1.4:** Densidad de partículas  $\langle n \rangle$  en función del parámetro de *hopping*  $t$  para dos valores de  $\mu$ , 0.7 (a) y 0.2 (b). En ambos paneles observamos una transición de segundo orden señalada por una discontinuidad en la derivada de la densidad. En las dos figuras, la región MI corresponde al lóbulo  $n_0 = 1$ . El cálculo de la densidad se ha realizado mediante el algoritmo *time evolving block decimation* que explicamos en el capítulo 2.

sin discontinuidad en ninguna derivada de la densidad  $\langle n_0 \rangle$ . Cuando se cruzan a lo largo de un camino con densidad constante, Fisher *et al.* (1989) probaron que estos puntos pertenecen a la clase de universalidad del modelo XY en dimensión espacial  $d + 1$ . En sistemas 1D, estos son puntos críticos KT.

### Diagrama de fases en teoría de perturbaciones

La forma más sencilla de aproximar cada una de las fases en el modelo BH es utilizando teoría de perturbaciones al menor orden (Freericks y Monien, 1994). Consideramos dimensión arbitraria  $d$  y el hamiltoniano dado en la ecuación (1.50). Tratamos como perturbación el operador de *hopping*:

$$\Delta H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i). \quad (1.59)$$

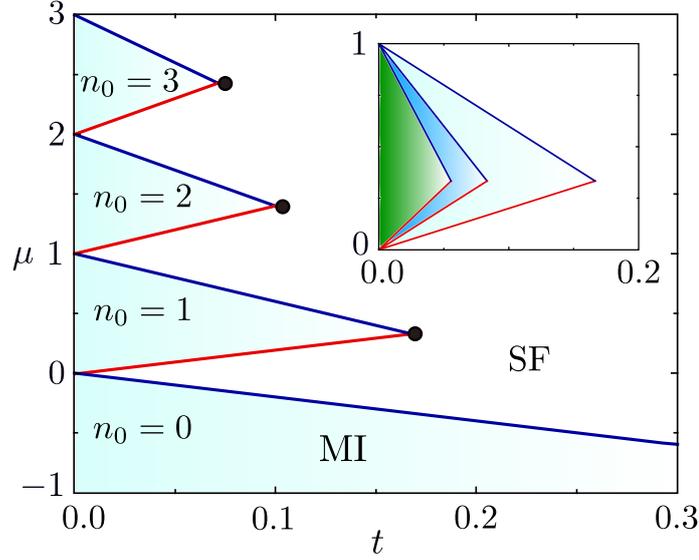
Calculamos las correcciones para el estado fundamental, que posee un número de partículas  $N_p = n_0 N$  donde  $N$  es el número de sitios en el sistema, y las correcciones al estado de menor energía para los casos con  $N_p = n_0 N \pm 1$  partículas. Para caracterizar las fases MI y SF comprobamos la existencia o no de gap. Es decir, la frontera para la partícula la obtenemos cuando la diferencia entre el estado fundamental y el autoestado menos energético con  $N_p = n_0 N + 1$  bosones es cero. Por el contrario, la frontera para el hueco ocurre cuando no hay diferencia de energías entre el estado fundamental y el autoestado con menor energía para  $N_p = n_0 N - 1$  partículas.

En primer lugar, analizamos el estado fundamental,  $|\psi_{n_0}\rangle$ . Como éste no está degenerado y se verifica que  $\langle \psi_{n_0} | \Delta H | \psi_{n_0} \rangle = 0$ , la primera corrección no nula a la energía es  $\mathcal{O}(t^2)$ , que despreciamos pues estamos interesados en el orden lineal. Por tanto, utilizamos el estado fundamental en el límite  $t = 0$ . Continuamos con las correcciones al menor orden en  $t$  para estados con  $n_0 N \pm 1$  partículas. Recordamos que los estados de menor energía con estas partículas estaban degenerados  $N$  veces y tenían energías dadas por las ecuaciones (1.56) y (1.57). La primera corrección no nula es  $\mathcal{O}(t)$  y se obtiene diagonalizando la perturbación en el espacio degenerado correspondiente.

El operador  $\Delta H$  aplicado sobre un estado con una partícula añadida en el sitio  $i$  al estado fundamental para  $t = 0$ , produce un estado en el que, digamos, la partícula añadida aparece en  $j$ , siendo  $i$  y  $j$  primeros vecinos. De manera similar, cuando hacemos actuar  $\Delta H$  sobre un estado con un hueco en  $i$ , obtenemos un estado donde el hueco está en un sitio  $j$ , vecino cercano de  $i$ . En los subespacios degenerados con  $N_p = n_0 N \pm 1$  partículas,  $\Delta H$  es muy similar al de una partícula libre. Esto permite diagonalizar la perturbación utilizando ondas planas. La corrección de orden  $t$  a la excitación de menor energía respecto al estado fundamental a  $t = 0$  para los sectores con  $n_0 N + 1$  y  $n_0 N - 1$  partículas son:

$$\Delta_{n_0,p}(t, \mu) = -\mu - n_0 - 2z(n_0 + 1)t + \mathcal{O}(t^2), \quad (1.60)$$

$$\Delta_{n_0,h}(t, \mu) = +\mu - n_0 - 1 - 2zn_0 t + \mathcal{O}(t^2), \quad (1.61)$$



**Figura 1.5:** Diagrama de fases para el modelo BH en el plano  $(t, \mu)$  aproximado con teoría de perturbaciones de primer orden y en sistemas 1D. El área coloreada corresponde a la fase MI mientras que la blanca es SF. Las curvas que encierran cada lóbulo por arriba corresponden a las fronteras para la partícula mientras que las curvas que delimitan a los lóbulos por debajo son las fronteras para el hueco. La densidad  $n_0$  de cada uno de los lóbulos se especifican en la figura. Cada uno de los símbolos  $\bullet$  marca la estimación de un punto KT para una densidad concreta. La figura pequeña muestra el lóbulo  $n_0 = 1$  para dimensión  $d=1, 2$  y  $3$ , donde el área MI decrece al aumentar la dimensión.

donde  $z = 2d$ , es el número de primeros vecinos. Las fronteras para la partícula y el hueco pueden ser obtenidas igualando las ecuaciones (1.60) y (1.61) a cero y despejando el potencial químico de cada una de ellas. Haciendo esto encontramos:

$$\mu_{n_0,p}(t) = -n_0 - 2z(n_0 + 1)t + \mathcal{O}(t^2), \quad (1.62)$$

$$\mu_{n_0,h}(t) = n_0 - 1 + 2zn_0 t + \mathcal{O}(t^2). \quad (1.63)$$

En la parte principal de la figura 1.5 representamos el diagrama de fases calculado a primer orden en  $t$  para sistemas 1D. La fase MI en sistemas 1D está formada por varios lóbulos que corresponden a diferentes densidades enteras  $n_0 = 0, 1, 2, 3$ .

En la figura pequeña mostramos el lóbulo  $n_0 = 1$  de la fase MI para dimensiones  $d = 1, 2, 3$ . En esta gráfica podemos ver cómo al aumentar la dimensión la región MI decrece. Esto se debe a que la partícula o hueco añadida en los estados excitados puede reducir su energía deslocalizándose en más dimensiones. En consecuencia, aumentar la dimensión ha de favorecer la región SF.

Aquí hemos utilizado la versión más sencilla, *i.e.*, primer orden de teoría de perturbaciones, pero utilizando ordenes mayores es posible reproducir el diagrama de fases con bastante precisión para el caso en una y dos dimensiones (Eltner y Monien, 1999). La aproximación que hemos descrito en este apartado no consigue reproducir un diagrama de fases re-entrante.

### Diagrama de fases en campo medio

Vamos a utilizar ahora campo medio para aproximar el modelo BH (Rokhsar y Kotliar, 1991; Krauth *et al.*, 1992; Amico y Penna, 1998). Buscamos el estado fundamental minimizando en una familia variacional que incluya los grados de libertad de un solo sitio (Clark, 2007). Para ello empleamos un *ansatz*:

$$|\Psi_{\text{var}}\rangle = \prod_j |\psi_j\rangle, \quad (1.64)$$

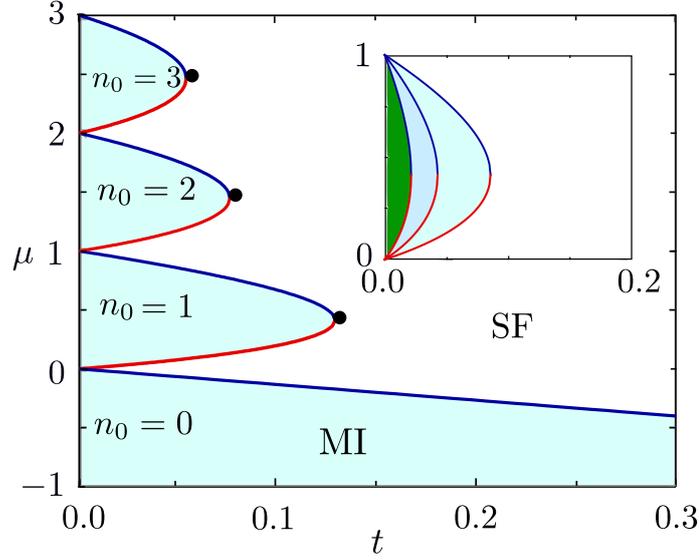
donde cada  $|\psi_j\rangle$  representa el estado del sitio  $j$ . Desacoplamos el hamiltoniano para poder expresarlo como suma de  $N$  operadores que actúan cada uno de ellos sobre sitios diferentes. El único término de  $H$  que mezcla grados de libertad de sitios contiguos es el operador de *hopping*. El promedio de este sobre nuestro *ansatz* es:

$$\langle b_i^\dagger b_j \rangle_{\text{var}} = \langle \psi_i | b_i^\dagger | \psi_i \rangle \langle \psi_j | b_j | \psi_j \rangle, \quad (1.65)$$

donde  $\langle \dots \rangle_{\text{var}}$  denota promedio respecto a  $|\Psi_{\text{var}}\rangle$ . Utilizando un argumento análogo a las teorías de campo medio de física estadística, asumimos que las fluctuaciones en los operadores  $b_j$  son pequeñas respecto al valor promedio:

$$\langle \psi_j | b_j | \psi_j \rangle = \Phi + \eta_j, \quad (1.66)$$

donde  $\Phi$  es el campo medio y  $\eta_j$  corresponde a las fluctuaciones que suponemos pequeñas,  $\eta_j \ll 1$ , para todos los sitios. Con esta aproximación, asumimos tácita-



**Figura 1.6:** Diagrama de fases para el modelo BH en el plano  $(t, \mu)$  aproximado con campo medio para sistemas 1D. El área coloreada corresponde a la fase MI. La densidad  $n_0$  de cada lóbulo está indicada en la figura. Los símbolos  $\bullet$  marcan la estimación de los puntos KT para cada lóbulos. El *inset* pequeño muestra el lóbulo  $n_0 = 1$  para dimensión  $d=1, 2$  y  $3$ , donde el área MI decrece al aumentar la dimensión.

mente la existencia de un parámetro de orden SF,  $\Phi$ , que puede ser diferente de cero y romper la simetría original del hamiltoniano. Mediante la aproximación estándar de campo medio,  $\eta_i \eta_j^* \approx 0$  tendremos:

$$\langle b_i^\dagger b_j \rangle_{\text{var}} \approx \langle \Phi b_i^\dagger + \Phi^* b_j + |\Phi|^2 \rangle \quad (1.67)$$

Llevando esta última expresión al hamiltoniano, conseguimos desacoplarlo en suma de operadores de un sitio idénticos entre sí. El hamiltoniano para cada uno de estos sitios es:

$$H_{\text{MF}} = -zt(\Phi b^\dagger + \Phi^* b + |\Phi|^2) + \frac{U}{2}n(n-1) - \mu n. \quad (1.68)$$

Procedemos a minimizar el operador  $H_{\text{MF}}$ . Una estrategia válida es imponer un número máximo de bosones por sitio y diagonalizar. Utilizamos un método alternativo más simple. Asumimos que el *hopping* es pequeño y obtenemos el estado

fundamental al orden menor en  $t$ . Para ello consideramos el hamiltoniano a orden cero  $H_{\text{MF}}^{(0)}$  y la perturbación  $\Delta H_{\text{MF}}$  como:

$$H_{\text{MF}}^{(0)} = \frac{U}{2}n(n-1) - \mu n, \quad (1.69)$$

$$\Delta H_{\text{MF}} = -zt(\Phi b^\dagger + \Phi^* b + |\Phi|^2) \quad (1.70)$$

La energía del estado fundamental a orden nulo es idéntica a la que encontrábamos en el límite  $t = 0$ . La energía hasta segundo orden en  $t$  es:

$$E_{\text{MF}} = E_{n_0} - \left[ 1 - \left( \frac{n_0 + 1}{\mu - n_0} + \frac{n_0}{n_0 - 1 - \mu} \right) zt \right] zt|\Phi|^2 + \mathcal{O}(\Phi^3), \quad (1.71)$$

donde los órdenes superiores en  $\Phi$  aparecen en los términos de orden mayor en  $t$ . Hemos obtenido una energía que tiene una contribución cuadrática en el parámetro de orden. Siguiendo el criterio de Landau, la transición ocurrirá cuando el coeficiente de  $|\Phi|^2$  sea cero, lo que posibilita su caracterización por las soluciones a la ecuación:

$$\mu^2 + \mu(zt + 1 - 2n_0) + n_0^2 - n_0 + zt = 0, \quad (1.72)$$

que tiene raíces

$$\mu_{\pm}(t) = \frac{1}{2} \left[ 2n_0 - 1 - zt \pm \sqrt{1 - 2(2n_0 + 1)zt + z^2 t^2} \right] \quad (1.73)$$

En la figura 1.6 representamos el diagrama de fases según esta ecuación. La fase MI está compuesta otra vez por diferentes lóbulos cada uno de ellos correspondientes a una densidad entera de partículas  $n_0 = 0, 1, 2, 3$ . Notamos que la forma redondeada de cada uno de los lóbulos es diferente a la forma triangular que obtuvimos utilizando teoría de perturbaciones.

En campo medio, la transición a la fase ordenada se caracteriza por la rotura espontánea de simetrías en la que el parámetro de orden pasa a ser distinto de cero  $\Phi \neq 0$ . En consecuencia, un estado genérico del SF está descrito por una superposición de vectores con diferente ocupación en cada sitio rompiendo así la simetría original del hamiltoniano. Por el contrario, los estados MI tienen una ocupación bien definida en cada sitio pues no hay rotura de simetrías.

Ninguna de las dos aproximaciones que hemos descrito, a saber, campo medio y primer orden en teoría de perturbaciones, es capaz de predecir un diagrama de

fases reentrante. En consecuencia, estos dos métodos parecen ser demasiado simples para captar el mecanismo que da lugar a este fenómeno.

## 1.5. Entrelazado

En esta sección introducimos el concepto de entrelazado. Éste juega un papel muy importante en la simulación de sistemas cuánticos interactuantes en 1D. De hecho, los métodos tipo DMRG son eficientes en muchos problemas 1D debido a que minimizan la energía, de una u otra forma, considerando tan sólo estados con entrelazado limitado.

Suponemos un sistema cuántico  $\mathcal{S}$ , en dimensión arbitraria, compuesto por subsistemas  $\mathcal{S}_A$  y  $\mathcal{S}_B$  con espacios de Hilbert  $\mathcal{E}_A$  y  $\mathcal{E}_B$ , respectivamente. Denotamos la dimensión de  $\mathcal{E}_A$  como  $m_A$  y la de  $\mathcal{E}_B$  como  $m_B$ . El espacio total  $\mathcal{E}$  se construye según:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B. \quad (1.74)$$

Un estado  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$  puede ser expresado como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{m_A} \sum_{j=1}^{m_B} c_{i,j} |\psi_i^A\rangle \otimes |\psi_j^B\rangle, \quad (1.75)$$

donde  $c_{i,j}$  son números complejos,  $|\psi_i^A\rangle$  son vectores de una base de  $\mathcal{E}_A$  y  $|\psi_j^B\rangle$  son vectores de una base de  $\mathcal{E}_B$ .

La descomposición de Schmidt asegura la existencia de dos conjuntos de estados ortonormales  $\{|\phi_\alpha^A\rangle\}_{\alpha=1}^m$  en  $\mathcal{E}_A$  y  $\{|\phi_\alpha^B\rangle\}_{\alpha=1}^m$  en  $\mathcal{E}_B$ , de forma que:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^m \lambda_\alpha |\phi_\alpha^A\rangle \otimes |\phi_\alpha^B\rangle, \quad (1.76)$$

donde  $\lambda_\alpha > 0$  son números reales, conocidos como coeficientes de Schmidt, con suma de sus cuadrados unidad y  $m = \min\{m_A, m_B\}$ . La descomposición de Schmidt es única salvo rotaciones en los subespacios con coeficientes de Schmidt,  $\lambda_\alpha$ , degenerados. El rango de Schmidt,  $\chi$ , es el número de coeficientes de Schmidt distintos de cero. Diremos que el estado  $|\psi\rangle$  está entrelazado si  $\chi > 1$  (Breuer y Petruccione, 2002).

En la práctica, la descomposición de Schmidt se realiza mediante un *Singular Value Decomposition* (SVD). Por ejemplo, para hallar la descomposición del vector que aparece en la ecuación (1.75), aplicamos un SVD a la matriz  $c_{i,j}$ . Esto nos proporciona matrices unitarias  $U^A$ ,  $U^B$  y una matriz diagonal de traza unidad  $\Lambda$ , de forma que:

$$c_{i,j} = U_{i,\alpha}^A \Lambda_{\alpha,\alpha} U_{\alpha,j}^B. \quad (1.77)$$

Introduciendo la parte derecha de esta ecuación en la ecuación (1.75), obtenemos  $|\psi\rangle$  en la forma de Schmidt.

Un estado que no posee entrelazado,  $\chi = 1$ , puede ser expresado en forma de producto:

$$|\psi\rangle = |\psi^A\rangle \otimes |\psi^B\rangle. \quad (1.78)$$

En este caso, el valor esperado al medir cualquier observable  $\mathcal{O}_A$  en el subsistema  $\mathcal{S}_A$  u  $\mathcal{O}_B$  en el subsistema  $\mathcal{S}_B$  puede ser calculado según:

$$\langle \psi | \mathcal{O}_A | \psi \rangle = \langle \psi^A | \mathcal{O}_A | \psi^A \rangle, \quad (1.79)$$

$$\langle \psi | \mathcal{O}_B | \psi \rangle = \langle \psi^B | \mathcal{O}_B | \psi^B \rangle, \quad (1.80)$$

por lo que podemos definir unívocamente los estados cuánticos de los subsistemas  $\mathcal{S}_A$  y  $\mathcal{S}_B$  como  $|\psi^A\rangle$  y  $|\psi^B\rangle$ , respectivamente. Debido a que el resultado de cualquier medida en  $\mathcal{S}_A$  es independiente del estado de  $\mathcal{S}_B$  y viceversa, no pueden existir correlaciones entre estos dos subsistemas.

Para estados entrelazados,  $\chi > 1$ , sí podrán existir correlaciones entre  $\mathcal{S}_A$  y  $\mathcal{S}_B$ . En este caso hay que utilizar el formalismo de la matriz densidad para describir el estado de uno de los subsistema sin utilizar los grados de libertad del sistema global. La matriz densidad del subsistema  $\mathcal{S}_A$  es:

$$\rho_A = \text{tr}_B(|\psi\rangle \langle \psi|) = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha}^2 |\psi_{\alpha}^A\rangle \langle \psi_{\alpha}^A|, \quad (1.81)$$

donde  $\text{tr}_B$  denota la traza sobre los grados de libertad del sistema  $\mathcal{S}_B$ . El valor de cualquier operador sobre  $\mathcal{O}_A$  puede ser calculado mediante:

$$\langle \mathcal{O}_A \rangle = \text{tr}_A(\mathcal{O}_A \rho_A) = \sum_{i=1}^{\chi} \lambda_{\alpha}^2 \langle \psi_{\alpha}^A | \mathcal{O}_A | \psi_{\alpha}^A \rangle, \quad (1.82)$$

Este resultado puede ser interpretado con ideas similares a las que se utilizan en mecánica estadística. En concreto, podemos suponer que el subsistema  $\mathcal{S}_A$  posee probabilidades  $\lambda_\alpha^2$  de estar en cada uno de los estado microscópicos  $|\psi_\alpha^A\rangle$ , respectivamente. Esto permite introducir una entropía similar a la termodinámica. La entropía de Von Neumann de la matriz densidad  $\rho_A$  es:

$$S_A = -\text{tr}_A [\rho_A \log_2 (\rho_A)] = -\sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_\alpha^2 \log_2(\lambda_\alpha^2). \quad (1.83)$$

Esta cantidad sirve para cuantificar la cantidad de entrelazado que exhibe el estado de un subsistema dado por una matriz densidad arbitraria.

En varios estudios se concluye que la entropía de Von Neumann del estado fundamental, en presencia de interacciones de corto alcance y en una fase con gap, debe escalar con la frontera del subsistema considerado en vez de ser una magnitud extensiva, al menos lejos de un punto crítico (Eisert *et al.*, 2010). En consecuencia, la entropía de un subsistema no crítico satura a un valor finito en el caso 1D. Con este resultado en mente, podríamos intentar buscar el estado fundamental en una familia reducida de estados con entrelazado limitado entre las diferentes partes del sistema. En realidad, esto es equivalente a la renormalización de la matriz densidad que, como veremos en el siguiente capítulo, se lleva a cabo en el método DMRG. Hemos de notar que la situación en sistemas 2D es muy diferente pues la entropía de Von Neumann ha de divergir si escala con la frontera. Esto es, en parte, responsable de las dificultades que existen para generalizar métodos como DMRG a sistemas 2D.



# Métodos numéricos

En numerosos problemas de la física en los que obtener resultados analíticos es muy complicado, los métodos computacionales pueden ser una herramienta tremendamente útil. Gracias al aumento en la capacidad de cálculo de los ordenadores actuales, la física computacional se ha erigido en una disciplina importante que permite el estudio de sistemas complejos, inabordable mediante desarrollos exactos. En esta tesis, hemos estudiado sistemas fermiónico y bosónicos interactuantes utilizando principalmente simulaciones numéricas. Por esta razón, hemos creído conveniente explicar en este capítulo algunos de los algoritmos numéricos utilizados.

En la primera sección explicamos el método que utilizamos en el capítulo 3 para obtener un conjunto relativamente grande de estados de baja energía en el modelo de vidrios de Coulomb. En la sección 2.2, analizamos el crecimiento de la dimensión del espacio de estados en sistemas cuánticos interactuantes y las dificultades que este crecimiento implica. En la sección 2.3, discutimos como escala el tiempo de computación empleado para diagonalizar el hamiltoniano de Anderson mediante dos librerías de código abierto que también empleamos en el capítulo 3. Una de estas librerías permite la diagonalización parcial del hamiltoniano y la otra una diagonalización completa. En la sección 2.4, vemos como obtener la DDE para sistemas cuánticos mediante diagonalizaciones parciales. El resto del capítulo lo dedicamos a analizar las simulaciones de sistemas 1D con entrelazado limitado. En la sección 2.5, describimos las ideas claves en los métodos del tipo DMRG. En la sección 2.6, analizamos una familia de estados conocida como estados producto de matrices (MPS). Finalmente, en la sección 2.7 analizaremos, en detalle, la versión infinita del algoritmo conocido como evolución en el tiempo con un método de

diezmado infinito o, en sus siglas en inglés, *infinite time-evolving block decimation* (iTEBD), pues su implementación ha sido necesaria para obtener los resultados principales que se expondrán en el capítulo 5.

## 2.1. Sistemas electrónicos e interactuantes en el regimen clásico

En el siguiente capítulo veremos como es posible obtener la DDE para electrones interactuantes en una red desordenada utilizando el término de *hopping* como perturbación. Para hacer esto, es importante obtener un número relativamente grande de configuraciones de baja energía en el régimen clásico, es decir, cuando los electrones están completamente localizados. A continuación describimos el método, basado en el trabajo de Díaz-Sánchez *et al.* (2000), que hemos empleado para realizar este cálculo.

El primer paso del algoritmo consiste en determinar un conjunto de estados de baja energía metaestables. En el segundo paso, se completa este conjunto explorando estados «ceranos» a los estados metaestables.

En la primera etapa del algoritmo, empezamos repetidamente desde estados elegidos aleatoriamente y relajamos cada muestra mediante un procedimiento de búsqueda local. Éste consiste en hallar las configuraciones de menor energía que difieren por un salto de un electrón o saltos de dos electrones. El procedimiento acaba cuando no se puede encontrar ninguno de estos saltos que reduzca la energía. Repitiendo este proceso muchas veces, encontramos un conjunto de estados metaestables y congelamos los sitios que poseen la misma ocupación en estos estados. Todo este proceso se aplica iterativamente a los sitios que no han sido congelados y se finaliza cuando no se encuentran nuevos sitios congelados. En la segunda etapa, el conjunto de estado de baja energía se genera mediante transiciones de uno o dos electrones respecto a cualquiera de los estados metaestables.

Este algoritmo permite hallar un número grande de configuraciones de baja energía. A pesar de ello, el rango de energías cubierto por estos estados se

desvanecerá en el límite termodinámico, pues la distancia entre niveles tiende a cero en este límite.

## 2.2. Espacio de estados en sistemas interactuantes

En mecánica cuántica el espacio de configuraciones de un sistema corresponde a un espacio de Hilbert,  $\mathcal{E}$ , cuya dimensión,  $M$  cuantifica sus grados de libertad. Cuando el sistema está aislado, todas las propiedades del mismo pueden ser obtenidas diagonalizando una matriz hermítica, el hamiltoniano, definida sobre  $\mathcal{E}$ . Suponemos un sistema formado por varios subsistemas con espacios de Hilbert  $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_N$  con dimensión  $m_1, m_2, \dots, m_N$ , respectivamente. El sistema compuesto tiene un espacio de Hilbert dado por:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_N, \quad (2.1)$$

y posee dimensión  $M = m_1 \times m_2 \times \dots \times m_N$ . Cuando no hay interacción entre las diferentes partes del sistema, el hamiltoniano puede ser expresado como:

$$H = H_1 + H_2 + \dots + H_N, \quad (2.2)$$

donde  $H_i$  es el hamiltoniano del subsistema  $i$ -ésimo. En este caso, los autoestados de  $H$  se pueden construir fácilmente a partir de los autoestados de cada una de las matrices  $H_i$ . De esta forma, el problema no interactuante se reduce a diagonalizar el hamiltoniano de cada uno de los subsistemas.

La simplificación anterior no es posible en presencia de interacciones y nos vemos forzados a considerar un hamiltoniano definido en el espacio total, lo que implica tener que diagonalizar una matriz en un espacio de dimensión  $M = m_1 \times m_2 \times \dots \times m_N$ . Por ejemplo, si todos los subsistemas son iguales y tienen dimensión  $m$ , el espacio de Hilbert donde diagonalizamos  $H$  tiene dimensión  $M = m^N$ , donde  $N$  es el número de componentes del sistema. La simulación de sistemas cuánticos interactuantes es, en general, muy complicada debido a este crecimiento exponencial.

### 2.2.1. Simetrías

En ciertos casos podemos diagonalizar el hamiltoniano en un espacio reducido de estados utilizando las simetrías del sistema. Supongamos  $\mathcal{S}$  un operador hermítico que es simetría de  $H$ :

$$[H, \mathcal{S}] = 0. \quad (2.3)$$

Cuando esta ecuación se cumple, es posible encontrar una base de estados que son autovectores de  $H$  y  $\mathcal{S}$  a la vez, lo que implica que el hamiltoniano es diagonal por cajas (Cohen-Tannoudji *et al.*, 2006):

$$H = \left( \begin{array}{c|ccc} \mathcal{H}_{s_1} & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & \mathcal{H}_{s_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & & \mathcal{H}_{s_N} \end{array} \right), \quad (2.4)$$

donde cada  $\mathcal{H}_{s_i}$  es el hamiltoniano restringido al subespacio de autovectores de  $\mathcal{S}$  con autovalor  $s_i$ . En algunos casos es posible reducir la complejidad del problema diagonalizando las matrices  $\mathcal{H}_{s_1} \dots \mathcal{H}_{s_N}$  en vez del hamiltoniano completo. Por ejemplo, para averiguar el estado del sistema a temperatura cero sólo hace falta encontrar el estado fundamental. Si este estado tiene un valor bien definido de la simetría  $s_i$ , podemos restringir la diagonalización a la matriz  $\mathcal{H}_{s_i}$ .

## 2.3. Diagonalización exacta

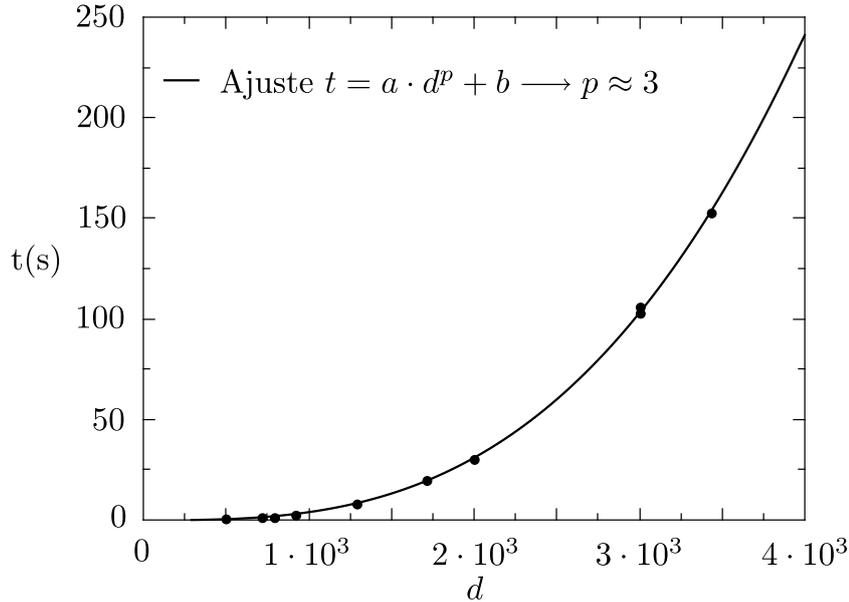
Revisamos dos paquetes de subrutinas de código abierto diseñados para la diagonalización de matrices y que hemos utilizado en los capítulos 3 y 4. El primero de ellos se conoce por *ARnoldi PACKage* o ARPACK y está especialmente diseñado para la diagonalización parcial de matrices (Lehoucq *et al.*, 1998). Las ARPACK han sido empleadas en el capítulo 3 para obtener un número reducido de autoestados de pequeña energía que, como veremos en la próxima sección, pueden ser utilizados para aproximar la DDE para sistemas electrónicos en el régimen cuántico. En el capítulo 4, las subrutinas contenidas en ARPACK han sido muy útiles para obtener

el estado fundamental de esta clase de sistemas y calcular su longitud de localización. Otro paquete que permite realizar una diagonalización completa es *Linear Algebra PACKage* o LAPACK y lo hemos empleado para comprobar que los resultados obtenidos para la DDE con ARPACK son correctos. El paquete LAPACK contiene varias subrutinas para resolver diferentes problemas de álgebra lineal. Una de estas subrutinas produce una diagonalización completa de una matriz mediante el método de factorización LU (Press *et al.*, 1992).

A continuación, analizamos la eficiencia de las ARPACK y las LAPACK. Para ello mostraremos los tiempos de CPU empleados en la diagonalización del hamiltoniano de Anderson para electrones sin espín y con interacciones de largo alcance en sistemas 1D. Este hamiltoniano fue introducido en la sección relativa a los modelos del capítulo 1. Hemos empleado una máquina Intel Xeon Processor E5520 (8M Cache, 2.26 GHz, 5.86 GT/s Intel QPI).

De manera muy resumida, el modelo de Anderson describe fermiones en una red no cristalina con un número de sitios variable  $N$ . En cada uno de ellos puede haber una o ninguna partícula, de forma que la dimensión de un sitio es  $m = 2$ . Así, el crecimiento del espacio de Hilbert sin imponer ningún tipo de simetría es exponencial  $M = 2^N$ . El hamiltoniano que tratamos conserva el número de partículas y por ello, su diagonalización puede ser realizada en un subespacio con número de electrones bien definido,  $N_e$ . La dimensión de este subespacio es  $d = \binom{N}{N_e}$ .

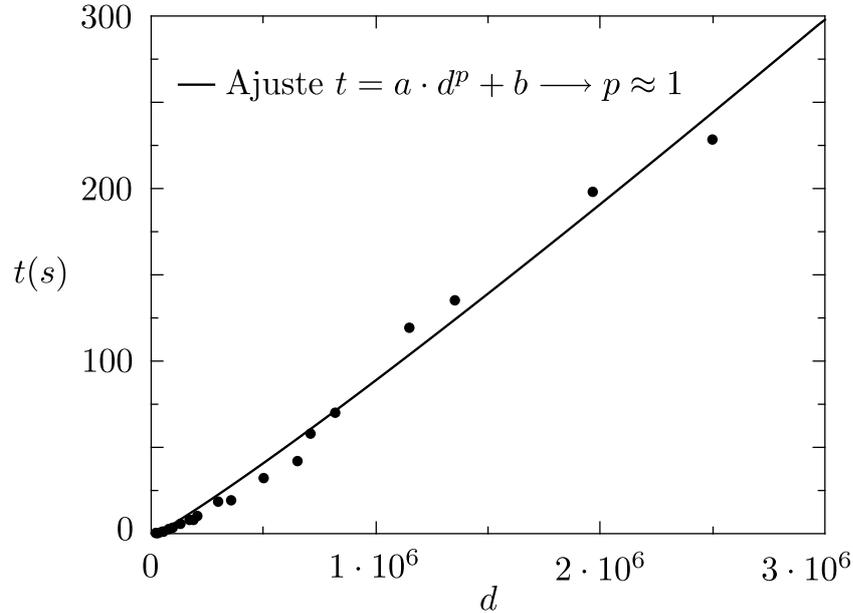
Estudiamos como escala el tiempo de CPU consumido al diagonalizar una matriz utilizando las subrutinas de las librerías LAPACK. En la figura 2.1, hemos representado el tiempo, en segundos, requerido para diagonalizar el hamiltoniano de Anderson en función del tamaño del espacio de Hilbert  $d$ . Notamos que el número de elementos de cada matriz es  $d^2$ . La línea continua es un ajuste de los datos a una función del tipo  $t = ad^p + b$ . El resultado arroja valores  $a = (5 \pm 1)10^{-9}$ ,  $b = (-1 \pm 1)10^{-1}$  y  $p = 2.96 \pm 2 \cdot 10^{-2}$ . Para el caso del hamiltoniano de Anderson, un sistema de tamaño  $N = 20$  con  $N_e = 10$  partículas tiene un espacio de Hilbert de dimensión  $d = 184756$ . La diagonalización del hamiltoniano llevaría un tiempo aproximado de 20 días.



**Figura 2.1:** Tiempo de CPU empleado en diagonalizar una matriz cuadrada con las subrutinas LAPACK frente al tamaño del espacio de Hilbert,  $d$ . El tiempo se mide en segundos. Notamos que el número de elementos de la matriz es  $d^2$ . La línea continua ajusta los datos a una función tipo  $t = ad^p + b$ , con un resultado  $a = (5 \pm 1)10^{-9}$ ,  $b = (-1 \pm 1)10^{-1}$  y  $p = 2.96 \pm 2 \cdot 10^{-2}$ .

En algunos cálculos nos basta con encontrar unos pocos autoestados del hamiltoniano. Por ejemplo, las propiedades de los sistemas a temperaturas cercanas a cero dependen del estado fundamental. En estos casos, es más eficiente utilizar las subrutinas ARPACK, que se basan en una variante del método de Arnoldi conocido como *Implicitly Restarted Arnoldi Method* y está especialmente diseñado para calcular unos pocos autovectores de matrices *sparse* (Lehoucq *et al.*, 1998). Una matriz *sparse* es aquella en la que muchas de sus entradas son iguales a cero. Para utilizar las ARPACK, el usuario necesita proporcionar una subrutina que multiplique la matriz a diagonalizar por un vector dado. De hecho, el éxito del método para un problema concreto depende en gran medida de la eficiencia de esta subrutina.

El hamiltoniano de Anderson es *sparse*. De hecho, tan sólo contiene del orden de  $d$  elementos distintos de cero, siendo  $d^2$  el número de elementos de la matriz.



**Figura 2.2:** Tiempo de CPU empleado en encontrar el estado fundamental y la energía de una matriz cuadrada con las subrutinas ARPACK en segundos frente al tamaño del espacio de Hilbert,  $d$ . La línea continua ajusta los datos a una función de la forma  $t = ad^p + b$ , con  $a = (3 \pm 1)10^{-5}$ ,  $b = -1 \pm 1$  y  $p = 1.09 \pm 4 \cdot 10^{-2}$ .

En la figura 2.2 podemos ver el tiempo de CPU empleado en encontrar, mediante las ARPACK, el estado fundamental y su energía para diferentes valores de la dimensión del espacio de Hilbert  $d$ . La línea es un ajuste de los datos a una ley  $t = ad^p + b$ , con un resultado  $a = (3 \pm 1)10^{-5}$ ,  $b = -1 \pm 1$  y  $p = 1.09 \pm 4 \cdot 10^{-2}$ . En buena aproximación, el tiempo escala linealmente con la dimensión del espacio. Notamos que el mayor tamaño que hemos tratado en la figura 2.2 corresponde a  $N = 24$  con  $N_e = 10$  partículas. Concluimos que las subrutinas ARPACK son más eficientes que las LAPACK cuando sólo es necesario el cálculo del estado fundamental. Estas subrutinas también son adecuadas para obtener un conjunto pequeño de autoestados de mínima energía.

Aún en el caso anterior, donde sólo hemos calculado el estado fundamental, hemos obtenido un tiempo de CPU que escala de forma lineal con la dimensión

del espacio de Hilbert del sistema. Esta dimensión crece exponencialmente con el tamaño y por tanto, el tiempo de CPU seguirá una ley exponencial  $t \sim a^N$ , con  $a$  una constante real. Por esta razón, el tratamiento de sistemas cuánticos interactuantes mediante diagonalización exacta es ineficiente.

## 2.4. Cálculo del gap de Coulomb mediante diagonalización exacta

En el primer capítulo analizamos el gap de Coulomb que aparece en la DDE en el régimen completamente localizado, o clásico. En este caso, vimos que podíamos definir unas energías en cada sitio de la red y, a partir de estas, calcular la DDE. En general, no es posible definir energías de sitio cuando existen efectos cuánticos. En este apartado, calculamos la DDE con un método general que también permite tratar el caso cuántico.

Utilizamos el modelo de vidrios de Coulomb clásico introducido en la sección relativa a los modelos. Como veremos más detalladamente en el próximo capítulo, la DDE local en el sitio  $i$  puede ser calculada utilizando la fórmula:

$$\begin{aligned} \rho_i(\epsilon) = & \sum_{\alpha} \delta(\epsilon - E_{\alpha}^p + E_0) \left| \langle \psi_{\alpha}^p | c_i^{\dagger} | \psi_0 \rangle \right|^2 \\ & + \sum_{\beta} \delta(\epsilon + E_{\beta}^h - E_0) \left| \langle \psi_{\beta}^h | c_i | \psi_0 \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde  $E_0$  es la energía y  $|\psi_0\rangle$  el estado fundamental, ambos en el conjunto gran canónico. La energía de un autoestado  $\alpha$  con un electrón añadido al estado fundamental se denota como  $E_{\alpha}^p$  y su estado correspondiente  $|\psi_{\alpha}^p\rangle$ . Para un estado  $\beta$  con un hueco añadido usamos  $E_{\beta}^h$  y  $|\psi_{\beta}^h\rangle$ . La DDE,  $\rho(\epsilon)$ , es el promedio sobre muchos sitios de la DDE local.

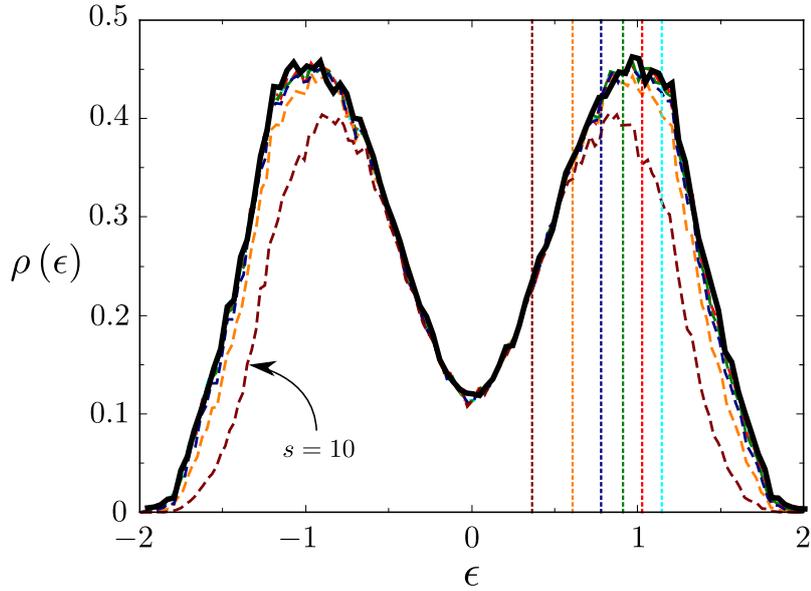
Para calcular la DDE hemos de determinar, en primer lugar, el estado fundamental en el conjunto gran canónico. Asumimos que el potencial químico es tal que favorece las configuraciones con ocupación mitad y diagonalizamos el problema con un número de electrones desde  $N/2 - 2$  a  $N/2 + 2$ , donde  $N$  es el número de

sitios del sistema. Determinamos el estado fundamental como el estado de mínima energía y denotamos su número de electrones como  $N_e$ . Guardamos este estado y su energía, pues serán utilizados posteriormente. Notamos que el estado fundamental real puede contener una ocupación distinta a los casos que calculamos. Esto ocurre pocas veces y el error asociado es pequeño.

En principio, hay que obtener todos los autoestados y autoenergías con  $N_e \pm 1$  electrones para calcular la ecuación (2.5). Utilizamos que el gap de Coulomb aparece a energías próximas a la de Fermi para reducir este cálculo. Empleando las librerías ARPACK realizamos una diagonalización parcial de los hamiltonianos con  $N_e \pm 1$  electrones. Calculamos los  $s$  estados de mínima energía en cada caso. Utilizando este conjunto restringido de estados, calculamos las DDE promediando para todos los sitios y varias muestras.

Este cálculo no proporciona una buena aproximación para la DDE a cualquier energía pues no hemos considerados todos los autoestados. A continuación explicamos como podemos estimar un rango de energías fiables. Denotamos la mayor autoenergía obtenida para la muestra  $i$ -ésima como  $E_s^{(i)}$ . Una opción es establecer  $\epsilon(s)$  de forma que todas las muestras utilizadas cumplan  $\epsilon(s) < E_s^{(i)}$ . De hecho, el error debido a considerar una base reducida es cero en el intervalo  $[-\epsilon(s), \epsilon(s)]$ . Esta condición restringe demasiado la zona de validez de la aproximación. Adoptamos una energía máxima  $\epsilon(s)$  de forma que tan solo el 5% de las muestras violan la desigualdad  $\epsilon(s) < E_s^{(i)}$ .

A continuación, vamos a comparar la DDE obtenida con diagonalizaciones parciales y completa. En la figura 2.3 presentamos la DDE clásica para sistemas 1D de tamaño  $N = 10$ . La diagonalización completa corresponde a la línea continua gruesa y se ha llevado a cabo mediante las LAPACK. Las líneas semicontinuas representan los cálculos para diagonalizaciones parciales con un número de estados  $s = 10, 20, 30, 40, 50, 60$  y se han realizado con las ARPACK. Las líneas verticales señalan la energía  $\epsilon(s)$  para cada  $s$ , según el criterio que acabamos de explicar. Todas las DDE calculadas mediante diagonalizaciones parciales coinciden en buena aproximación con el resultado exacto, excepto para  $s = 10$ . Más aún, la DDE



**Figura 2.3:** DDE clásica en función de la energía para sistemas 1D y tamaño  $N = 10$ . La línea continua gruesa ha sido obtenida mediante diagonalización completa utilizando las LAPACK. Las líneas discontinuas corresponden a diagonalizaciones parciales empleando las ARPACK. En estas, sólo consideramos  $s$  estados para los casos con  $N_e \pm 1$  electrones, donde  $N_e$  es el número de electrones del estado fundamental. Hemos incluido el cálculo para  $s = 10, 20, 30, 40, 50, 60$ . Señalamos la curva correspondiente a  $s = 10$  para mayor claridad. Las líneas verticales señalan la energía máxima  $\epsilon(s)$  según el criterio explicado en el texto principal. De izquierda a derecha, éstas corresponden a  $s = 10, 20, 30, 40, 50, 60$ .

para cualquier valor de  $s$  concuerda muy bien con la DDE exacta en el intervalo  $[-\epsilon(s), \epsilon(s)]$ . En el capítulo 3, sólo mostraremos la DDE en el intervalo de energías determinado mediante este criterio cuando utilizemos diagonalización exacta para obtener la DDE.

El método que hemos explicado se puede generalizar sin problemas para tratar de calcular cualquier hamiltoniano *sparse*, siempre y cuando estemos interesados en la DDE en una región cercana al nivel de Fermi.

## 2.5. Simulación a entrelazado limitado

El desarrollo de métodos basados en grupo de renormalización (RG) permite la simulación eficiente de sistemas cuánticos 1D con interacciones de corto alcance, al menos lejos de un punto crítico. En esta sección comentamos brevemente en que consisten los cálculos numéricos que utilizan RG, para luego pasar a describir los aspectos básicos de DMRG y como el entrelazado juega un papel importante en este algoritmo.

Los métodos basados en RG han sido ampliamente utilizados para el cálculo numéricos de las propiedades de sistemas cuánticos interactuantes. En un primer momento se utilizó un criterio energético, que explicamos a continuación, para realizar la renormalización. Consideramos un superbloque,  $\mathcal{S}$ , formado por dos bloques,  $\mathcal{S}_A$  y  $\mathcal{S}_B$ . Construimos un espacio de estados renormalizado para el superbloque utilizando un conjunto reducido de estados formado a partir de los  $r$  estados de menor energía de  $\mathcal{S}_A$  y los  $r$  de  $\mathcal{S}_B$ . Esta renormalización se lleva a cabo iterativamente para crecer el sistema. Por ejemplo, podemos subdividir el sistema completo en bloques relativamente pequeños y aplicar este esquema de renormalizaciones a cada dos bloques contiguos el número de veces que haga falta. De esta forma, podemos obtener un espacio de estados renormalizados para el sistema completo que tendrá una dimensión mucho menor que el espacio de Hilbert original.

Hemos de notar que existen otras formas de crecer el sistema. Por ejemplo, en cada paso de renormalización podemos añadir un sitio a un bloque. En este caso, se renormaliza el espacio de estados del bloque más el sitio. Todos los algoritmos de RG basados en criterios energéticos asumen implícitamente que los estados de menor energía del sistema total pueden ser aproximados utilizando los estados menos energéticos de las diferentes partes del sistema. Esta clase de algoritmos se aplicaron con éxito al problema de Kondo (Wilson, 1975), pero fallan para otros muchos modelos. White y Noack (1992) analizaron el problema de una sola partícula en una red cristalina utilizando RG. En su trabajo se concluye que los estados menos energéticos de las diferentes partes del sistema no pueden reproducir fielmente el

estado de mínima energía del sistema total. En un trabajo posterior, White (1992) introdujo el algoritmo DMRG que permite obtener las propiedades del estado fundamental y unos pocos autoestados excitados para sistemas cuánticos interactuantes con interacciones a primeros vecinos.

En DMRG se utiliza la matriz densidad para llevar a cabo la renormalización. Describimos este algoritmo brevemente. En primer lugar, se obtiene el estado fundamental del superbloque para seguidamente, calcular la matriz densidad de cada uno de los bloques asociada a este estado fundamental. El espacio de estados renormalizado se construye a partir de los  $r$  autoestados con mayores autovalores de cada matriz densidad. La forma de crecer el sistema en DMRG es importante. Para ello, se consideran dos bloques y en cada paso de renormalización se les añade un sitio nuevo a cada bloque.

En la última década se han propuesto varios métodos basados en las ideas de DMRG. Por ejemplo, Vidal (2004) desarrolló el algoritmo TEBD para simular la evolución temporal de un estado cuántico. Utilizando un tiempo imaginario, este algoritmo puede ser empleado para la obtención del estado fundamental. Tanto DMRG como TEBD comparten una característica común, a saber, minimizan la energía o simulan la evolución en una familia de estados reducida que exhibe correlaciones cuánticas limitadas. Esta familia de estados se conoce como estados producto de matrices (MPS) y poseen entrelazado limitado.

## 2.6. Estados producto de matrices

En lo que sigue, consideramos una red 1D compuesta por  $N$  sitios. Todos ellos poseen el mismo espacio de Hilbert de dimensión  $m$ , siendo  $\{|i\rangle\}_{i=1}^m$  una base de este espacio. Así, un estado arbitrario de la red puede ser representado como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N=1}^m c_{i_1, i_2, \dots, i_N} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle, \quad (2.6)$$

donde  $c_{i_1, i_2, \dots, i_N} \in \mathbb{C}$  y hemos abreviado el producto tensorial:

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle. \quad (2.7)$$

Nos referimos a los índices que etiquetan el espacio de estados de cada sitio como índices físicos.

Un estado producto de matrices (MPS) de dimensión  $\chi$  y condiciones de contorno abiertas tiene la forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N=1}^m A^{[1]i_1} A^{[2]i_2} \dots A^{[N]i_N} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle, \quad (2.8)$$

donde  $A^{[2]i} \dots A^{[N-1]i}$  son matrices cuadradas complejas de dimensión  $\chi \times \chi$  para cada valor del índice físico  $i = 1, \dots, m$ , mientras que  $A^{[1]i}$  y  $A^{[N]i}$  son vectores fila y columna de dimensión  $\chi$ , respectivamente. Para el caso de condiciones de contorno periódicas tendremos que todos los sitios vienen descritos por matrices cuadradas de tamaño  $\chi \times \chi$ . En este caso:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N=1}^m \text{tr} \left( A^{[1]i_1} A^{[2]i_2} \dots A^{[N]i_N} \right) |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle. \quad (2.9)$$

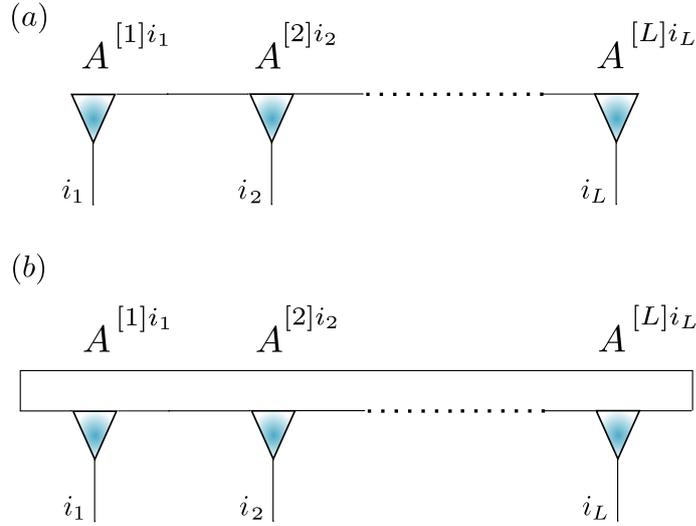
En la figura 2.4 mostramos redes tensoriales que representan MPS para condiciones abiertas y cerradas. Es fácil comprobar que un MPS de dimensión  $\chi$  tiene un rango de Schmidt limitado a  $\chi$  para cualquier partición del sistema.

Teniendo en cuenta la ecuación (2.8) o la (2.9), podemos estimar el número de parámetros libres,  $d$ , necesarios para especificar un MPS con matrices de dimensión  $\chi$  como:

$$d \sim m \times \chi^2 \times N, \quad (2.10)$$

donde  $m$  es la dimensión del espacio de Hilbert de un sitio y  $N$  el número de sitios. La familia variacional de MPS con dimensión  $\chi$  tiene un número de parámetros libres que crece linealmente con el tamaño del sistema. Recordamos que la dimensión del espacio de Hilbert completo crece de manera exponencial con  $N$ . En consecuencia, es mucho más sencillo buscar el estado de mínima energía en la familia de MPS para  $\chi$  finito, que hacerlo en el espacio de Hilbert del sistema completo. El algoritmos DMRG y otros similares son métodos variacionales, más o menos eficientes, que minimizan la energía en la familia de MPS para un  $\chi$  dado.

Hemos de notar que un mismo estado puede ser representado por varios MPS debido a la existencia de cierta simetría Gauge. Ésta tiene como grupo Gauge el



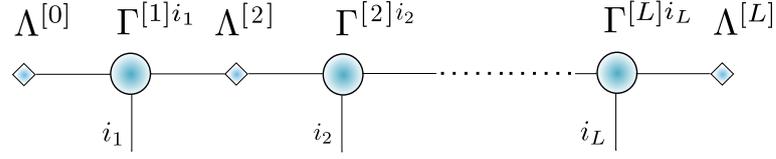
**Figura 2.4:** Representación gráfica de un MPS como una red tensorial. Los triángulos corresponden a tensores con tres índices, cada uno de ellos está representado por una línea. Los índices físicos vienen dados por líneas verticales. Una línea que une dos triángulos diferentes significa la contracción de los índices correspondientes. Las redes tensoriales correspondientes a un MPS con condiciones de contorno abiertas y cerradas aparecen en (a) y (b), respectivamente.

general lineal  $GL(\chi, \mathbb{C})$  de las matrices complejas invertibles de dimensión  $\chi \times \chi$ . La operación de simetría se consigue operando las matrices de cada sitio según:

$$A^{[k]i} \longrightarrow C_{k-1} A^{[k]i} C_k^{-1}, \quad (2.11)$$

donde  $C_k \in GL(\chi, \mathbb{C})$  para  $k = 1, 2, \dots, N$ .

La idea de parametrizar un estado con matrices de dimensión variable,  $\chi$ , puede ser utilizada para representar de manera eficiente observables. Esta clase de operadores se conocen como operadores producto de matrices y poseen ciertas aplicaciones interesantes. Por ejemplo, Hartmann *et al.* (2009) desarrollaron un método, conocido como DMRG en la imagen de Heisenberg, basado en operadores producto de matrices. En este algoritmo se realiza la evolución temporal de un operador utilizando la imagen de Heisenberg, lo que permite ganar eficiencia respecto otros



**Figura 2.5:** Representación gráfica de un MPS en la forma de Vidal, ecuación (2.12). Los círculos corresponden a tensores con 3 índices y los rombos denotan matrices diagonales. Cada círculo está conectado a tres líneas que representan cada uno de sus índices. Los rombos representan matrices y están conectados a dos líneas.

métodos que evolucionan el estado cuántico completo.

### 2.6.1. Estados en la forma de Vidal

Examinamos una forma de expresar un MPS, conocida como forma de Vidal, que será muy útil a la hora de implementar el algoritmo iTEBD. En lo que sigue, utilizamos el convenio de Einstein para la suma de índices repetidos. Notamos que todos los subíndices para los que se utilizan letras griegas toman valores de 1 a  $\chi$ , mientras que los subíndices con letras latinas toman valores de 1 a  $m$ .

Utilizamos matrices de dimensión  $\chi \times \chi$ ,  $\Gamma^{[k]i}$  con  $i = 1, \dots, m$  y matrices diagonales  $\Lambda^{[k]}$ . El superíndice,  $k$ , hace referencia al sitio de la red al que pertenecen. Un MPS en esta forma alternativa y con condiciones de contorno periódicas se expresa como (Vidal, 2004):

$$|\psi\rangle = \text{tr} \left( \Gamma^{[1]i_1} \Lambda^{[1]} \Gamma^{[2]i_2} \Lambda^{[2]} \dots \Lambda^{[N-1]} \Gamma^{[N]i_N} \right) |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle, \quad (2.12)$$

Un MPS en la forma de Vidal sigue teniendo la libertad Gauge que hemos analizado en el apartado anterior. Ésta se puede restringir expresando el MPS en forma canónica. Decimos que un MPS en la forma de Vidal es canónico si las matrices de cualquier sitio cumplen (Orús y Vidal, 2008):

$$\left( \Gamma^{[k]i} \right)^\dagger \left( \Lambda^{[k-1]} \right)^2 \Gamma^{[k]i} = \Gamma^{[k]i} \left( \Lambda^{[k]} \right)^2 \left( \Gamma^{[k]i} \right)^\dagger = \mathbb{I}. \quad (2.13)$$

Cuando el sistema tiene simetría translacional el estado que aparece en la ecuación (2.13) puede ser simplificado. En este caso, podemos obtener un MPS invariante bajo translaciones considerando las matrices de todos los sitios iguales:

$$|\psi\rangle = \text{tr} \left( \dots \Gamma^{i_k} \Lambda \Gamma^{i_{k+1}} \Lambda \Gamma^{i_{k+2}} \Lambda \dots \right) | \dots i_k, i_{k+1}, i_{k+2} \dots \rangle, \quad (2.14)$$

Nos referimos a esta clase de estados como estados producto de matrices infinitos o *infinite Matrix Product States* (iMPS). Por último, un iMPS dado por matrices  $\{\Gamma, \Lambda\}$  es canónico si estas matrices cumplen la ecuación (2.13). Esto es, un iMPS es canónico si cumple:

$$\left(\Gamma^i\right)^\dagger \Lambda^2 \Gamma^i = \Gamma^i \Lambda^2 \left(\Gamma^i\right)^\dagger = \mathbb{I}. \quad (2.15)$$

La descripción de un iMPS contiene muchos menos parámetros libres que el caso general. Además, un iMPS representa un estado en el límite termodinámico, lo que elimina posibles efectos de tamaño finito.

## 2.7. Evolución en el tiempo con un método de diezmado infinito (iTEBD)

Examinamos el método iTEBD desarrollado por Vidal (2007). Éste permite aproximar la evolución temporal de un sistema 1D con invarianza translacional y con interacciones de corto alcance en el límite termodinámico. Utilizando un tiempo imaginario, el mismo método es también capaz de aproximar el estado fundamental. Tanto la evolución temporal como la minimización son realizadas en la familia de MPS con cierta dimensión de las matrices,  $\chi$ .

Suponemos un hamiltoniano que, además de ser invariante translacional, posee interacciones a primeros vecinos y es independiente del tiempo. Éste puede ser expresado como:

$$H = \sum_k h^{[k,k+1]}, \quad (2.16)$$

donde la suma se lleva a cabo para todos los sitios de la red. Cada operador  $h^{[k,k+1]}$  actúa sobre los sitios  $k$  y  $k+1$ . Debido a la invarianza translacional, los elementos

## 2.7 Evolución en el tiempo con un método de diezmado infinito (iTEBD) 67

de matriz de los operadores  $h^{[r,r+1]}$  y  $h^{[k,k+1]}$  son iguales para cualesquiera sitios  $k$  y  $r$ .

En esta sección, al igual que en la anterior, utilizamos el convenio de Einstein para la suma de índices repetidos, a no ser que se especifique lo contrario. Notamos que todos los subíndices para los que se utilizan letras griegas toman valores de 1 a  $\chi$ , mientras que los subíndices con letras latinas toman valores de 1 a  $m$ .

### 2.7.1. Resultados previos

Antes de presentar los pasos necesarios para implementar iTEBD, vamos a analizar algunos resultados preliminares útiles tanto para este algoritmo como para TEBD.

#### Evolución en el tiempo

Estamos interesados en calcular la evolución temporal de un MPS. El operador evolución temporal es:

$$U(t) = e^{-iHt}. \quad (2.17)$$

que actúa simultáneamente sobre todos los sitios del sistema. Desde un punto de vista numérico, es muy útil simplificar  $U(t)$  en una serie de operadores que, cada uno de ellos, actúe sobre dos sitios. Esto es fácil si todos los operadores  $h^{[k,k+1]}$  en la ecuación (2.16) conmutan entre sí. En este caso, podemos expresar la exponencial  $\exp(-iHt)$  como producto de exponenciales tipo  $\exp(-ih^{[k,k+1]}t)$ . Desafortunadamente, los operadores  $h^{[k,k+1]}$  no siempre conmutan entre sí. A continuación, vamos a utilizar la expansión de Suzuki-Trotter para simplificar  $\exp(-iHt)$  en el caso general.

El hamiltoniano de la ecuación (2.16) es igual a la suma de dos operadores:

$$H = F + G \quad (2.18)$$

donde:

$$\begin{aligned} F &= \sum_k h^{[2k, 2k+1]}, \\ G &= \sum_k h^{[2k-1, 2k]}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Los términos que aparecen en  $F$  son operadores que actúan sobre diferentes sitios de la red. Por esta razón, conmutan entre sí. De la misma manera, todos los términos que contiene  $G$  también conmutan entre sí. Por ello, podemos expresar la exponencial de estos operadores como:

$$\begin{aligned} e^{-iFt} &= \prod_k O^{[2k]}(t), \\ e^{-iGt} &= \prod_k O^{[2k-1]}(t), \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde:

$$O^{[r]}(t) = e^{-ih^{[r, r+1]}t}, \quad (2.21)$$

El problema a la hora de simplificar  $U(t)$ , es que  $F$  y  $G$  no conmutan en general. Para abordar este problema numéricamente, expresamos la evolución de un tiempo finito  $t$  en  $p$  pasos. Para ello:

$$U(t) = \prod_{i=1}^p U(\delta t), \quad (2.22)$$

donde  $\delta t = t/p$ . Empleando la expansión de Suzuki-Trotter de primer orden:

$$U(\delta t) = e^{-iF\delta t} e^{-iG\delta t} + \mathcal{O}(\delta t^2). \quad (2.23)$$

Utilizando esta ecuación y la (2.20), podemos aproximar la evolución en el tiempo como producto de operadores que, cada uno de ellos, sólo actúa sobre dos sitios. También podemos emplear la expansión de Suzuki-Trotter de segundo orden. En este caso:

$$U(\delta t) = e^{-\frac{i}{2}F\delta t} e^{-iG\delta t} e^{-\frac{i}{2}F\delta t} + \mathcal{O}(\delta t^3) \quad (2.24)$$

En el algoritmo TEBD suele haber otras fuentes de error mayores que el asociado a la expansión de Trotter-Suzuki. Por esta razón, en multitud de ocasiones no hay una mejora en los resultados al utilizar expansiones mayores que la de segundo orden.

**Puerta de dos sitios**

Acabamos de ver que el operador evolución temporal puede ser aproximado mediante operadores que sólo actúan sobre dos sitios. A continuación, mostramos como aplicar un operador de dos sitios a un MPS en la forma de Vidal conservando la forma y la dimensión de las matrices del MPS original.

Consideramos un operador arbitrario  $O^{[k,k+1]}$  que actúa sobre el espacio de Hilbert de los sitios  $k$  y  $k + 1$ . Denotamos sus elementos de matriz como:

$$O_{i',j',i,j}^{[k,k+1]} = \langle i', j' | O^{[k,k+1]} | i, j \rangle. \tag{2.25}$$

Aplicamos este operador a un MPS de dimensión  $\chi$  dado por la ecuación (2.12). Esta operación se puede realizar alterando tan solo las matrices correspondientes a los sitios  $k$  y  $k + 1$ . Por ello, contraemos los índices que no involucran a las matrices de los sitios mencionados:

$$|\psi\rangle = \Lambda_{\alpha,\alpha}^{[k-1]} \Gamma_{\alpha,\gamma}^{[k-1]i} \Lambda_{\gamma,\gamma}^{[k]i'} \Gamma_{\gamma,\beta}^{[k+1]i} \Lambda_{\beta,\beta}^{[k+2]} |\phi_{\alpha}^{[k-1]}, i, j, \varphi_{\beta}^{[k+2]}\rangle, \tag{2.26}$$

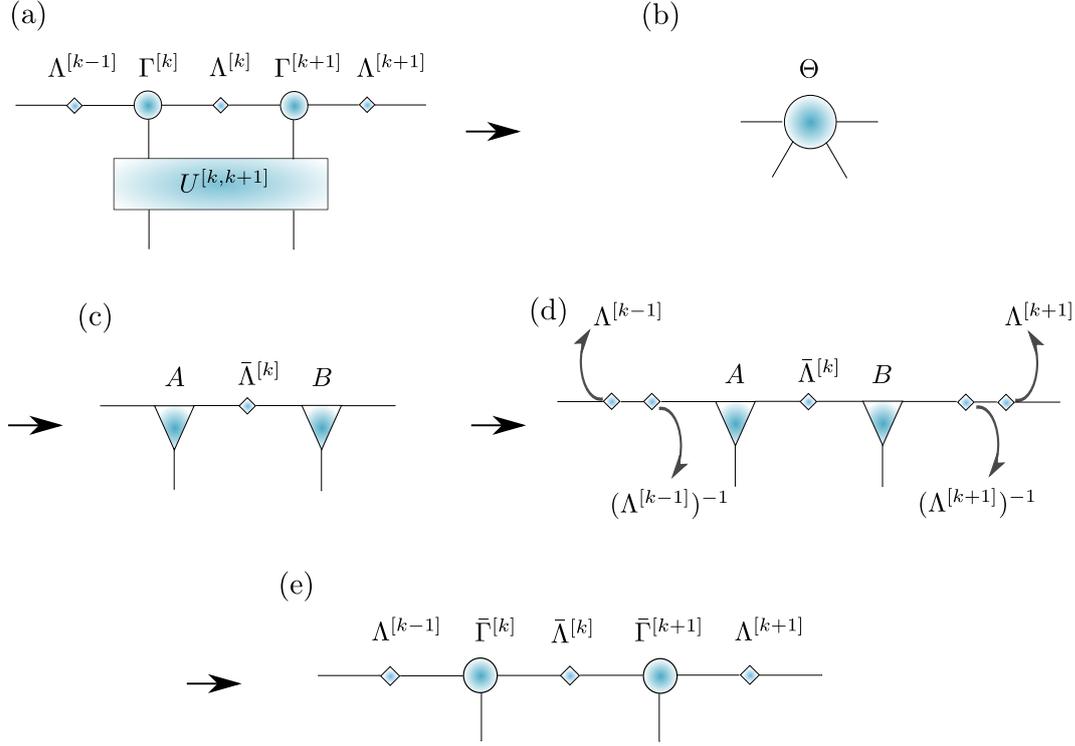
donde  $|\phi_{\alpha}^{[k-1]}\rangle$  son estados de los primeros  $k - 1$  sitios y  $|\varphi_{\beta}^{[k+2]}\rangle$  son estados de los sitios desde el  $k + 2$  al  $N$ . Al aplicar el operador de dos sitios  $O^{[k,k+1]}$  tenemos:

$$O^{[k,k+1]} |\psi\rangle = \Theta_{\alpha,\beta}^{i,j} |\phi_{\alpha}^{[k-1]}, i, j, \varphi_{\beta}^{[k+2]}\rangle \tag{2.27}$$

donde hemos utilizado el tensor:

$$\Theta_{\alpha,\beta}^{i,j} = \Lambda_{\alpha,\alpha}^{[k-1]} \Gamma_{\alpha,\gamma}^{[k]i'} \Lambda_{\gamma,\gamma}^{[k+1]j'} \Gamma_{\gamma,\beta}^{[k+1]j} \Lambda_{\beta,\beta}^{[k+1]} O_{i',j',i,j}^{[k,k+1]}. \tag{2.28}$$

Aproximamos de manera óptima el estado dado en la ecuación (2.27) por un MPS con la misma dimensión que el vector original. Para ello, utilizamos un único índice  $x$  que recorre todos los posibles valores de la pareja de índices  $(\alpha, i)$ . Esto es  $x = 1, 2 \dots, m \times \chi$ , donde  $m$  es la dimensión del espacio de Hilbert de un sitio. De manera idéntica, utilizamos el subíndice  $y$  para todos los posibles valores de la pareja  $(\beta, j)$ ,  $y = 1, 2 \dots, m \times \chi$ . Expresando el tensor  $\Theta_{\alpha,\beta}^{i,j}$  con estos índices tendremos  $\Theta_{x,y}$ , que es una matriz. Aplicamos a ésta un SVD y obtenemos que  $\Theta = A \bar{\Lambda}^{[k]} B$ , donde las matrices  $A, B, \bar{\Lambda}^{[k]}$  son cuadradas de dimensión  $\chi \times m$ . La



**Figura 2.6:** Resumimos en 5 pasos como aplicar una puerta de dos sitios a un MPS de dimensión  $\chi$ . En primer lugar contraemos la red tensorial dada en (a) a un sólo tensor con cuatro índices  $\Theta_{\alpha,\beta}^{i,j}$ , que representamos en (b). El siguiente paso consiste en aplicar un SVD a la partición de los índices  $x = [\alpha, i]$  e  $y = [\beta, j]$ . Tanto  $x$  como  $y$  toman valores  $1 \dots \chi \times m$ , donde  $m$  es la dimensión del espacio de Hilbert de un sitio. Gracias al SVD obtenemos las matrices  $A$ ,  $B$  y  $\bar{\Lambda}^{[k]}$  que aparecen en (c). En (d) insertamos la identidad  $\Lambda^{[k-1]}(\Lambda^{[k-1]})^{-1}$  por la izquierda y  $(\Lambda^{[k+1]})^{-1}\Lambda^{[k+1]}$  por la derecha. Finalmente, en (e) obtenemos el estado final utilizando las matrices  $\bar{\Gamma}^{[k]} = (\Lambda^{[k-1]})^{-1}A$  y  $\bar{\Gamma}^{[k+1]} = B(\Lambda^{[k+1]})^{-1}$ .

última de estas matrices es diagonal y cumple  $\text{tr}(\bar{\Lambda}^{[k]}) = 1$ . El resultado del SVD utilizando los índices originales para  $\Theta$  es:

$$\Theta_{\alpha,\beta}^{i,j} = \sum_{\gamma=1}^{\chi \times m} A_{\alpha,\gamma}^i \bar{\Lambda}_{\gamma,\gamma}^{[k]} B_{\gamma,\beta}^j. \quad (2.29)$$

donde hemos hecho explícito el sumatorio en el índice griego que toma valores

## 2.7 Evolución en el tiempo con un método de diezmado infinito (iTEBD) 71

$1, 2 \dots \chi \times m$  pues no cumple nuestra regla general. Recordamos que esta regla general consiste en aplicar el convenio de la suma sobre índices repetidos de Einstein de forma que: los índices representados con letras griegas se suman de 1 a  $\chi$ , mientras que los que vienen en letras latinas de 1 a  $m$ . Así, podemos expresar el resultado de aplicar el operador de dos sitios al estado inicial como:

$$O^{[k,k+1]}|\psi\rangle = \sum_{\gamma=1}^{\chi \times m} A_{\alpha,\gamma}^i \bar{\Lambda}_{\gamma,\gamma}^{[k]} B_{\gamma,\beta}^j |\phi_{\alpha}^{[k-1]}, i, j, \varphi_{\beta}^{[k+2]}\rangle. \quad (2.30)$$

respectivamente. Aproximamos el estado anterior por un MPS de dimensión  $\chi$ . La forma óptima de hacer esto es descartar los vectores de Schmidt con menor coeficiente de Schmidt. Suponemos que los coeficientes  $\Lambda_{\alpha,\alpha}$  está ordenados de mayor a menor conforme el subíndice  $\alpha$  aumenta. En este caso, aproximamos el estado  $O^{[k,k+1]}|\psi\rangle$  por un MPS de dimensión  $\chi$  como:

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{\gamma=1}^{\chi} A_{\alpha,\gamma}^i \bar{\Lambda}_{\gamma,\gamma}^{[k]} B_{\gamma,\beta}^j |\phi_{\alpha}^{[k-1]}, i, j, \varphi_{\beta}^{[k+2]}\rangle. \quad (2.31)$$

En este paso es donde se suele cometer el mayor error numérico de todo el algoritmo iTEBD. Para cuantificarlo podemos utilizar la fidelidad del estado sin truncar y truncado:

$$1 - \langle \bar{\psi} | \psi \rangle = \sum_{\gamma=\chi+1}^{\chi \times m} (\bar{\Lambda}_{\gamma}^{[k]}). \quad (2.32)$$

El estado  $|\bar{\psi}\rangle$  puede no tener norma unidad debido al truncamiento, lo que debe ser tenido en cuenta al implementar el algoritmo numérico.

Operamos para que el estado final tenga la misma forma que el inicial. Para ello, tomamos matrices:

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}^{[k]i} &= (\Lambda^{[k-1]})^{-1} A^i, \\ \bar{\Gamma}^{[k+1]i} &= B^i (\Lambda^{[k+1]})^{-1}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

De esta forma, obtenemos un estado final:

$$|\bar{\psi}\rangle = \Lambda_{\alpha}^{[k-1]} \bar{\Gamma}_{\alpha,\gamma}^{[k-1]i} \bar{\Lambda}_{\gamma}^{[k]} \bar{\Gamma}_{\gamma,\beta}^{[k+1]i} \Lambda_{\beta}^{[k+2]} |\phi_{\alpha}^{[k-1]}, i, j, \varphi_{\beta}^{[k+2]}\rangle, \quad (2.34)$$

donde sólo hemos alterado las matrices correspondientes a los sitios  $k$  y  $k + 1$ . Representamos todo este proceso en la figura 2.6.

### 2.7.2. Implementación

Como hemos asumido que trabajamos con un hamiltoniano con simetría translacional, podemos restringir la minimización o la evolución en el tiempo a estados invariantes bajo translaciones. Aún así, el algoritmo iTEBD no trabaja con un MPS completamente invariantes bajo translaciones, como el de la ecuación (2.14). Para implementar iTEBD, rompemos parcialmente la simetría y utilizamos un MPS que es invariante sólo bajo translaciones de longitud  $2na$ , donde  $n$  es un número entero y  $a$  es el espaciado de la red. Escogemos las matrices del MPS tales que:

$$\begin{aligned}\Gamma^{[2k]} &= \Gamma^{[A]} & \Lambda^{[2k]} &= \Lambda^{[A]}, \\ \Gamma^{[2k+1]} &= \Gamma^{[B]} & \Lambda^{[2k+1]} &= \Lambda^{[B]}.\end{aligned}\quad (2.35)$$

Esto implica que el estado es una repetición infinita de una celda unidad de dos sitios:

$$|\psi\rangle = \dots \Gamma^{[A]i_k} \Lambda^{[A]} \Gamma^{[B]i_{k+1}} \Lambda^{[B]} \dots | \dots i_k, i_{k+1}, \dots \rangle. \quad (2.36)$$

Como se indica en la ecuación (2.23), la evolución en el tiempo se puede aproximar aplicando repetidamente las puertas  $e^{-iF\delta t}$  y  $e^{-iG\delta t}$ . En el límite termodinámico, cada uno de estos operadores conserva la invarianza translacional. En este caso, basta con evolucionar los tensores  $\Gamma^{[A]}$ ,  $\Gamma^{[B]}$ ,  $\Lambda^{[A]}$  y  $\Lambda^{[B]}$ , correspondientes a la celda unidad. Para evolucionar estas matrices consideramos el operador:

$$U_2(\delta t) = e^{-ih^{[k,k+1]}\delta t}, \quad (2.37)$$

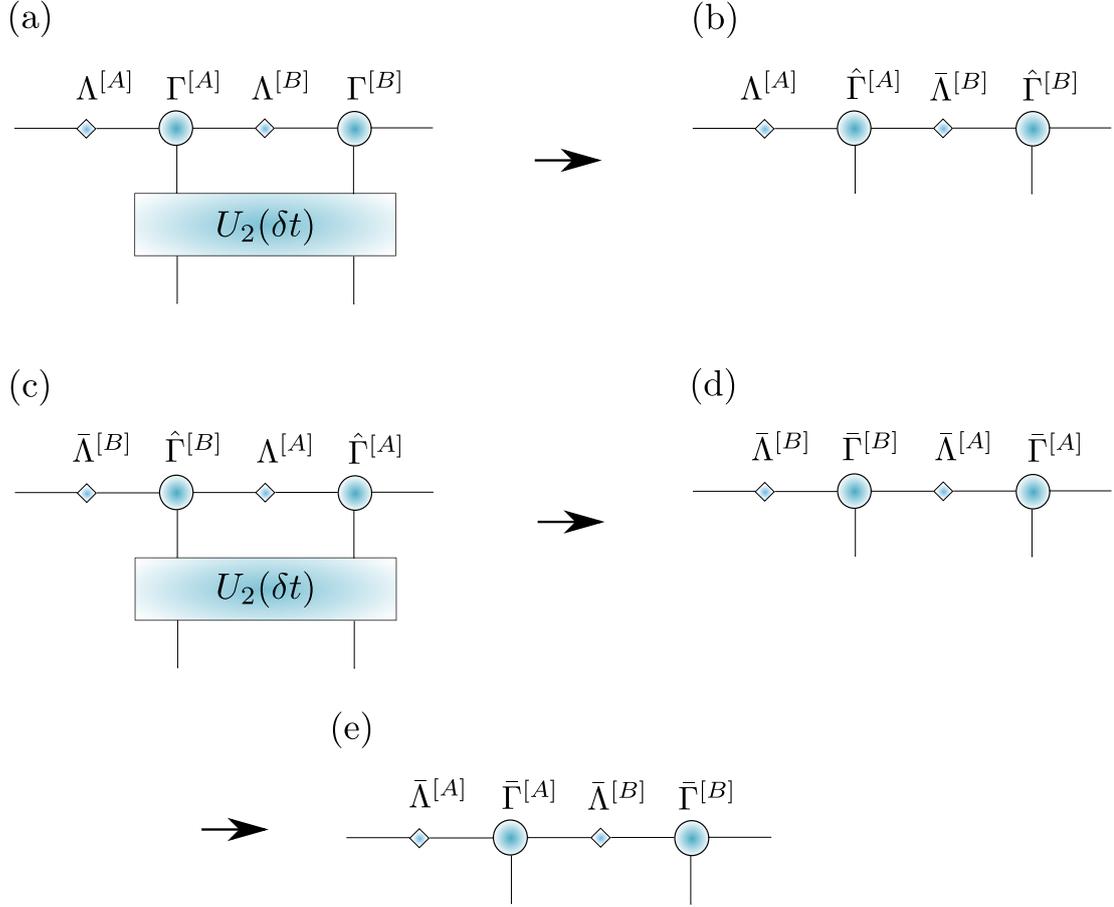
donde  $k$  puede ser cualquier sitio de la red debido a la invarianza translacional del hamiltoniano.

La evolución un tiempo  $\delta t$  del estado que aparece en la ecuación (2.36) puede ser llevada a cabo en los 5 pasos que ilustramos en la figura 2.7 y que explicamos a continuación:

(a) Consideramos un estado con celda unidad de dos sitios dada por las matrices:

$$\Lambda^{[A]} \Gamma^{[A]} \Lambda^{[B]} \Gamma^{[B]}. \quad (2.38)$$

## 2.7 Evolución en el tiempo con un método de diezmado infinito (iTEBD) 73



**Figura 2.7:** Esquema de un paso del algoritmo iTEBD en el que se evoluciona el estado un tiempo  $\delta t$ .

Aplicamos el operador de dos sitios  $U_2(\delta t)$  según la explicación que dimos en el aparatado anterior.

(b) El resultado proporciona una celda unidad que viene dada por las matrices:

$$\Lambda^{[A]} \hat{\Gamma}^{[A]} \bar{\Lambda}^{[B]} \hat{\Gamma}^{[B]}, \quad (2.39)$$

con nuevas matrices  $\hat{\Gamma}^{[A]}, \bar{\Lambda}^{[B]}, \hat{\Gamma}^{[B]}$ .

(c) Rotamos las matrices para obtener una celda unidad:

$$\bar{\Lambda}^{[B]} \hat{\Gamma}^{[B]} \Lambda^{[A]} \hat{\Gamma}^{[A]}. \quad (2.40)$$

Aplicamos de nuevo el operador  $U_2(\delta t)$ .

(d) El resultado del punto anterior es un estado con celda unidad descrita por:

$$\bar{\Lambda}^{[B]}\bar{\Gamma}^{[B]}\bar{\Lambda}^{[A]}\bar{\Gamma}^{[A]}. \quad (2.41)$$

donde las matrices  $\bar{\Gamma}^{[B]}$ ,  $\bar{\Lambda}^{[A]}$  y  $\bar{\Gamma}^{[A]}$  han sido actualizadas.

(e) Rotamos de nuevo las matrices para expresar el estado final de manera idéntica al estado inicial:

$$\bar{\Lambda}^{[A]}\bar{\Gamma}^{[A]}\bar{\Lambda}^{[B]}\bar{\Gamma}^{[B]}. \quad (2.42)$$

Finalmente, hemos acabado con un MPS con la misma forma que el inicial y donde todas las matrices de la celda unidad han sido actualizadas.

En principio, el método iTEBD no tiene por qué proporcionar un estado fundamental en forma canónica. Sin embargo, Orús y Vidal (2008) afirman que el estado final es, en muy buena aproximación, canónico si se elige cuidadosamente un  $\delta t$  cada vez más pequeño en la evolución. Hemos de notar que un MPS canónico es muy útil a la hora de calcular correlaciones entre dos puntos arbitrarios.

# Gap de Coulomb cuántico

En el primer capítulo analizamos el gap de Coulomb que aparece en la DDE de un sistema electrónico desordenado y con interacciones de largo alcance cuando las cargas están completamente localizadas. El régimen completamente localizado se caracteriza por un *hopping* nulo,  $t = 0$ . En este caso, el sistema puede ser estudiado dentro del marco de la física clásica. En el presente capítulo exploramos los cambios en el gap de Coulomb producidos por efectos cuánticos débiles, es decir, cuando consideramos un *hopping* pequeño, pero no nulo.

En lo que sigue examinamos sistemas 2D, pero también analizaremos el caso 1D con interacciones que decaen con la distancia como  $1/r^{1/2}$ . Este tipo de interacciones para el caso clásico, produce un gap lineal en sistemas 1D igual que el caso Coulombiano en sistemas 2D. Un gap lineal es más fácil de analizar que el logarítmico producido por interacciones de Coulomb en sistemas 1D. Además, veremos como nuestros resultados en una dimensión muestran la misma tendencia que los encontrados por Jeon *et al.* (1999) para interacciones de Coulomb.

Utilizamos dos métodos alternativos para calcular la DDE. En el primero empleamos diagonalización exacta con las subrutinas ARPACK para obtener la DDE a energías cercanas a la de Fermi. El segundo método que presentamos está basado en teoría de perturbaciones y nos permitirá calcular la DDE al menor orden en el *hopping*  $t$  para tamaños mucho mayores que los que tratamos mediante diagonalización exacta.

El esquema de este capítulo es el siguiente. En la primera sección, vamos a analizar como describir la DDE de sistemas interactuantes en presencia de efectos cuánticos y examinamos la bibliografía previa relevante. Además, introducimos el

modelo utilizado a lo largo de todo el capítulo. En la sección 3.2 empleamos diagonalización exacta con las subrutinas ARPACK para obtener la DDE en presencia de efectos cuánticos. En la sección 3.3 presentamos el método basado en teoría de perturbaciones. En la siguiente sección mostramos los resultados obtenidos con este método. Finalmente, en la sección 3.5 analizamos los resultados y extraemos algunas conclusiones importantes.

### 3.1. Efectos cuánticos en el gap de Coulomb

En el caso clásico,  $t = 0$ , el hamiltoniano es diagonal en la base localizada. Al añadir una partícula o hueco al estado fundamental en cualquier sitio, obtenemos un autoestado con energía bien definida. Así que podemos definir una energía en cada sitio como la diferencia entre la autoenergía del estado con una partícula añadida (eliminada) en el sitio en cuestión y la energía del estado fundamental. La distribución de probabilidad de estas energías de sitio en función de la energía es la DDE. En general, el estado con una partícula o hueco añadido al estado fundamental en un sitio concreto no es autoestado del hamiltoniano cuando  $t \neq 0$ , lo que hace imposible obtener la DDE de la misma manera que en el caso clásico.

Para calcular el gap de Coulomb con efectos cuánticos utilizamos la definición usual de DDE para una partícula en sistemas interactuantes. Ésta es proporcional a la parte imaginaria de la traza de la función de Green retardada  $G^R(\epsilon)$  (Jeon *et al.*, 1999; Epperlein *et al.*, 1998):

$$\rho(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left( \text{tr} G^R(\epsilon) \right). \quad (3.1)$$

Utilizamos la DDE local para simplificar esta expresión. La contribución de la partícula a la DDE local,  $\rho_i^p(\epsilon)$ , y la contribución del hueco,  $\rho_i^h(\epsilon)$ , en el sitio  $i$  son:

$$\rho_i^p(\epsilon) = \sum_{\alpha} \delta(\epsilon - E_{\alpha}^p + E_0) \left| \langle \psi_{\alpha}^p | c_i^{\dagger} | \psi_0 \rangle \right|^2, \quad (3.2)$$

$$\rho_i^h(\epsilon) = \sum_{\beta} \delta(\epsilon + E_{\beta}^h - E_0) \left| \langle \psi_{\beta}^h | c_i | \psi_0 \rangle \right|^2, \quad (3.3)$$

donde  $E_0$  y  $|\psi_0\rangle$  son la energía y el estado fundamental en el conjunto gran canónico, respectivamente. Un autoestado  $\alpha$  con un electrón añadido al estado fundamental se denota como  $|\psi_\alpha^p\rangle$  y su energía como  $E_\alpha^p$ . Para un autoestado  $\beta$  con un hueco añadido usamos  $|\psi_\beta^h\rangle$  y para su energía  $E_\beta^h$ . Según nuestra definición, la energía para introducir una partícula es positiva mientras que insertar un hueco ocurre a energía negativa. Expresamos la DDE como:

$$\rho(\epsilon) = \langle \rho_i^p(\epsilon) + \rho_i^h(\epsilon) \rangle, \quad (3.4)$$

donde los corchetes significan promedio para diferentes realizaciones y sitios  $i$ . En el límite  $t \rightarrow 0$ , el sumatorio en las ecuaciones (3.2) y (3.3) sólo contiene un término distinto de cero pues los autoestados contienen ocupaciones bien definidas. En este caso, la definición anterior se reduce a la estadística de energías de sitio clásicas.

### 3.1.1. Trabajos previos

Los métodos analíticos para tratar el gap de Coulomb en el régimen cuántico son casi inexistentes dada la complejidad del problema. Por ello, la mayoría de los resultados previos han sido obtenidos mediante métodos numéricos. Estos tampoco están exentos de problemas. Debido a la interacción hay un crecimiento exponencial del espacio de estados con el tamaño del sistema. Además, la interacción de largo alcance obliga a tener que considerar sistemas grandes para obtener información del gap en regiones próximas a la energía de Fermi. Estas dificultades son las responsables de que no se hayan clarificado los efectos cuánticos en el gap de Coulomb, a pesar de que este problema ha sido tratado desde, al menos, finales de los años 80.

Epperlein *et al.* (1997) propusieron un argumento intuitivo para describir los cambios del gap de Coulomb debidos a los efectos cuánticos. En el caso clásico, la restricción a la DDE cerca del nivel de Fermi es debida a las interacciones de largo alcance. Si los efectos cuánticos sólo conllevan un incremento de la longitud de localización de los electrones en el sistema, la naturaleza de estas interacciones ha de permanecer la misma a escalas mucho mayores que la longitud de localización y en consecuencia, a energías mayores que la inversa de  $\xi$  (en unidades de  $e^2$ ). Uno

podría concluir entonces que la DDE suficientemente cerca del nivel de Fermi no ha de cambiar. Este argumento parece ser compatible con algunos de los resultados de conductividad por efecto túnel (Lee *et al.*, 1999), aunque la relación entre la DDE y la conductividad por efecto túnel no está del todo clara. Hacemos notar que este argumento no depende de la dimensionalidad del sistema.

El primer esfuerzo por incluir efectos cuánticos en el gap de Coulomb fue llevado a cabo por Vignale *et al.* (1986). Ellos calcularon la DDE para electrones no interactuantes pero utilizando una distribución de potenciales de sitio dada por el gap de Coulomb clásico en vez de aleatoria. De los resultados se concluye que el gap de Coulomb es inestable bajo la inclusión de efectos cuánticos arbitrariamente pequeños en sistemas 2D. En el caso 3D, se encuentra que el gap se estrecha y aparece una DDE distinta de cero a la energía de Fermi debido a los efectos cuánticos. En un trabajo posterior, Vignale (1987) implementó Hartree-Fock obteniendo que el gap se estrecha en sistemas 2D y 3D. Utilizando la aproximación de potencial coherente, Li y Phillips (1993) afirmaron que el gap se estrecha al incluir efectos cuánticos en los casos 2D y 3D. A la energía de Fermi, la DDE permanece despreciable. Epperlein *et al.* (1997) usaron el método de Hartree-Fock estándar para analizar sistemas 3D. Sus conclusiones son que los efectos cuánticos estrechan el gap clásico pero que la DDE a la energía de Fermi continua siendo cero. La DDE en sistemas 3D tiene correcciones logarítmicas en la fase extendida (Altshuler y Aronov, 1979). Por ello, parece natural que la tendencia sea el estrechamiento del gap al aumentar el *hopping* en sistemas 3D. Jeon *et al.* (1999) aplicaron el mismo método Hartree-Fock y encontraron que el gap se ensancha al incluir un *hopping* suficientemente pequeño en sistemas 1D y 2D. Notamos la falta de acuerdo sobre si los efectos cuánticos débiles abren o cierran el gap y si producen una DDE finita a la energía de Fermi. Tampoco está claro si las correcciones cuánticas dependen de la dimensionalidad o no.

El grupo de Schreiber (1998; 2001) también desarrolló un método al que se refieren como diagonalización basada en Hartree-Fock. Este es equivalente a lo que en química cuántica se conoce como el método de *configuration interaction* pero adap-

tado a redes desordenadas. Para implementar este algoritmo, un conjunto reducido de determinantes de Slater se construye utilizando los estados de una partícula obtenidos mediante Hartree-Fock. A continuación, se procede a la diagonalización del hamiltoniano en el subespacio generado por este conjunto de vectores. La selección de los estados de una partícula se hace de acuerdo con su energía. Berkovits (2003) argumenta que la precisión del método puede ser mejorada eligiendo los estado de muchas partículas según el número de excitaciones partícula-hueco respecto al estado de mínima energía. Con ninguno de estos métodos se ha calculado la DDE. Esto puede ser debido a que incluir todos los estados de varias partículas relevantes hasta las energías típicas del gap de Coulomb es muy complicado.

### 3.1.2. Modelo

Estudiamos la DDE, dada por la ecuación (3.4), para sistemas compuestos por electrones interactuantes en redes desordenadas. En concreto, empleamos un modelo de fermiones sin espín en una red regular con interacciones de largo alcance en sistemas 1D y 2D. Consideramos el hamiltoniano:

$$H = \sum_i (\phi_i - \mu) n_i + V \sum_i \sum_{j>i} \frac{(n_i - K)(n_j - K)}{r_{i,j}^\alpha} - t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (3.5)$$

donde  $\alpha = 1/2$  cuando la dimensión  $d = 1$  y  $\alpha = 1$  para  $d = 2$ . Tomamos la amplitud de la distribución uniforme de energías de sitio como  $W = 2$ . Asumimos  $V = 1$ , lo que fija la escala de energías. Utilizamos condiciones de contorno periódicas en todas las direcciones. La distancia de dos sitios  $i$  y  $j$  viene dada por la distancia mínima entre el sitio  $i$  y cualquiera de las repeticiones periódicas de  $j$ . En todo este capítulo utilizamos el conjunto gran canónico. La gran mayoría de los resultados se han obtenido para  $\mu = 0$  lo que favorece que el estado fundamental ocurra a ocupación un medio, es decir, con un número de electrones igual a la mitad de los sitios. Para asegurar la neutralidad de carga en este caso, hemos establecido la constante de compensación  $K = 1/2$ .

## 3.2. Diagonalización exacta

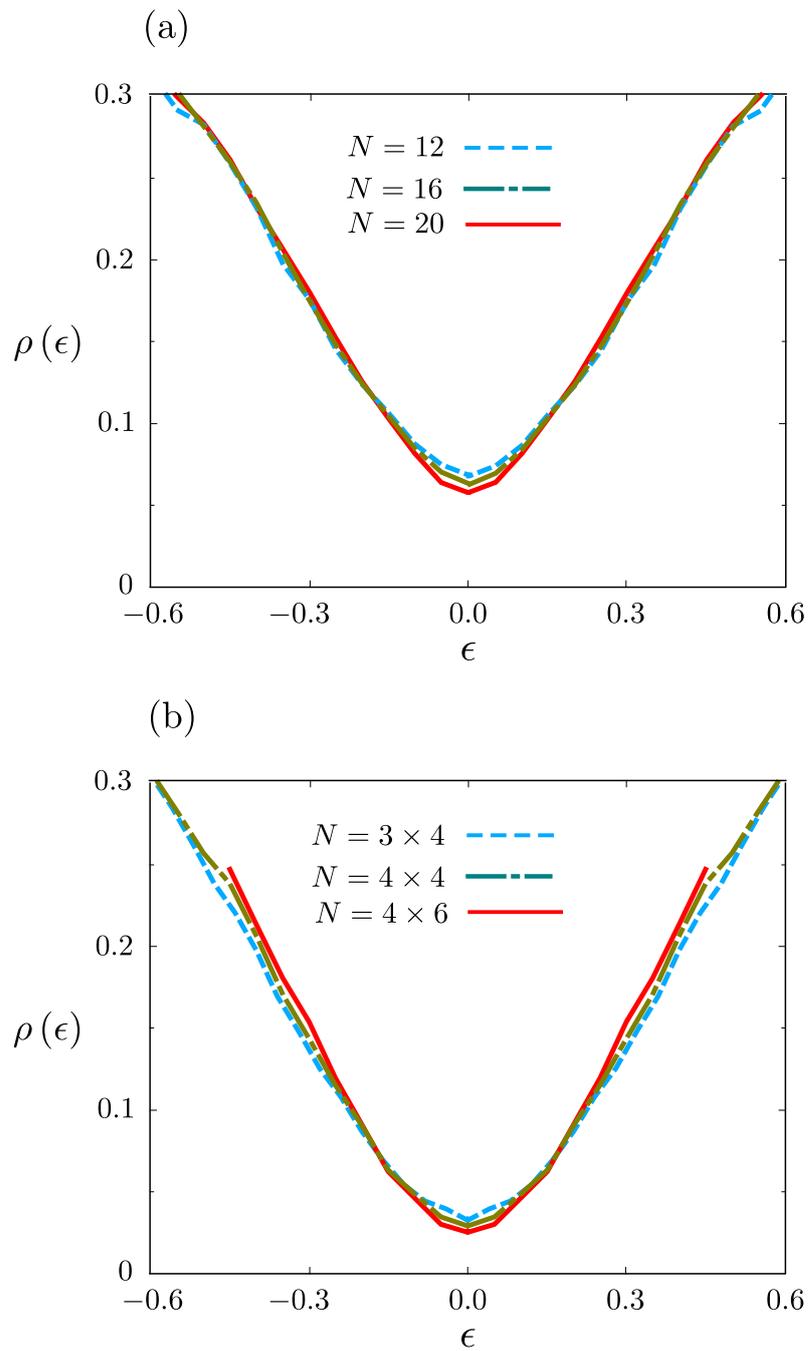
Empezamos analizando los efectos cuánticos en la DDE mediante diagonalización exacta. En el caso 1D hemos calculado tamaños de hasta  $N = 20$ , mientras que en sistemas 2D las mayores tamaños corresponden a  $N = 6 \times 4$ .

Calculamos la DDE local que aparece en las ecuaciones (3.2) y (3.3). En primer lugar, determinamos el estado fundamental en el conjunto gran canónico. Para ello, calculamos el estado de menor energía, mediante las librerías ARPACK, para los problemas con un número de electrones desde  $N/2 - 2$  a  $N/2 + 2$ . De estos estados escogemos el estado fundamental como el de mínima energía total y denotamos su número de electrones como  $N_e$ . Notamos que el estado fundamental real puede contener una ocupación distinta a los casos que calculamos. Esto ocurre muy pocas veces y el error asociado es muy pequeño. En principio, hay que obtener todos los autoestados y autoenergías con  $N_e \pm 1$  electrones para calcular las ecuaciones (3.2) y (3.3). Tal y como explicamos en el capítulo 2, relativo a métodos numéricos, utilizamos las ARPACK para realizar una diagonalización parcial de los hamiltonianos con  $N_e \pm 1$  electrones. Esto permite el cálculo de la DDE para energías cercanas a la de Fermi utilizando mayores tamaños que los que serían posibles mediante una diagonalización completa.

### 3.2.1. Efectos de tamaño finito

El gap de Coulomb clásico en un sistema finito exhibe un relleno en la energía de Fermi. De hecho, al tratar sistemas con tamaño lineal  $L = N^{-1/d}$ , la distancia máxima entre dos sitios es proporcional a  $L$  y la interacción no será de largo alcance. Truncar la interacción produce un relleno en la DDE al nivel de Fermi que depende del tamaño según  $\rho(0) \sim 1/L$  (Baranovskii *et al.*, 1979).

Es razonable que los efectos de tamaño finito cuando el *hopping* es pequeño sean similares a los del caso clásico. En concreto, esperamos que la DDE se rellene a energías cercanas al nivel de Fermi para tamaños finitos, aunque no está claro cómo depende este relleno del tamaño. En la figura 3.1 mostramos la DDE calculada



**Figura 3.1:** DDE en función de la energía para sistemas 1D (a) y 2D (b). El *hopping* es  $t = 0.2$  y el tamaño que corresponde a cada línea se especifica en la leyenda.

para sistemas 1D (a) y 2D (b) de diferentes tamaños y a *hopping*  $t = 0.2$ . En ambos casos comprobamos que al aumentar el tamaño la DDE en el nivel de Fermi decrece confirmando así una situación similar a la del caso clásico. Por otro lado, los efectos de tamaño finito no son tan importantes en una zona intermedia del gap donde  $\rho(\epsilon)$  parece coincidir para todos los tamaños. Esta región intermedia es mayor en sistemas 1D que en 2D.

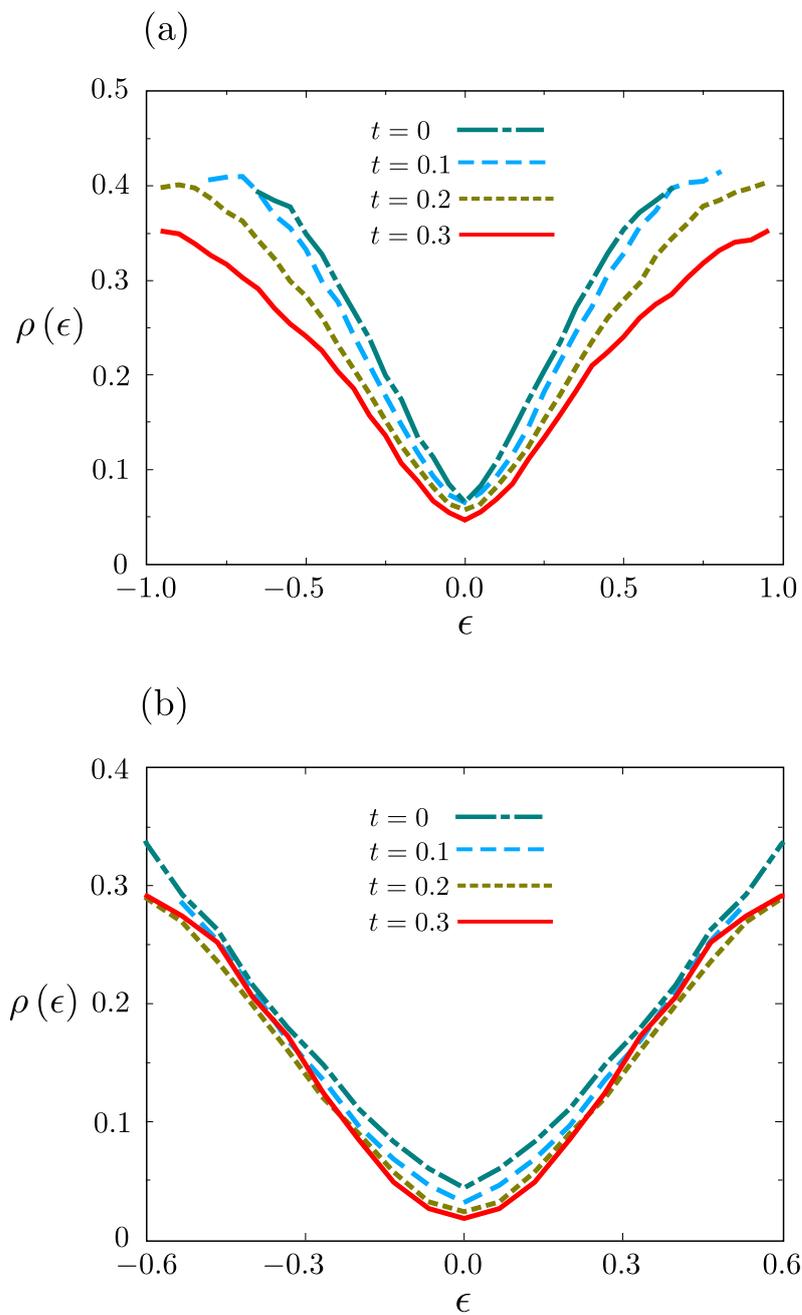
### 3.2.2. Resultados

A continuación estudiamos la dependencia de la DDE con la energía. En el panel (a) de la figura 3.2 podemos ver  $\rho(\epsilon)$  para varios valores del *hopping* en sistemas 1D de tamaño  $N = 20$ . De arriba a abajo las líneas corresponden a  $t = 0, 0.1, 0.2, 0.3$ , respectivamente. Nuestros resultados indican que el gap se abre monótonamente cuando el hopping se incrementa hasta  $t = 0.3$ . Esto es, los efectos cuánticos producen un ensanchamiento del gap para sistemas 1D.

En el panel (b) de la figura 3.2 representamos la DDE para sistemas 2D de tamaño  $N = 4 \times 5$ . Los casos considerados corresponden a  $t = 0, 0.1, 0.2, 0.3$ , como especificamos en la leyenda. El gap se ensancha cuando incluimos efectos cuánticos hasta que el *hopping* vale  $t = 0.2$ . Este resultado es similar al encontrado en sistemas 1D pero los cambios respecto al caso clásico parecen ser menores. Al incrementar el *hopping* a  $t = 0.3$ , la tendencia es la contraria y el gap se estrecha respecto al caso  $t = 0.2$ , al menos en una zona intermedia de energías en cada rama del gap.

En resumen, los cálculos exactos de tamaños pequeños son útiles para analizar el comportamiento del gap de Coulomb para un rango de energías intermedio en el mismo. En esta región hemos obtenido que el gap se ensancha tanto para sistemas 1D como para 2D al aumentar el *hopping* desde  $t = 0$ . En el segundo caso, este efecto es menor y la tendencia se invierte para  $t = 0.3$ .

A continuación vamos a desarrollar un método con el que podemos obtener la DDE para tamaños mucho mayores. Ello nos permitirá encontrar la DDE para un rango de energías mayores que con diagonalización exacta.



**Figura 3.2:** DDE en función de la energía obtenida mediante diagonalización del hamiltoniano para sistemas 1D (a) de tamaño  $N = 20$  y sistemas 2D (b) de tamaño  $N = 4 \times 5$ . El valor del *hopping* para cada línea se indica en la leyenda.

### 3.3. Teoría de perturbaciones en el espacio de configuraciones

Desarrollamos una nueva aproximación en la que incluimos el término de *hopping* como una perturbación. En general, estas aproximaciones son difíciles de aplicar a la clase de sistemas con interacción de largo alcance que estamos tratando. Una perturbación en el *hopping* entre dos sitios dados puede afectar a partículas que están arbitrariamente lejos debido a la interacción. En consecuencia, la teoría de perturbaciones ha de realizarse en el espacio completo de configuraciones. Este espacio crece exponencialmente con el tamaño y el número de términos en la teoría de perturbaciones diverge. Para minimizar este problema hemos identificado los términos más importantes para cada uno de los distintos elementos de *hopping* entre vecinos cercanos.

Estamos interesados en calcular la DDE cuando el parámetro de *hopping* es pequeño pero no nulo. Para ello, introducimos el operador  $\Delta H$  como perturbación del hamiltoniano clásico

$$\Delta H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i). \quad (3.6)$$

Calculamos las correcciones de menor orden en la DDE para las partículas y los huecos. Presentamos los cálculos detallados correspondientes a la DDE para las partículas  $\rho_i^p(\epsilon)$  dada en la ecuación (3.2). El desarrollo para los huecos es análogo.

Utilizando la teoría usual de perturbaciones, la corrección a la energía y al estado  $k$ -ésimo son:

$$E_k(t) = E_k^{(0)} + tE_k^{(1)} + t^2E_k^{(2)} + O(t^3), \quad (3.7)$$

$$|\psi_k(t)\rangle = |\psi_k^{(0)}\rangle + t|\psi_k^{(1)}\rangle + t^2|\psi_k^{(2)}\rangle + O(t^3), \quad (3.8)$$

La DDE para las partículas  $\rho_i^p$  es una distribución y como tal tiene derivadas a todos los ordenes bien definidas. De manera similar a las energías o autovectores, podemos desarrollar:

$$\rho_i^p(t) = \rho_i^p(0) + t \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \rho_i^p(t) + \frac{t^2}{2} \left. \frac{d^2}{dt^2} \right|_{t=0} \rho_i^p(t) + O(t^3) \quad (3.9)$$

La corrección de menor orden depende de las correcciones a las energías y a los elementos de matriz que aparecen en la ecuación (3.2). Debido a que se tiene  $\langle \psi_\alpha^{(0)} | \Delta H_r | \psi_\alpha^{(0)} \rangle = 0$ , la primera corrección a las energías es la de segundo orden. Para los elementos de matriz tenemos:

$$\begin{aligned} \left| \langle \psi_\alpha(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle \right|^2 = & 2 t \langle \psi_\alpha^{(0)} | c_i^\dagger | \psi_0^{(0)} \rangle \left| \langle \psi_\alpha^{(1)} | c_i^\dagger | \psi_0^{(0)} \rangle + \langle \psi_\alpha^{(0)} | c_i^\dagger | \psi_0^{(1)} \rangle \right| \\ & + \left| \langle \psi_\alpha^{(0)} | c_i^\dagger | \psi_0^{(0)} \rangle \right|^2 + O(t^2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Hemos de notar que sí  $\langle \psi_\alpha^{(0)} | c_i^\dagger | \psi_0^{(0)} \rangle \neq 0$  se ha de cumplir que:

$$\langle \psi_\alpha^{(1)} | c_i^\dagger | \psi_0^{(0)} \rangle = \langle \psi_\alpha^{(0)} | c_i^\dagger | \psi_0^{(1)} \rangle = 0. \quad (3.11)$$

Esto implica que el orden lineal se anula en la ecuación (3.10). Así, las correcciones de menor orden a las energías y al elemento de matriz que aparecen en la ecuación (3.2) son las de segundo orden.

Utilizamos la notación  $[\rho_i^p(t)](\epsilon)$  para referirnos a la DDE para las partículas correspondiente a un valor de *hopping*  $t$  en función de la energía  $\epsilon$ . Para el orden cuadrático:

$$\begin{aligned} [\rho_i^p(t)](\epsilon) = & [\rho_i^p(0)](\epsilon) \\ & - t^2 \sum_\alpha \delta'(\epsilon - E_\alpha^{(0)} + E_0^{(0)}) (E_\alpha^{(2)} - E_0^{(2)}) A_\alpha^i(0) \\ & + t^2 \sum_\alpha \delta(\epsilon - E_\alpha^{(0)} + E_0^{(0)}) \left. \frac{d^2}{dt^2} \right|_{t=0} A_\alpha^i(t) \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde:

$$A_\alpha^i(t) = \left| \langle \psi_\alpha^p(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle \right|^2 \quad (3.13)$$

son los elementos de matriz que aparecen en la ecuación (3.2) y  $\delta'$  denota la derivada de la función delta de Dirac.

La derivada de la delta de Dirac que aparece en la ecuación (3.12) complica el análisis numérico. Aproximamos esta derivada por un incremento finito

$$\begin{aligned} -\delta'(\epsilon - E_\alpha^{(0)} + E_{gs}^{(0)}) (E_\alpha^{(2)} - E_{gs}^{(2)}) t^2 \cong & \delta(\epsilon - E_\alpha(t) + E_{gs}(t)) \\ & - \delta(\epsilon - E_\alpha(0) + E_{gs}(0)). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Con esto, la densidad local de partículas al menor orden no nulo en el hopping es:

$$[\rho_i^p(t)](\epsilon) \cong \sum_{\alpha} \delta(\epsilon - E_{\alpha}(t) + E_{gs}(t)) \left| \langle \psi_{\alpha}^{(0)} | c_i^{\dagger} | \psi_{gs}^{(0)} \rangle \right|^2 + t^2 \sum_{\alpha} \delta(\epsilon - E_{\alpha}^{(0)} + E_0^{(0)}) \left. \frac{d^2}{dt^2} \right|_{t=0} A_{\alpha}^i(t) \quad (3.15)$$

Para simplificar la ecuación (3.15) hemos de analizar las correcciones de segundo orden a los elementos de matriz y a las energías. Al menor orden en  $t$ , las correcciones producidas por  $\Delta H$  son iguales a la suma de las correcciones de los operadores  $\Delta H_{j,k} = -t(c_j^{\dagger} c_k + hc.)$ , donde  $j$  y  $k$  son vecinos cercanos. Esto se debe a que un término que mezcla operadores de hopping entre pares de sitio diferentes contiene potencias de  $t$  mayores que el orden lineal. Esto a su vez, producirá correcciones de mayor orden que el cuadrático en la DDE.

Explicamos la notación que vamos a utilizar a continuación. Denotamos a los autovectores del hamiltoniano clásico con respecto a la ocupación relativa al estado fundamental clásico  $|\psi_0^{(0)}\rangle$ :

$$|\psi_{i_1, \dots, i_r}^{j_1, \dots, j_s(0)}\rangle = c_{i_1}^{\dagger} \dots c_{i_N}^{\dagger} c_{j_1} \dots c_{j_M} |\psi_0^{(0)}\rangle, \quad (3.16)$$

donde los subíndices  $i_1, \dots, i_r$  corresponden a los sitios donde insertamos los electrones mientras que  $j_1 \dots j_s$  a los sitios donde los eliminamos. Los ordenes mayores en teoría de perturbaciones para cada uno de estos estados se especifican de igual manera con un súper índice entre paréntesis.

### 3.3.1. Correcciones a los elementos de matriz

A continuación, estudiamos los cambios producidos en los elementos de matriz  $A_{\alpha}^i$  debido al *hopping* entre dos sitios vecinos cercanos,  $j$  y  $k$ . Dividimos el análisis en dos casos. En el primero suponemos que insertamos la partícula en un sitio  $i$  diferente de  $j$  y de  $k$ . En el segundo caso, suponemos que  $j = i$ . Esto es, el elemento de *hopping* conecta el sitio donde insertamos la partícula con alguno de sus vecinos próximos.

$$\begin{array}{rcc}
& i & j & k & (3.17) \\
|\psi_0^{(0)}\rangle & \circ & \circ & \bullet \\
|\psi_i^{(0)}\rangle & \bullet & \circ & \bullet \\
|\psi_{i,j}^{k(0)}\rangle & \bullet & \bullet & \circ
\end{array}$$

**Figura 3.3:** Ocupación a  $t = 0$  de los estados  $|\psi_0^{(0)}\rangle$ ,  $|\psi_i^{(0)}\rangle$  y  $|\psi_{i,j}^{k(0)}\rangle$  en los sitios  $i$ ,  $j$ , y  $k$ . En los demás sitios, los tres estados tienen ocupaciones idénticas.

### Hopping entre sitios diferentes al sitio donde insertamos la partícula

Calculamos las correcciones al elemento de matriz  $A_\alpha^i$  debidas al *hopping* entre los sitios  $j$  y  $k$  cuando  $i$  no coincide con ninguno de ellos. Si la ocupación de los sitios  $j$  y  $k$  es la misma para el estado fundamental en ausencia de *hopping*,  $|\langle\psi_0^{(0)}|n_j|\psi_0^{(0)}\rangle| = |\langle\psi_0^{(0)}|n_k|\psi_0^{(0)}\rangle|$ , el elemento de matriz es nulo a segundo orden. Por ello consideramos el caso de ocupaciones diferentes. Sin pérdida de generalidad, suponemos que el sitio  $j$  está vacío y el  $k$  ocupado. Los elementos de matriz no nulos a segundo orden para la configuración que estamos tratando son los que implican a los estados  $|\psi_i^{j,k}\rangle$  y  $|\psi_i\rangle$ . En la figura 3.3 podemos ver la ocupación de los sitios  $i$ ,  $j$ ,  $k$  para cada uno de estos estados a  $t = 0$ . En este esquema sólo hemos especificado la ocupación de los sitios para los cuales los estados excitados  $|\psi_i^{j,k(0)}\rangle$  y  $|\psi_i^{(0)}\rangle$  difieren del estado fundamental.

A continuación damos las contribuciones para cada uno de los vectores que

aparecen en la figura 3.3 cuando  $t \neq 0$ :

$$\begin{aligned}
|\psi_0(t)\rangle &= |\psi_0^{(0)}\rangle - \frac{t}{\Delta E_j^k} |\psi_j^{k(0)}\rangle - \frac{t^2}{2(\Delta E_j^k)^2} |\psi_0^{(0)}\rangle, \\
|\psi_i(t)\rangle &= |\psi_i^{(0)}\rangle - \frac{t}{\Delta E_{i,j}^k - \Delta E_i} |\psi_{i,j}^{k(0)}\rangle - \frac{t^2}{2(\Delta E_{i,j}^k - \Delta E_i)^2} |\psi_i^{(0)}\rangle, \\
|\psi_{i,j}^k(t)\rangle &= |\psi_{i,j}^{k(0)}\rangle + \frac{t}{\Delta E_{i,j}^k - \Delta E_i} |\psi_i^{(0)}\rangle.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Los factores que aparecen en los denominadores de estas fórmulas son:

$$\begin{aligned}
\Delta E_j^k &= \epsilon_j - \epsilon_k - 1, \\
\Delta E_{i,j}^k - \Delta E_i &= \epsilon_k - \epsilon_j - 1 + \frac{1}{r_{i,j}} - \frac{1}{r_{i,k}},
\end{aligned} \tag{3.19}$$

donde  $\epsilon_j$  y  $\epsilon_k$  son las energías de sitio clásicas asociadas al estado fundamental para  $j$  y  $k$ , respectivamente. El símbolo  $r_{i,j}$  es la distancia entre los sitios  $i$  y  $j$ . Hemos asumido que tratamos el caso 2D y en consecuencia, las interacciones son Coulombianas. Para el caso 1D se procede de manera similar teniendo en cuenta que la interacción decae como  $r^{-1/2}$ . A partir de estas fórmulas, podemos obtener los elementos de matriz:

$$\begin{aligned}
|\langle \psi_i(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle|^2 &= 1 + \frac{t^2}{\Delta E_j^k (\Delta E_{i,j}^k - \Delta E_i)} - \frac{t^2}{2(\Delta E_j^k)^2} - \frac{t^2}{2(\Delta E_{i,j}^k - \Delta E_i)^2} \\
|\langle \psi_{i,j}^k(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle|^2 &= t^2 \left( \frac{1}{\Delta E_{i,j}^k - \Delta E_i} - \frac{1}{\Delta E_j^k} \right)^2.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Evaluamos las ecuaciones (3.20) cuando  $r_{i,j} \gg 1$ . Para ello utilizamos la aproximación:

$$\frac{1}{r_{i,j}} - \frac{1}{r_{i,k}} \approx \frac{1}{r_{i,j}^2} \tag{3.21}$$

Finalmente, obtenemos que:

$$\begin{aligned}
|\langle \psi_i(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle|^2 &\approx 1 + \frac{t^2}{r_{i,j}^4} \\
|\langle \psi_{i,j}^k(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle|^2 &\approx t^2 \frac{1}{r_{i,j}^4}.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\begin{array}{ccc}
& i & k \\
|\psi_0^{(0)}\rangle & \circ & \circ \\
|\psi_i^{(0)}\rangle & \bullet & \circ \\
|\psi_i^{k(0)}\rangle & \circ & \bullet
\end{array} \tag{3.23}$$

**Figura 3.4:** Ocupación a  $t = 0$  de los estados  $|\psi_0^{(0)}\rangle$ ,  $|\psi_i^{(0)}\rangle$  y  $|\psi_i^{k(0)}\rangle$  en los sitios  $i$  y  $k$ . En los demás sitios, los tres estados tienen ocupaciones idénticas.

Las correcciones de segundo orden al elemento de matriz debidas al *hopping* entre los vecinos cercanos  $j$  y  $k$  dependen de la distancia al sitio  $i$  donde se inserta la partícula como  $r_{i,j}^{-4}$ . Debido a este rápido decaimiento despreciamos todas estas contribuciones. Esto implica aproximar  $A_\alpha^i$  incluyendo solo contribuciones debidas al *hopping* entre  $i$  y sus primeros vecinos. A continuación, analizamos estos términos detenidamente.

### Hopping que conecta el sitio donde insertamos la partícula

Nos centramos en calcular las correcciones al elemento de matriz  $A_\alpha^i$  debidas al *hopping* entre  $i$  y uno de sus vecinos próximos  $k$ . Consideramos primero el caso en el que los sitios  $i$  y  $k$  no contienen ninguna partícula en la configuración del estado fundamental. En la figura 3.4 podemos ver la ocupación de estos sitios para los estados que contribuyen a la corrección cuando  $t = 0$ . Para cada uno de estos

vectores obtenemos:

$$\begin{aligned}
|\psi_0(t)\rangle &= |\psi_0^{(0)}\rangle \\
|\psi_i(t)\rangle &= |\psi_i^{(0)}\rangle + \frac{t}{\epsilon_i - \epsilon_k} |\psi_k^{(0)}\rangle - \frac{t^2}{2(\epsilon_i - \epsilon_k)^2} |\psi_i^{(0)}\rangle \\
|\psi_k(t)\rangle &= |\psi_k^{(0)}\rangle + \frac{t}{\epsilon_k - \epsilon_i} |\psi_i^{(0)}\rangle - \frac{t^2}{2(\epsilon_k - \epsilon_i)^2} |\psi_k^{(0)}\rangle,
\end{aligned} \tag{3.24}$$

donde  $\epsilon_i$  y  $\epsilon_k$  son las energías de sitio clásicas asociadas al estado fundamental para los sitios  $i$  y  $k$ , respectivamente. La derivada de los elementos de matriz es fácil de averiguar:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d^2}{dt^2} \right|_{t=0} \left| \langle \psi_i(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle \right|^2 &= -\frac{1}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2}, \\
\left. \frac{d^2}{dt^2} \right|_{t=0} \left| \langle \psi_k(t) | c_i^\dagger | \psi_0(t) \rangle \right|^2 &= \frac{1}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2}.
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Utilizando este resultado y despreciando las correcciones debidas al *hopping* entre sitios distintos a donde insertamos la partícula, obtenemos:

$$A_\alpha^i(t) = A_\alpha^i(0) + t^2 \sum_k C_\alpha^{i,k} + \mathcal{O}(t^3), \tag{3.26}$$

La suma en  $k$  se realiza sobre todos los vecinos próximos del sitio  $i$  y  $C_\alpha^{i,k}$  son constantes reales que cumplen  $C_\alpha^{i,k} = -C_\alpha^{k,i}$ . Gracias a esta propiedad, el segundo término de la parte derecha de la ecuación (3.15) se cancela cuando promediamos la DDE para la partícula sobre todos los sitios de la muestra. Esto implica que las correcciones a los elementos de matriz no contribuyen a la DDE en nuestra aproximación. La situación cuando la configuración del estado fundamental tiene ocupaciones opuestas en el sitio  $i$  y  $k$  es análoga y también da contribución nula a la DDE. La única contribución que hemos de tener en cuenta es la debida al cambio en las energías de los autoestados.

### 3.3.2. Correcciones a las energías

A continuación vamos a obtener las correcciones de segundo orden en las energías para los distintos términos de *hopping*. En el apartado anterior hemos visto que

despreciábamos el segundo término de la ecuación (3.15). El primer término sólo da contribución no nula para los niveles energéticos que contribuyen a la DDE para las partículas cuando  $t = 0$ . En consecuencia, basta calcular las correcciones a segundo orden de las energías de sitio clásicas. Éstas son:

$$\epsilon_i(t) = \begin{cases} E_i(t) - E_0(t) & \text{si } n_i = 0 \\ - [E^i(t) - E_0(t)] & \text{si } n_i = 1 \end{cases}. \quad (3.27)$$

Utilizando éstas energías, podemos simplificar aún más la ecuación (3.15) y expresar la DDE total en nuestra aproximación como:

$$\rho(\epsilon) = \langle \delta(\epsilon - \epsilon_i(t)) \rangle, \quad (3.28)$$

donde los corchetes denotan promedio para diferentes sitios y muestras. De esta forma, la DDE con correcciones cuánticas puede obtenerse de forma similar al caso clásico, pues cada sitio contribuye con una energía de sitio  $\epsilon_i(t)$  bien definida.

A continuación, calculamos las energías de sitio con correcciones cuánticas. Al igual que en el apartado anterior, dividimos el análisis en dos casos. En el primero tratamos correcciones debidas a términos de *hopping* entre sitios distintos al que incluimos la partícula. En el segundo, tratamos correcciones producidas por términos de *hopping* entre el sitio donde añadimos la partícula y sus vecinos próximos.

### Hopping entre sitios diferentes al sitio donde insertamos la partícula

Calculamos la corrección a la energía del estado con una partícula añadida en el sitio  $i$  respecto al estado fundamental. Consideramos un solo término de *hopping* entre los sitios vecinos cercanos  $j$  y  $k$ , cuando éstos son diferentes de  $i$ . Suponemos una configuración como la que se muestra en la figura 3.5. Eligiendo el origen de energías como la energía del estado fundamental clásico,  $E_0^{(0)} = 0$ , las energías a segundo orden son:

$$E_0(t) = -\frac{t^2}{\epsilon_j - \epsilon_k - 1}, \quad (3.30)$$

$$E_i(t) = \epsilon_i + \frac{t^2}{\epsilon_k - \epsilon_j - 1 + \frac{1}{r_{ij}} - \frac{1}{r_{ik}}}, \quad (3.31)$$

$$\begin{array}{cccc}
& i & & j & k & (3.29) \\
|\psi_0^{(0)}\rangle & \circ & & \circ & \bullet \\
|\psi_i^{(0)}\rangle & \bullet & & \circ & \bullet
\end{array}$$

**Figura 3.5:** Ocupación a  $t = 0$  de los estados  $|\psi_0^{(0)}\rangle$  y  $|\psi_i^{(0)}\rangle$  en los sitios  $i$ ,  $j$  y  $k$ . En los demás sitios, los dos estados tienen ocupaciones idénticas.

donde  $\epsilon_j$ ,  $\epsilon_k$  y  $\epsilon_i$  son las energías de sitio clásica para los sitios  $j, k$  e  $i$  en el estado fundamental, respectivamente. Hemos asumido que tratamos el caso 2D y en consecuencia, las interacciones son Coulombianas. Para el caso 1D se procede de manera similar teniendo en cuenta que la interacción decaen como  $1/r^{1/2}$ . Aproximamos esta expresión cuando la distancia  $r_{ij} \gg 1$ . En este caso:

$$\epsilon_i(t) - \epsilon_i = -t^2 \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{d}_{jk}}{r_{ij}^3 (\epsilon_j - \epsilon_k - 1)^2}. \quad (3.32)$$

El vector  $\vec{d}_{j,k}$  es el dipolo existente en el sitio  $j$  y  $k$  para la configuración del estado fundamental. Así, las contribuciones de segundo orden a las energías decaen como  $1/r_{ij}^2$ . Además, el promedio de la ecuación (3.32) para un número suficientemente grande de términos de *hopping* a igual distancia se anulará debido a que la dirección de  $\vec{d}_{j,k}$  es aleatoria (al menos en dimensión  $d > 1$ ).

De nuevo, sólo incluimos los elementos de *hopping* dominantes. Estos corresponden al *hopping* entre el sitio donde añadimos la partícula y sus primeros vecinos.

### Hopping que conecta el sitio donde insertamos la partícula

Expresamos las energías de sitio teniendo en cuenta los términos de *hopping* a primeros vecinos del sitio  $i$ :

$$\epsilon_i(t) = \epsilon_i + (2n_i - 1) \sum_j \frac{t^2}{d_{ij}}. \quad (3.33)$$

donde  $n_i$  es la ocupación del sitio  $i$  en el estado fundamental cuando el *hopping* es cero. El factor  $(2n_i - 1)$  ha sido introducido en la ecuación (3.33) para obedecer el convenio de energías; positivo para las partículas y negativo para los huecos, el sumatorio en  $j$  se extiende sobre vecinos cercanos y

$$d_{ij} = \begin{cases} \epsilon_i - \epsilon_j, & \text{if } n_i = n_j \\ -\epsilon_i + \epsilon_j + 1 & \text{if } n_i < n_j \\ -\epsilon_j + \epsilon_i + 1 & \text{if } n_i > n_j \end{cases} \quad (3.34)$$

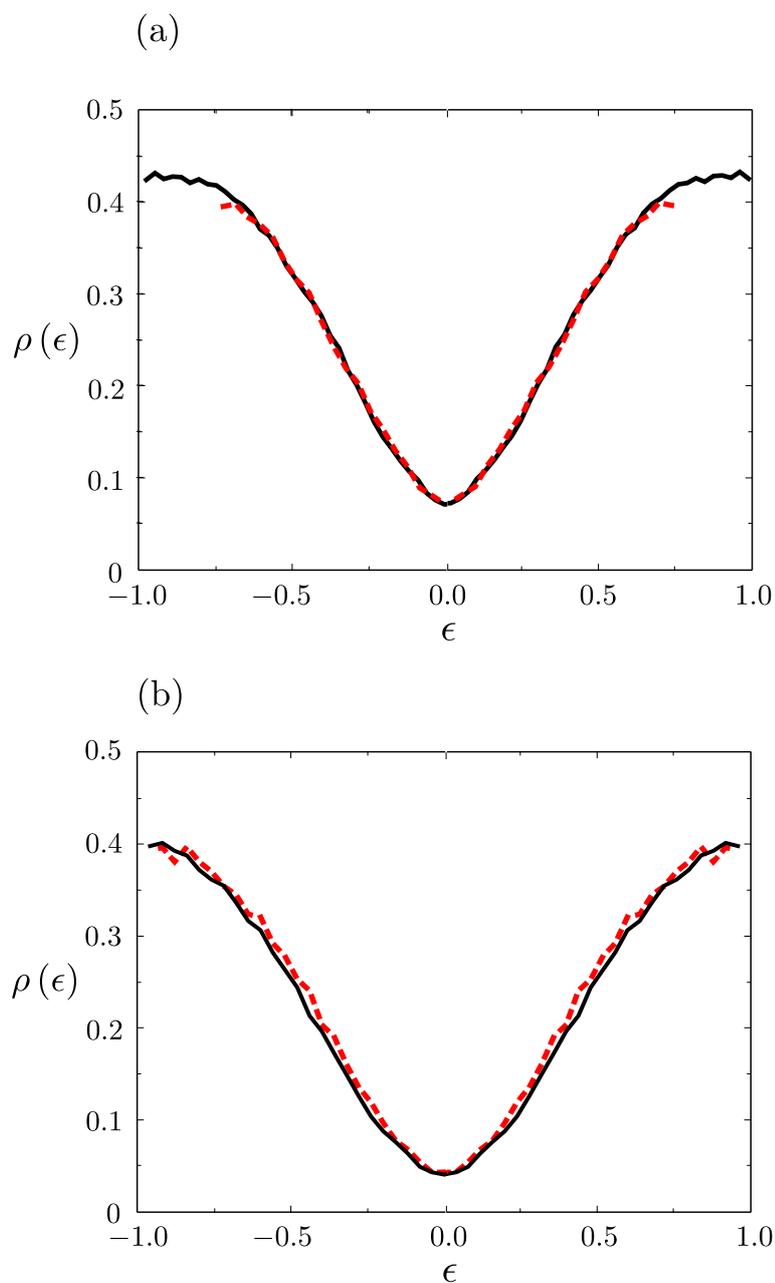
La forma de los factores  $d_{ij}$  es consecuencia de aplicar la teoría de perturbaciones en el espacio de configuraciones.

Finalmente, hemos aproximado la DDE al menor orden en  $t$  considerando tan solo los términos de *hopping* que tienen las mayores contribuciones. En este caso, la DDE se puede calcular de forma análoga al caso clásico pues cada sitio posee una energía bien definida. Estas energías de sitio vienen dadas por la ecuación (3.33).

### 3.3.3. Implementación del cálculo

En primer lugar, tenemos que calcular las energías de sitio clásicas para varias muestras. Para ello, empleamos el algoritmo numérico descrito en la sección 2.1, que permite el cálculo del estado fundamental y un número variable de estados excitados de baja energía en el régimen completamente localizado. Utilizando la configuración del estado de mínima energía clásica podemos calcular todas las energías de sitio clásicas y, utilizando la ecuación (3.33), sus correcciones al menor orden en  $t$ . Recordamos que la distribución de estas energía constituye nuestra aproximación a la DDE cuando los efectos cuánticos son pequeños.

La existencia de autoestados clásicos con energías de sitio muy cercanas entre sí produce inestabilidades numéricas al utilizar la ecuación (3.33). Para evitar este problema realizamos el cálculo de una forma alternativa. Para cada par de sitios vecinos cercanos  $i$  y  $j$ , utilizamos un esquema de diagonalizaciones exactas similar a la perturbación de un nivel degenerado. El término de *hopping* entre estos dos sitios sólo produce una corrección no nula cuando  $n_i \neq n_j$ . Dependiendo de la ocupación



**Figura 3.6:** DDE en función de la energía para *hopping*  $t = 0.1$  calculada con teoría de perturbaciones (línea continua) y mediante diagonalización exacta (línea discontinua) para sistemas pequeños. El panel (a) corresponde al caso 1D con tamaño  $N = 16$ . El panel (b) corresponde al caso 2D con tamaño  $N = 4 \times 4$ .

del estado fundamental en estos dos sitios, aparece una corrección a la energía de sitio en el estado fundamental o en el estado con una partícula o hueco añadido en el sitio  $i$ . Para cada uno de estos casos, la corrección puede ser obtenida como uno de los autovectores de un sistema de dos niveles con un hamiltoniano que expresamos de forma compacta como:

$$H_{i,j} = (2n_i - 1) \begin{pmatrix} 0 & -t \\ -t & -d_{ij} \end{pmatrix} + \epsilon_i \mathbb{I}. \quad (3.35)$$

El factor  $(2n_i - 1)$  se ha introducido de nuevo para obedecer el convenio en el signo de las energías de partículas y huecos. A orden  $t^2$ , la DDE se obtiene sumando todas las contribuciones de cada uno de los operadores de *hopping* entre vecinos cercanos. La energía del sitio  $i$  incluyendo todas estas correcciones es:

$$\epsilon_i(t) = \epsilon_i + \left(n_i - \frac{1}{2}\right) \sum_j d_{ij} \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{2t}{d_{ij}}\right)^2}\right), \quad (3.36)$$

donde la suma se extiende sobre todos los sitios  $j$  vecinos cercanos del sitio  $i$ .

Notamos que el estado de mínima energía para un *hopping* distinto de cero puede diferir del estado fundamental clásico perturbado. De hecho, parece probable que alguno de los estados de baja energía en el límite clásico pase a ser el estado fundamental a  $t \neq 0$ . Si esto ocurre, la DDE puede exhibir un relleno artificial a la energía de Fermi. Para solucionar este problema calculamos la corrección a la energía, al menor orden en  $t$ , de los  $s$  estados clásicos de menor energía para un *hopping* finito. Una vez que hayamos determinado el estado de mínima energía incluyendo las correcciones cuánticas, utilizamos los factores  $d_{ij}$  asociados al orden cero de esta configuración que consideramos que es nuestro nuevo estado fundamental.

Para comprobar la validez de nuestra aproximación comparamos con los resultados de diagonalización exacta. En la figura 3.6 podemos observar la DDE obtenida de forma exacta y con el algoritmo basado en teoría de perturbaciones para sistemas 1D (a) y 2D (b). El *hopping* empleado para ambos sistemas es  $t = 0.1$ . En el cálculo 1D, el tamaño es  $N = 16$  mientras que en 2D hemos usado  $N = 4 \times 4$ . En los dos casos, el acuerdo entre ambos métodos es bueno. En el capítulo siguiente medimos

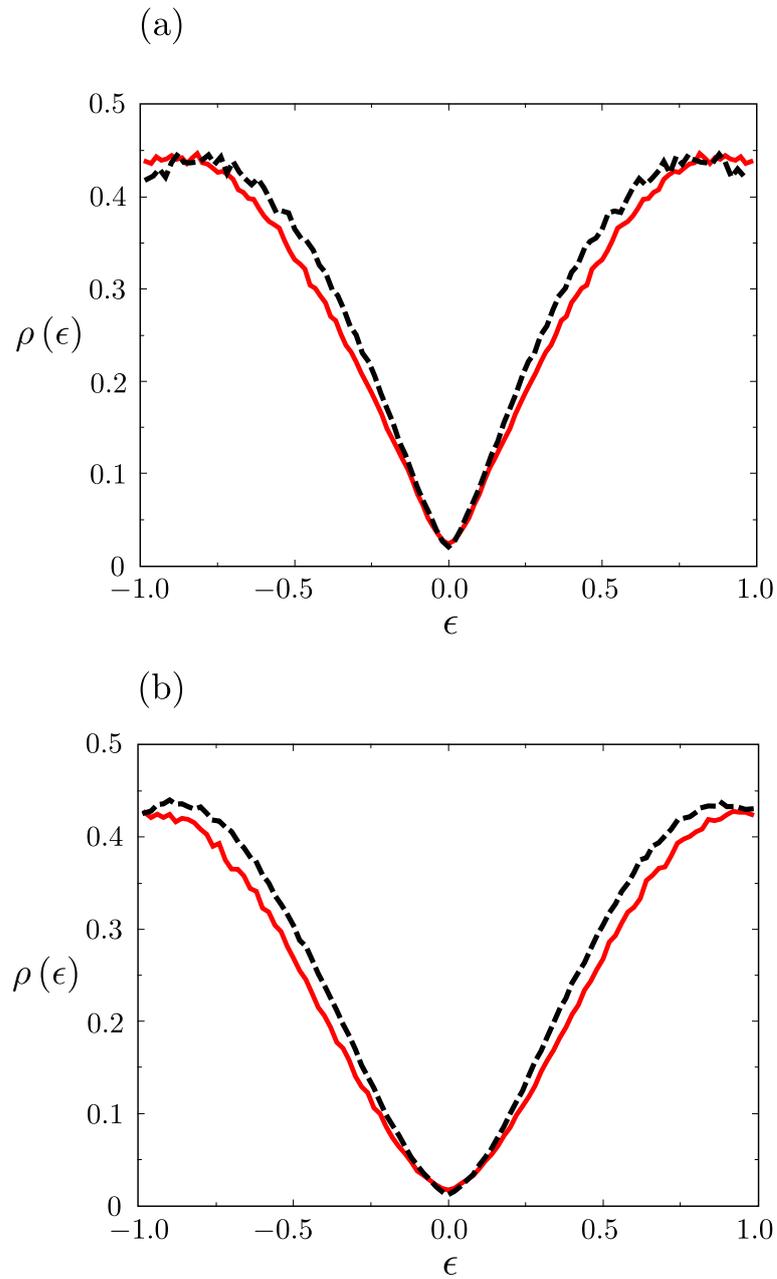
la longitud de localización para sistemas 1D con interacción que decae como  $1/\sqrt{r}$ . Para los mismos parámetros que hemos utilizado en la figura 3.6, obtenemos que  $\xi \sim 0.8$  para sistemas 1D. Concluimos que la teoría de perturbaciones da resultados precisos al menos cuando la longitud de localización es del orden del espaciado de la red. En el caso 2D,  $\xi$  crece más rápidamente que en 1D al aumentar el *hopping*. Por ello, esperamos que el rango de validez de esta aproximación sea menor.

### 3.4. Resultados numéricos mediante teoría de perturbaciones

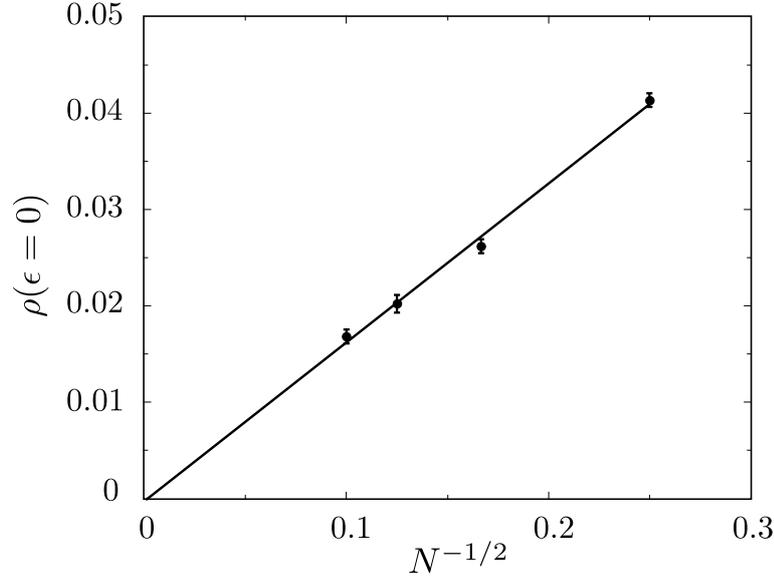
Analizamos los resultados obtenidos con el método perturbativo. En el panel (a) de la figura 3.7, podemos observar la DDE en función de la energía para el caso 1D y tamaño  $N = 256$ . La línea discontinua corresponde al caso clásico,  $t = 0$ , mientras que la continua a un *hopping* finito,  $t = 0.1$ . El resultado indica que el gap se ensancha al incluir efectos cuánticos. Más aún, los datos que hemos obtenidos a *hopping*  $t = 0.1$  parecen ser compatibles con una disminución en la pendiente de la DDE.

En el panel (b) de la figura 3.7 representamos la DDE para sistemas 2D de tamaño  $N = 10 \times 10$ . La línea discontinua corresponde al caso clásico mientras que la continua a  $t = 0.1$ . El resultado es que el gap se ensancha al incluir efectos cuánticos. De nuevo, estos datos parecen ser compatibles con una disminución en la pendiente respecto al gap de Coulomb clásico. Al igual que en el caso 1D, la DDE al nivel de Fermi parece no alterar su forma debido a un *hopping* finito.

Utilizando diagonalización exacta encontramos que la DDE para  $t = 0.1$  se ensanchaba respecto al caso  $t = 0$  tanto en sistemas 1D como en 2D. Este resultado es muy similar a los resultados que acabamos de exponer para el método perturbativo. Los resultados de diagonalización exacta también mostraban que la DDE para  $t = 0.3$  se estrechaba respecto a  $t = 0.2$  en sistemas 2D. En nuestro método basado en teoría de perturbaciones, sólo hemos incluido el primer orden con correcciones a la DDE no nulas. Esto implica que con esta aproximación el gap



**Figura 3.7:** DDE en función de la energía calculada con el método basado en teoría de perturbaciones. Los valores del *hopping* son  $t = 0$  para la línea discontinua y  $t = 0.1$  para la línea continua. En el panel (a) representamos sistemas 1D de tamaño  $N = 256$ , mientras que en el (b) sistemas 2D de tamaño  $N = 10 \times 10$ .



**Figura 3.8:** DDE a energía de Fermi  $\rho(\epsilon = 0)$  para *hopping*  $t = 0.1$  en el caso 2D y frente a  $N^{-1/2}$ . Los tamaños empleados son  $N = 4^2, 6^2, 8^2, 10^2$ . La línea continua es un ajuste de los datos a una ley  $\rho(\epsilon = 0)(N) = A N^{-1/2} + B$  obteniendo una pendiente  $A = (1.7 \pm 0.06)10^{-1}$  y la coordenada en el origen  $B = (3.0 \pm 11.0)10^{-4}$ .

se abrirá monótonamente al incrementar  $t$ . Por ello, este método no es capaz de predecir el estrechamiento del gap, para valores relativamente altos de  $t$ , visto con diagonalización exacta en sistemas 2D.

### 3.4.1. Densidad de estados en el nivel de Fermi

Los tamaños que podemos tratar con el método perturbativo son mucho mayores que los empleados en la diagonalización exacta. Esto nos permite extraer información acerca del comportamiento del gap a energías próximas al nivel de Fermi. Tanto en el panel (a) como en el (b) de la figura 3.7, los cambios en la DDE en una región cercana al origen de energías parecen ser despreciables al incluir un *hopping* finito. Intentamos validar esta observación con un cálculo más específico.

En la figura 3.8, representamos  $\rho(\epsilon = 0)$  para sistemas 2D de tamaños  $N =$

$4^2, 6^2, 8^2, 10^2$ . Al igual que ocurre en el caso clásico asumimos que un tamaño finito produce un relleno del gap proporcional a  $N^{-1/2}$ . Notamos que los datos numéricos que aparecen en la figura 3.8 parecen verificar esta hipótesis. Extrapolamos los datos para hallar el valor en el origen con una ley de potencias  $\rho(\epsilon = 0)(N) = A N^{-1/2} + B$ , donde  $A$  y  $B$  son los parámetros a determinar mediante un ajuste por mínimos cuadrados. Haciendo esto, obtenemos un valor de la DDE en el origen  $\rho(0) = (3.0 \pm 11.0)10^{-4}$ . Dentro de la incertidumbre numérica, concluimos que la DDE en el nivel de Fermi es nula en sistemas macroscópicos. Un cálculo similar en el caso 1D proporciona resultados análogos. Estos es, la DDE en el nivel de Fermi también se anula en el límite termodinámico.

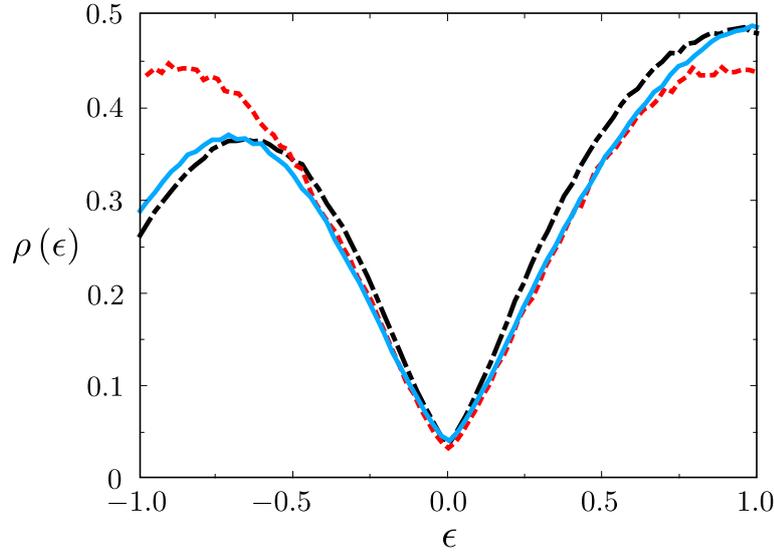
Como ya hemos comentado, puede ocurrir que el estado fundamental clásico perturbado no sea el estado fundamental cuando el *hopping* es finito. Al elegir erróneamente el estado de mínima energía se produce un relleno en la DDE a energía cero. Este efecto de tamaño finito puede llevar a conclusiones equivocadas al determinar la DDE en el nivel de Fermi mediante una extrapolación de tamaño finito. En los datos que mostramos en la figura 3.8 hemos utilizado el conjunto de los  $s = 10000$  estados de menor energía para recalculer el estado fundamental. Hemos comprobado que este número de estados es suficiente para evitar el relleno artificial de la DDE a energía cero para los sistemas tratados.

El resultado de nuestro cálculo indica que el gap de Coulomb sobrevive a la introducción de efectos cuánticos pequeños tanto en sistemas 1D como en 2D.

### 3.4.2. Ocupación un tercio

En el primer capítulo vimos que el gap de Coulomb clásico tiene propiedades universales cerca de la energía de Fermi. Esto implica que la pendiente del gap a energías cercanas a cero no se ve alterada al variar el número de electrones en el sistema. Para terminar esta sección, vamos a comparar la DDE con correcciones cuánticas para dos ocupaciones diferentes.

Calculamos la DDE a ocupación un tercio donde la constante de compensación es  $K = 1/3$  y el potencial químico  $\mu = -1/3$ . En la figura 3.9 mostramos la DDE



**Figura 3.9:** DDE en función de la energía a ocupación  $1/3$  para  $t = 0$  (línea semicontinua) y *hopping*  $t = 0.1$  (línea discontinua). En ambos casos se han utilizado sistemas de tamaño  $L = 90$ , constante de compensación  $K = 1/3$  y potencial químico  $\mu = -1/3$ . Por otro lado, la línea continua muestra la DDE para *hopping*  $t = 0.1$  a ocupación  $1/2$ , donde  $K = 1/2$  y  $\mu = 0$ .

a ocupación un tercio utilizando un tamaño  $L = 90$ . Los valores del parámetro de *hopping* empleados son  $t = 0$  y  $t = 0.1$ . En la misma figura mostramos la DDE para ocupación un medio. Todas las DDE han sido representadas en función de la energía usando como origen de las mismas el potencial químico en cada caso. De esta forma, la DDE cerca del nivel de Fermi coincide para las tres curvas. Esto posibilita una mejor comparación de los resultados. Vemos que las DDE para  $t = 0.1$  es independiente de la ocupación suficientemente cerca del nivel de Fermi.

Esto apunta a que los efectos cuánticos no dependen de la ocupación del sistema, como ocurre en el caso clásico.

### 3.5. Análisis de resultados

Nuestros resultados indican que el gap de Coulomb sobrevive cuando se incluyen efectos cuánticos para sistemas 1D y 2D. Además, estos efectos producen que el gap se ensanche en ambas geometrías. A continuación, damos un razonamiento simple para entender esto último. Para ello nos basamos en la repulsión de niveles cuánticos que produce un *hopping* finito. Esta repulsión afecta a niveles energéticos con diferencia de energías menor que  $t$  y que pueden ser conectados mediante el operador de *hopping*.

En el estado fundamental clásico, cuando dos sitios contiguos tienen ocupaciones opuestas el operador de *hopping* mezcla las configuraciones:  $[\circ\bullet]$  y  $[\bullet\circ]$ . Así, la energía del estado fundamental siempre ve reducida su energía mientras que las configuraciones con una partícula o hueco añadido no se ven afectadas. Es por ello que este mecanismo abre el gap. Si la configuración clásica posee la misma ocupación en dos sitios contiguos, digamos  $[\circ\circ]$ , serán los estados con una partícula o hueco añadidos los que vean alterada su energía a causa de los efectos cuánticos. En concreto, el sitio con mayor energía sufrirá un incremento de la misma mientras que el otro sitio una reducción. Dado un sitio, es más probable que uno de sus primeros vecinos con la misma ocupación tenga una energía mayor debido a la forma lineal del gap de Coulomb clásico. Este mecanismo tiende a cerrar el gap. La probabilidad de encontrar dos sitios contiguos con energías de sitio similares y dentro del gap es pequeña. Para el primer mecanismo, no hace falta que los dos sitios estén dentro del gap y por tanto este mecanismo es más efectivo produciendo que el gap se abra.

La explicación que acabamos de dar es hasta cierto punto sencilla e indica por qué se produce un ensanchamiento del gap cuando el *hopping* es pequeño. Una explicación rigurosa pasa por realizar una aproximación auto-consistente (Efros, 1976), pero teniendo en cuenta nuevas restricciones a las energías de las excitaciones que puedan aparecer debidas a la cuántica. Una de estas restricciones es que los sitios vecinos cercanos con ocupación opuesta han de cumplir la desigualdad:

$$\epsilon_j(t) - \epsilon_i(t) - 1 \geq t. \quad (3.37)$$

Los posibles cambios en la forma del gap de Coulomb al introducir efectos cuánticos han de ser tenidos en cuenta al calcular la conductividad por VRH. Nuestros resultados indican que la DDE en el caso 1D disminuye apreciablemente cuando la longitud de localización aumenta desde el límite completamente localizado. Resultados análogos se han obtenido para el caso de interacciones Coulombianas (Jeon *et al.*, 1999). Esto puede llegar a reducir significativamente el transporte de carga de materiales desordenados a bajas temperaturas respecto a la teoría de Efros-Shklovskii en sistemas 1D. En el caso 2D, las alteraciones en la DDE no son tan significativas al aumentar el *hopping*. Por ello, podemos pensar que las predicciones de la teoría de Efros-Shklovskii no han de verse alteradas por la presencia de efectos cuánticos pequeños, al menos en lo que concierne al gap de Coulomb.

# Localización e interacción

Cualquier valor finito del desorden localiza los estados de una partícula en sistemas 1D. En este capítulo exploramos hasta que punto las interacciones entre electrones pueden alterar este comportamiento. En primer lugar, estudiamos la cuestión de si las interacciones son capaces de deslocalizar en cierta medida los electrones en el estado fundamental. Por deslocalización de electrones no nos referimos a la existencia de una fase extendida, sino simplemente a un aumento de la longitud de localización. También veremos el mismo problema para los autoestados a altas temperaturas, que son los correspondientes al centro de la banda. Hemos de notar que la mayoría de los estudios que tratan ambos problemas son de carácter numérico, pues desarrollos analíticos son muy complicados debido al carácter interactuante y desordenado del problema.

Detallamos la estructura del presente capítulo. En la primera sección repasamos los resultados previos y en la segunda el modelo que utilizamos. Acto seguido, en la sección 4.3, presentamos el método numérico que nos permitirá obtener la longitud de localización,  $\xi$ , en sistemas interactuantes. En la sección 4.4, nos centramos en el cálculo de  $\xi$  para el estado fundamental con interacciones de largo alcance tipo  $1/\sqrt{r}$ . Los datos que presentamos han sido empleados en el análisis de los resultados del capítulo anterior, relativo al gap de Coulomb cuántico, donde se utilizó este tipo de interacción en sistemas 1D. En la sección 4.5, comparamos la longitud de localización para estados en el centro de la banda con la de los extremos. Esto se hace para interacciones de corto y largo alcance. Por último, en la sección 4.6 calculamos la longitud de localización para el estado en el centro de la banda en función de la importancia de las interacciones a primeros vecinos.

## 4.1. Resultados previos

Revisamos a continuación algunos estudios previos relevantes. Schmitteckert *et al.* (1998b) emplearon el algoritmo DMRG para obtener la longitud de localización del estado fundamental en sistemas 1D con interacción de corto alcance. En este trabajo encontraron que una interacción repulsiva produce deslocalización cuando el parámetro que controla la importancia de la interacción,  $V$ , es similar al *hopping*,  $V \simeq t$ . Sus resultados también indican que la longitud de localización para una muestra dada puede exhibir picos cuatro ordenes de magnitud mayores que el valor promedio. Aún así, el aumento en la longitud de localización promediada es bastante pequeño en términos relativos al caso de electrones libres. El valor de la interacción que produce la mayor deslocalización es  $t = V$ . Para la región  $V > 2t$ , siempre hay localización. Aunque no trataremos el caso 2D, Vojta *et al.* (1998) obtuvieron conclusiones parecidas para la longitud de localización del estado fundamental diagonalizando en una base truncada de estados Hartree-Fock. Con un método basado en RG, Carter y MacKinnon (2005) midieron la longitud de localización del estado fundamental para sistemas 1D con interacción a primeros vecinos atractivas y repulsivas. Para el primer caso encontraron deslocalización mientras que para el segundo siempre obtuvieron localización respecto al caso no interactuante. Este último resultado es, hasta cierto punto, incompatible con los resultados obtenidos por Schmitteckert *et al.* (1998b).

Del análisis de estos trabajos podemos concluir que de existir deslocalización para interacciones repulsivas, ésta sería pequeña y en ningún caso suficiente para dar una fase difusiva.

Gran parte del interés suscitado por la localización de sistemas interactuantes a temperatura distinta de cero se debe al trabajo de Basko *et al.* (2006). Estos autores predicen la existencia de una transición metal-aislante al aumentar la temperatura en sistemas 1D interactuantes sin acoplo a ningún reservorio externo. El mecanismo por el cual ocurre la transición suele ser referido como *many-body localization*. La transición implica la existencia de una fase difusiva, al menos a temperatura infinita.

Los autoestados del centro de la banda en el problema interactuante han de ser extendidos para que dicha fase exista.

Oganesyan y Huse (2007) estudiaron la estadística de niveles energéticos cerca del centro de la banda mediante diagonalización exacta para fermiones sin espín en un potencial aleatorio e interacciones a primeros vecinos. En este trabajo se aprecian indicios de la existencia de una fase difusiva a temperatura infinita. Pal y Huse (2010) utilizaron diagonalización exacta en el modelo de Heisenberg con campos aleatorios en la dirección  $z$ , el cual mapea al modelo de Anderson con interacciones a vecinos cercanos. Los autores encontraron evidencias de una transición metal-aislante a un desorden crítico  $W_c = 7.0 \pm 2.0$ , en nuestro convenio de energía (ellos dan un valor de  $\eta_c = 3.5 \pm 1.0$  porque su desorden va  $[-\eta, \eta]$ ), en los estados del centro de la banda. Empleando diagonalización exacta y un método basado en el RG, Monthus y Garel (2010) obtuvieron resultados similares que indican la existencia de la transición a un desorden  $W_c \sim 5.6$ .

Los estudios mencionados en el párrafo anterior obtienen resultados con diagonalización exacta, lo que sólo permite tratar sistemas relativamente pequeños. Por ello, no podemos afirmar la existencia de la transición en base a los mismos. Bardarson *et al.* (2012) utilizarón el algoritmo TEBD para estudiar la evolución temporal de un estado excitado sin entrelazado para fermiones con interacción a próximos vecinos. El estado que se evoluciona tiene una ocupación bien definida en cada sitio y se elige de forma aleatoria. Sus conclusiones son que la entropía de Von Neumann crece línealmente con el tamaño de la muestra para sistemas 1D cuando las interacciones están presentes pero que satura a un valor finito en el no interactuante. La evolución se lleva a cabo para valores de los parámetros del hamiltoniano en los que el sistema se supone está en la fase localizada. El crecimiento lineal de la entropía con el tamaño es un comportamiento muy curioso para un aislante de Anderson.

## 4.2. Modelo

Especificamos a continuación el modelo que hemos utilizado en este capítulo. La parte del hamiltoniano sin interacciones corresponde al modelo de Anderson, presentado en el capítulo 1, para electrones sin espín en una red 1D:

$$H_0 = \sum_i (\phi_i - \mu) n_i + t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (4.1)$$

donde los potenciales de sitio  $\phi_i$  siguen una distribución de probabilidad uniforme en el intervalo  $[-W/2, W/2]$  y  $t$  es el parámetro de *hopping*. Denotamos el número de sitios de la red como  $L$ . Escogemos un número de electrones igual a la mitad de los sitios empleados, es decir a ocupación un medio, y establecemos el potencial químico  $\mu = 0$ . Estamos interesados en dos tipos de interacción. Por un lado, obtendremos resultados para interacciones de largo alcance:

$$H_{\text{LA}} = V \sum_i \sum_{j>i} \frac{(n_i - K)(n_j - K)}{r_{i,j}^\alpha}. \quad (4.2)$$

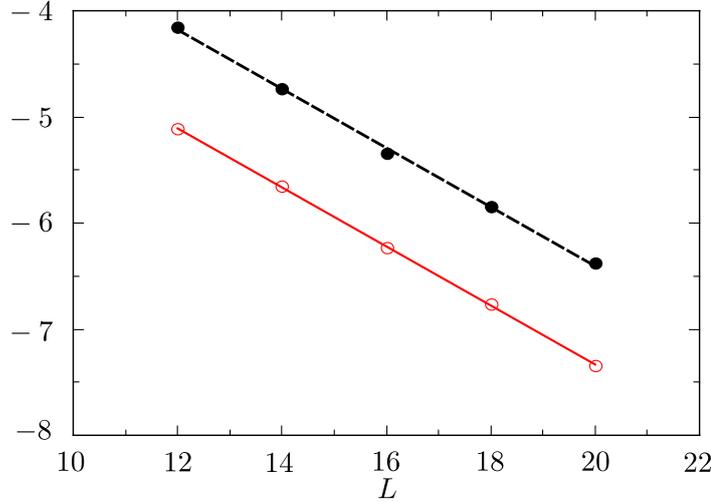
Para este caso, tratamos interacciones que decaen con la distancia como  $1/\sqrt{r}$  e interacciones puras de Coulomb. A las primeras les corresponde  $\alpha = 1/2$  y para las segundas  $\alpha = 1$ . También presentaremos resultados para interacciones de corto alcance:

$$H_{\text{CA}} = V \sum_i (n_i - K)(n_{i+1} - K). \quad (4.3)$$

En todos los casos escogemos  $K = 0.5$ , lo que asegura la neutralidad de carga a ocupación un medio.

## 4.3. Longitud de localización en sistemas interactuantes

En el primer capítulo de esta memoria vimos la definición de longitud de localización para estados de una partícula. Generalizamos esta definición a sistemas interactuantes.



**Figura 4.1:** Parte izquierda de la ecuación (4.6) en función del tamaño (símbolos ●). La línea discontinua ajusta estos datos a una recta con pendiente  $-0.278$ , lo que implica  $\xi \simeq 3.6$ . Parte izquierda de la ecuación (4.5) en función del tamaño (símbolos ○). La línea continua ajusta estos datos a una recta obteniendo una pendiente de  $-0.279$ . Para ambos casos se ha utilizado sistemas no interactuante con desorden  $W = 5$ , *hopping*  $t = 1$  y tamaños  $L = 12, \dots, 20$ . Cada punto se ha promediado sobre 500 muestras.

De forma intuitiva, un estado de muchas partículas está localizado si al insertar un exceso de carga de forma coherente, ésta queda restringida en una región pequeña del sistema. Al igual que en el caso no interactuante localizado, esperamos que la probabilidad de que el exceso de carga aparezca en puntos lejanos a donde se introdujo decaiga de manera exponencial. Esto nos lleva a definir la longitud de localización,  $\xi$ , en sistemas interactuantes de forma que:

$$\lim_{|y-x| \rightarrow \infty} |\langle \psi | c_x c_y^\dagger | \psi \rangle| \sim e^{-\frac{|y-x|}{\xi}}, \quad (4.4)$$

donde  $|\psi\rangle$  es un estado del sistema de muchas partículas. Se puede comprobar que esta definición de  $\xi$  concuerda con la usual para sistemas no interactuantes. Por último, queremos resaltar que las longitudes de localización para autoestados del hamiltoniano a diferentes energías no tienen por que coincidir.

### 4.3.1. Cálculo

Explicamos dos métodos alternativos para obtener la longitud de localización del estado fundamental en sistemas interactuantes. De nuestra definición de longitud de localización en la ecuación (4.4) se deduce que:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \ln \langle \psi | c_L c_1^\dagger | \psi \rangle = -\frac{L}{\xi} + b', \quad (4.5)$$

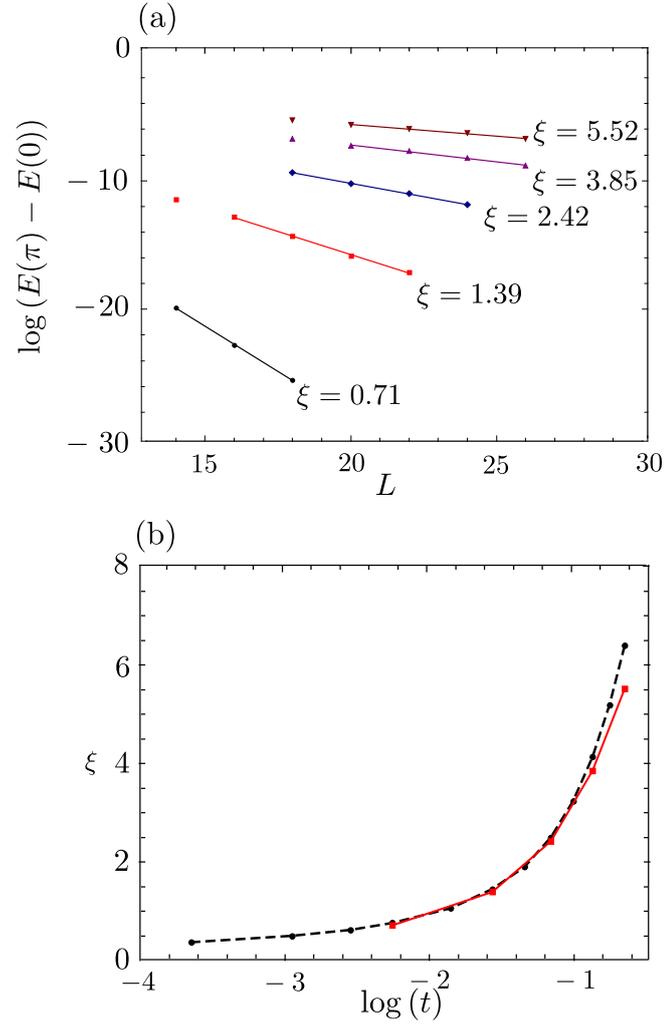
con  $|\psi\rangle$  un estado *many-body* y  $b'$  una constante. Esta expresión permite una estimación de  $\xi$  para un autoestado arbitrario del problema interactuante. Para ello, diagonalizamos el hamiltoniano y obtenemos el autoestado deseado. A continuación, se calcula la cantidad  $\ln (\langle \psi | c_L c_1^\dagger | \psi \rangle)$  para varios valores de  $L$  y se promedia para un número suficiente de muestras. Finalmente, ajustando este promedio a una recta de la forma  $-\frac{L}{\xi} + b'$  obtenemos la longitud de localización.

Otra forma de extraer  $\xi$  para el estado fundamental es utilizando la sensibilidad a las condiciones de contorno. Intuitivamente, las condiciones de contorno han de ser irrelevantes cuando los electrones están localizados en regiones mucho menores que el tamaño de la muestra. Denotamos  $E_0(\theta)$  la energía del estado fundamental con condiciones de contorno  $c_{L+1} = e^{i\theta} c_1$ . La longitud de localización puede ser calculada mediante (Schmitteckert *et al.*, 1998a,b):

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \log [E_0(\pi) - E_0(0)] = -(-1)^{n_e} \frac{L}{\xi} + b. \quad (4.6)$$

donde  $n_e$  es el número de electrones y  $b$  es una constante.

En la figura 4.1 aparece el resultado de calcular las correlaciones a dos puntos y la sensibilidad a las condiciones de contorno para sistemas de tamaño variable  $L = 12, \dots, 20$ . Utilizando la ecuación (4.5) y los datos relativos a las correlaciones a dos puntos, podemos extraer la longitud de correlación como  $\xi \simeq 3.6$ . Utilizando la ecuación (4.6) y los datos relativos a la sensibilidad a las condiciones de contorno, se extrae un valor de  $\xi$  muy parecido al anterior. Esto es, la longitud de localización que obtenemos con ambos métodos muestra un acuerdo muy bueno. Debemos tener en cuenta que el primero de los algoritmos permite calcular  $\xi$  para cualquier estado, mientras que el segundo tan solo se aplica a la energía del estado fundamental.



**Figura 4.2:** (a) Sensibilidad a las condiciones de contorno, parte izquierda de la ecuación (4.6), en función del tamaño para diferentes valores del *hopping*, desorden  $W = 2$  y sistemas 1D no interactuantes. Cada punto se ha promediado en desorden sobre 500 muestras. Las líneas son ajustes de los que extraemos la longitud de localización, especificada en cada curva. Cada conjunto de datos corresponde de abajo a arriba a valores del *hopping*  $t = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$  y  $t = 0.5$ . (b) La línea discontinua une los valores de  $\xi$ , calculados con la matriz de transferencia, en función de  $\log(t)$ . La línea continua une los valores de  $\xi$ , obtenidos en el panel (a), en función de  $\log(t)$ .

A continuación, determinamos el rango de validez de estos métodos. Comparamos los resultados obtenidos a través de la sensibilidad a las condiciones de contorno y los obtenidos mediante la matriz de transferencia para desorden  $W = 2$  en sistemas no interactuantes. En el panel (a) de la figura 4.2, vemos los datos obtenidos para la sensibilidad a las condiciones de contorno. Hemos promediado sobre 500 muestras y los valores del *hopping* empleados son  $t = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ . Las longitudes de localización se extraen mediante un ajuste lineal y se muestran al lado de cada uno de los ajustes. En el panel (b), comparamos estos datos (línea continua) con la longitud de localización calculada utilizando la matriz de transferencia. Los resultados muestran un acuerdo muy bueno para longitudes de localización  $\xi < 4$ . Resaltamos que nuestro método infravalora la longitud de localización cuando la deslocalización es mayor. También hemos comprobado que las mismas conclusiones se mantienen utilizando el otro método expuesto.

En lo que sigue, calculamos la longitud de localización para diferentes tipos de interacciones. Utilizaremos el autoestado de mínima energía y el estado de energía más cercana a cero. Ambos son calculados con las subrutinas ARPACK.

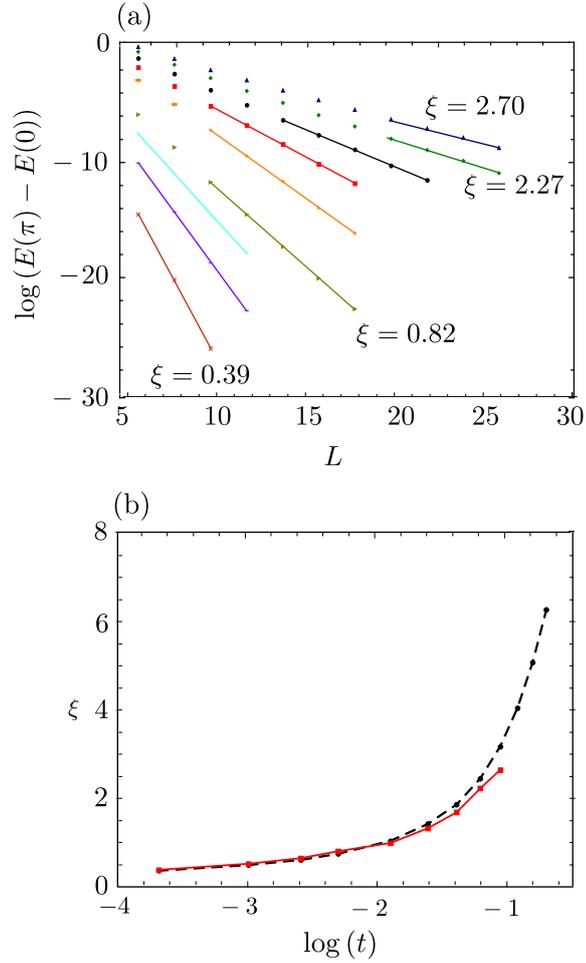
#### 4.4. Interacciones de largo alcance en el extremo de la banda.

Procedemos a calcular la longitud de localización del estado fundamental para sistemas con interacción de largo alcance que decaen con la distancia como  $1/\sqrt{r}$ . Para ello, utilizamos un hamiltoniano dado por:

$$H = H_0 + H_{LA}, \quad (4.7)$$

donde los operadores  $H_0$ ,  $H_{LA}$  aparecen en las ecuaciones (4.1) y (4.2), respectivamente, y el parámetro que controla la interacción es  $\alpha = 1/2$ .

En el panel (a) de la figura 4.3, vemos los datos obtenidos para la sensibilidad a las condiciones de contorno del estado fundamental en función del tamaño en sistemas 1D con  $V = 1$  y desorden  $W = 2$ . Hemos promediado en 500 muestras y los



**Figura 4.3:** (a) Sensibilidad a las condiciones de contorno en función del tamaño para diferentes valores del *hopping*, desorden  $W = 2$  y sistemas 1D con interacción  $1/\sqrt{r}$ . Cada punto se ha promediado en desorden sobre 500 muestras. Las líneas son ajustes lineales con los que extraemos la longitud de localización. Las rectas corresponden a los valores de *hopping*  $t = 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35$ , de abajo a arriba. Al lado de algunas de las rectas ajustadas especificamos el valor de  $\xi$ . (b) La línea discontinua representa  $\xi$  en función de  $\log(t)$  para el caso no interactuante, que ha sido obtenida mediante matriz de transferencia, mientras que la continua representa  $\xi$ , extraída con los datos del panel (a), en función de  $\log(t)$ .

valores del *hopping* empleados son  $t = 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35$ . Las longitudes de localización se extraen mediante un ajuste lineal. Al lado de alguna de las recta ajustada especificamos la longitud de localización obtenida. En el panel (b) de la misma figura, la línea continua une los valores de  $\xi$  extraídos del panel (a), mientras que la línea discontinua une los valores de la longitud de localización para el caso no interactuante utilizando matriz de transferencia.

Los datos que mostramos en el panel (b) de la figura 4.3 indican que la longitud de localización no sufre cambios importantes cuando introducimos la interacción para  $t < 0.2$ . A partir de ese valor del *hopping*, la interacción produce una mayor localización de los electrones en la muestra, aunque este efecto es relativamente pequeño. Esto puede implicar que la interacción lleva al sistema hacia un cristal de Wigner. Estos materiales se caracterizan por un posicionamiento de las cargas de forma que la interacción entre ellas es mínima. Alteraciones de esta configuración producirán un coste energético grande, pues en los cristales de Wigner las interacciones entre partículas son la energía dominante. En consecuencia, los portadores de carga en esta clase de sistemas han de tener una movilidad reducida.

## 4.5. Extremo *vs.* centro de la banda

En esta sección, determinamos la longitud de localización del estado fundamental y del estado en el centro de la banda cuando la interacción y el *hopping* son similares,  $t \simeq V$ . El cálculo de  $\xi$  en el estado del centro de la banda mediante un cambio en las condiciones de contorno no es posible. Por ello, empleamos las correlaciones a dos puntos que aparecen en la ecuación (4.6). Hemos de notar que la determinación del estado a energía cero es más costosa, numéricamente, que la del estado fundamental. Por ello, la longitud del sistema máxima que empleamos en este caso es de  $L = 16$ .

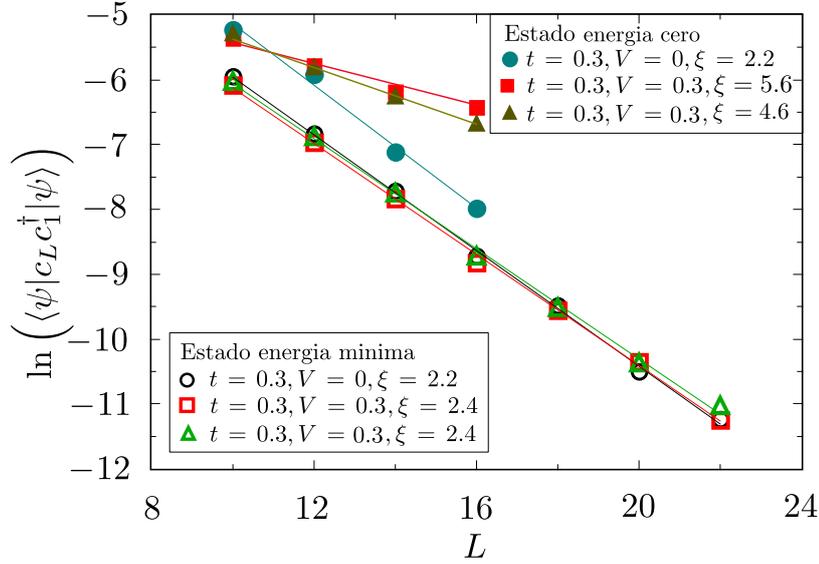
En la figura 4.4, representamos  $\ln \langle \psi | c_L c_1^\dagger | \psi \rangle$  en función del tamaño para el estado fundamental y para el estado en el centro de la banda utilizando distintos tipos de interacción. El desorden empleado es  $W = 2.0$  y el *hopping*  $t = 0.3$  para todos los cálculos. Los datos sin relleno corresponden al estado fundamental mientras que los

que sí lo tienen al estado de energía cero. Los círculos representan sistemas no interactuantes, los cuadrados interacción a próximos vecinos y los triángulos interacción de Coulomb.

Analizamos los datos que aparecen en la figura 4.4. En el caso no interactuante, la longitud de localización del estado en el centro de la banda y la del estado fundamental son similares. Pero al incluir interacciones,  $\xi$  sufre un incremento muy significativo para el estado con energía más cercana a cero. Para este estado e interacciones de Coulomb (triángulos rellenos) encontramos  $\xi \approx 4.6$ , que es más del doble que en el caso sin interacción. Si consideramos interacciones de corto alcance (cuadrados rellenos), este mismo estado posee  $\xi \approx 5.6$ , lo que supone casi multiplicar por un factor 3 la longitud de localización del caso no interactuante. Concluimos pues que las interacciones afectan muy significativamente a la longitud de localización para los estados en el centro de la banda. Queremos destacar que la interacción de primeros vecinos parece producir una mayor deslocalización de los electrones que las interacciones de Coulomb.

En acuerdo con las conclusiones generales que extraíamos de la bibliografía analizada, nuestros resultados indican que las interacciones afectan muy poco a las propiedades de localización del estado fundamental. Nuestros datos parecen indicar una leve deslocalización para este estado cuando la interacción y el *hopping* son iguales  $t = V$ , tanto para interacciones de corto alcance como para las de Coulomb.

En los datos anteriores, la longitud de localización para el caso interactuante y en el centro de la banda son mayores que  $\xi > 4$  que era el límite donde esperábamos obtener un error pequeño. Además esta cota se estableció para cálculos que utilizaban el estado fundamental y por tanto se podían diagonalizar mayores tamaños. Aún así, creemos que nuestras conclusiones cualitativas no han de verse alteradas pues la diferencia entre longitud de localización para el estado fundamental y los estados interactuantes en el centro de la banda son suficientemente grandes. Más aún, vimos en la sección 4.3.1 que el error en el método producía estimaciones menores que la longitud de localización real. Posiblemente, el caso interactuante para el autoestado a energía cero tendrá una longitud de correlación aún mayor que nuestra



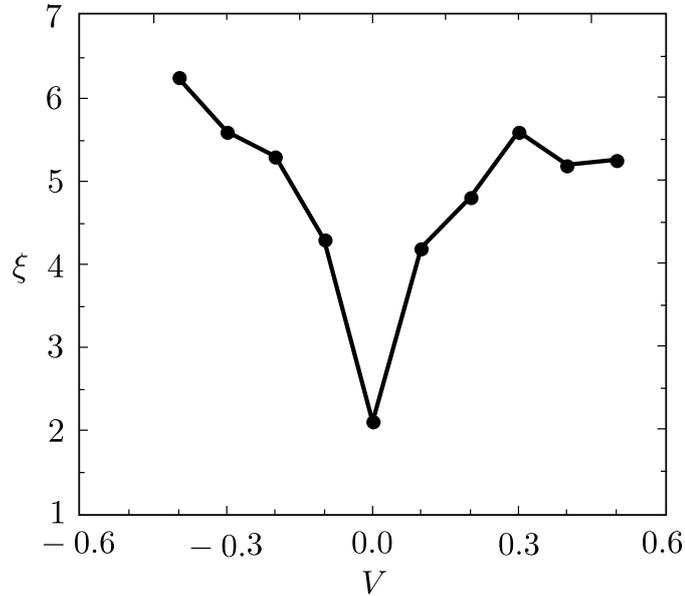
**Figura 4.4:** Representamos  $\ln \langle \psi | c_L c_1^\dagger | \psi \rangle$  en función del tamaño,  $L$ . Cada punto se ha obtenido promediando sobre 500 muestras. El desorden es  $W = 2$ , y el *hopping* es  $t = 0.3$ . Los símbolos sin relleno representan datos calculados para las correlaciones del estado fundamental, mientras que los símbolos con relleno se han utilizado para datos relativos a las correlaciones del autoestado con energía más próxima a cero. El círculo (circunferencia) representa datos sin interacción  $V = 0$ . El cuadrado corresponde a interacciones entre primeros vecinos. Los triángulos han sido calculados con interacción de largo alcance de Coulomb. En los dos últimos casos el parámetro de la interacción cumple  $V = t = 0.3$ .

estimación.

## 4.6. Centro de la banda

Por último, queremos encontrar cuales son los valores de  $t/V$  que producen mayor deslocalización en el autovector más cercano a la energía cero. Nos restringimos en esta sección a interacciones de corto alcance. El hamiltoniano es en este caso:

$$H = H_0 + H_{CA}, \quad (4.8)$$



**Figura 4.5:** Longitud de localización obtenida mediante las correlaciones a dos puntos, ecuación (4.5), para el estado en el centro de la banda e interacciones a primeros vecinos en función del parámetro de la interacción,  $V$ . El desorden es  $W = 2$  y el *hopping*  $t = 0.3$ . Para interacciones repulsivas se obtiene la máxima deslocalización cuando  $V = t$ , mientras que en el caso atractivo  $\xi$  parece crecer monótonamente al incrementar el valor absoluto de  $V$ .

donde los operadores  $H_0$ ,  $H_{CA}$  aparecen en las ecuaciones (4.1) y (4.3)

En la figura 4.5 mostramos la longitud de localización para sistemas 1D con interacción a primeros vecinos y en función del parámetro de interacción,  $V$ . El desorden es  $W = 2$  y el *hopping*  $t = 0.3$ . Los puntos representan  $\xi$  para diferentes valores de  $V$  mientras que la línea que los une sirve como guía visual. Los valores de la interacción considerados van de  $V = -0.4$  a  $V = 0.5$  en intervalos de 0.1. Para interacción atractiva vemos que la longitud de localización parece crecer monótonamente con el módulo de  $V$ . Para el caso repulsivo, el máximo valor de  $\xi$  se alcanza en  $t = V$ . Notamos también cierta simetría respecto al origen de interacciones cuando éstas son pequeñas en valor absoluto.

Nuestros resultados parecen indicar que la mayor deslocalización en el caso de interacciones repulsiva se produce cuando  $t \approx V$ . Este resultado es similar al encontrado para el estado fundamental en 1D (Schmitteckert *et al.*, 1998b) y en 2D (Vojta *et al.*, 1998). En estas dos referencias los resultados muestran que el aumento de la longitud de localización debido a las interacciones es relativamente pequeño. En cambio, en nuestro caso el aumento de  $\xi$  es muy significativo en términos relativos al caso de electrones libres para el estado del centro de la banda. También encontramos que la interacción de Coulomb parece ser menos efectiva deslocalizando los electrones que las interacciones a primeros vecinos, al menos para el rango de parámetros tratado.

# Diagrama de fases del modelo Bose-Hubbard unidimensional

En este capítulo analizamos el diagrama de fases del modelo BH a temperatura cero. Este posee características peculiares, debido en parte a las fluctuaciones cuánticas, como la existencia de re-entrada o la aparición de puntos KT. En lo que sigue estudiamos varias aproximaciones relativamente simples, que nos permiten ganar una mayor intuición sobre los mecanismos que dan lugar a la reentrada, y realizamos cálculos a entrelazado limitado mediante el método numérico iTEBD. Este algoritmo, que explicamos detalladamente en el capítulo 2, aproxima el estado fundamental en el límite termodinámico. Para ello, iTEBD minimiza el hamiltoniano en la familia de MPS con cierta dimensión de las matrices  $\chi$ . La cantidad de correlaciones cuánticas que un MPS es capaz de describir depende del valor de  $\chi$ , por lo que podremos explorar las mejoras al aproximar el diagrama de fases cuando aumentamos gradualmente la cantidad de correlaciones cuánticas que el sistema es capaz de describir.

La estructura de este capítulo es la siguiente. En la primera sección repasamos brevemente algunas características del modelo BH en sistemas 1D. Además revisamos la bibliografía relevante para nuestro trabajo. En la sección 5.2, aproximamos el diagrama de fases del modelo BH utilizando varios métodos relativamente simples. Estos son campo medio en *clusters* finitos, diagonalización exacta y un algoritmo basado en RG. En la sección 5.3, examinamos el mismo diagrama pero utilizando un entrelazado limitado. En esta sección veremos cual es la dimensión mínima de las matrices de un MPS que se necesita para describir la reentrada y como

localizar el punto KT a densidad unidad mediante una extrapolación a entrelazado finito.

## 5.1. Modelo de BH unidimensional

El modelo BH posee dos fases a temperatura cero, la SF y la MI. En sistemas 1D, la primera fase se caracteriza por correlaciones que decaen de forma algebraica y por no poseer gap, o región prohibida en energías, entre el estado fundamental y el estado excitado de menor energía. La fase MI posee gap y las correlaciones a dos puntos decaen de manera exponencial, con una longitud de correlación bien definida. El diagrama de fases del modelo BH en sistemas 1D exhibe reentrada para densidades cercanas a la unidad y además posee puntos críticos KT.

Un sistema con dos fases A y B, exhibe reentrada cuando variando monótonamente un solo parámetro del sistema ocurre una sucesión de transiciones A-B-A-B. Por ejemplo, en las transiciones térmicas el parámetro a variar es la temperatura,  $T$ . Habitualmente, la fase ordenada aparece a temperaturas bajas y aumentando la misma se llega a la fase desordenada. La reentrada ocurre cuando aumentando más la temperatura vuelve a estabilizarse la fase ordenada para finalmente acabar en la fase desordenada a temperaturas aún mayores. Esta propiedad ha sido observada en cristales líquidos entre las fases esméctica (ordenada) y nemática (desordenada), así como en sistemas de espines frustrados (Saslow y Parker, 1986; Cladis, 1975). En general, una transición de fase térmica es interpretada como una competición entre la energía y la entropía. El fenómeno de la reentrada requiere una interpretación más precisa.

También estudiamos la determinación del punto KT para el modelo BH en el caso 1D y densidad unidad. La caracterización de estos puntos críticos es difícil debido a que no implican cambios abruptos en las propiedades del sistema. Además, determinar donde ocurren es una tarea compleja pues el gap se cierra de forma logarítmica con la longitud de correlación. Esto obliga a emplear sistemas de gran tamaño cuando la localización del punto crítico se realiza mediante simulaciones

numéricas. Como discutimos a continuación, se han llevado a cabo numerosos trabajos tratando de obtener el valor de los parámetros críticos donde ocurre el punto KT en el modelo BH.

### 5.1.1. Trabajos previos

Elstner y Monien (1999) realizaron el primer trabajo en el que se hallaba un diagrama de fases reentrante para el modelo BH. Ellos emplearon teoría de perturbaciones en el *hopping* a orden 12. Recordamos que en el primer capítulo de esta tesis, nosotros también hemos presentado cálculos utilizando teoría de perturbaciones pero a primer orden en  $t$ . Kühner *et al.* (2000) confirmaron la existencia de reentrada en un trabajo posterior utilizando DMRG.

La bibliografía que trata de determinar el punto KT a densidad unidad es más extensa que la relativa a la reentrada. Una primera aproximación consiste en truncar el modelo BH a una ocupación máxima de dos bosones por sitio y utilizar RG para hallar el diagrama de fases. Con este método, Rokhsar y Kotliar (1991) obtuvieron  $t_{KT} = 0.215$ . Utilizando Monte Carlo cuántico, Batrouni *et al.* (1990) estimaron un valor similar  $t_{KT} = 0.215 \pm 0.02$ . Por otro lado, Krauth (1991) encontró  $t_{KT} = 0.289$  mediante un cálculo basado en *Bethe Ansatz*. En sistemas finitos y utilizando la fidelidad del estado fundamental, se halló una estimación  $t_{KT} = 0.257 \pm 0.001$  (Buonsante y Vezzani, 2007). Utilizando Monte Carlo cuántico de nuevo, Kashurnikov *et al.* (1996) obtuvieron  $t_{KT} = 0.300 \pm 0.005$ , mientras que otro estudio, donde se combina diagonalización exacta con RG, arroja un valor  $t_{KT} = 0.304 \pm 0.002$  (Kashurnikov y Svistunov, 1996). Freericks y Monien (1996) encontraron con tercer orden en teoría de perturbaciones  $t_{KT} = 0.215$ , aunque cálculos posteriores a orden 12 proporcionaron una estimación diferente,  $t_{KT} = 0.26 \pm 0.01$  (Elstner y Monien, 1999).

Para la obtención de los resultados más fiables se emplearon métodos tipo DMRG. En el primero de estos estudios, Pai *et al.* (1996) implementaron DMRG infinito con condiciones de contorno periódicas y utilizaron el gap en la energía para localizar la transición. El resultado es  $t_{KT} = 0.298 \pm 0.01$ . En otro estudio en el que se utilizó el mismo método numérico, Kühner y Monien (1998) encontraron  $t_{KT} = 0.277 \pm 0.01$ .

En éste último trabajo la localización del punto crítico fue realizada mediante las correlaciones a dos puntos. Uno de los trabajos más exhaustivos utilizando DMRG fue realizado por Kühner *et al.* (2000). Mediante el decaimiento de las correlaciones a dos puntos localizaron el punto crítico KT en  $t_{\text{KT}} = 0.297 \pm 0.01$ .

Los trabajos más recientes parecen estar de acuerdo en que  $t_{\text{KT}} \approx 0.3$ . Uno de ellos utiliza iTEBD y el decaimiento de las correlaciones comentado antes para localizar la transición produciendo un resultado  $t_{\text{KT}} = 0.2975 \pm 0.0005$  (Zakrzewski y Delande, 2008). Otro trabajo establece  $t_{\text{KT}} = 0.2980 \pm 0.0005$  midiendo la entropía de Von Neumann (Laeuchli y Kollath, 2008). Ejima *et al.* (2011) estiman  $t_{\text{KT}} = 0.3050 \pm 0.001$  utilizando las correlaciones densidad-densidad  $\langle n_0 n_x \rangle$ , mientras que Roux *et al.* (2008) concluyen  $t_{\text{KT}} = 0.3030 \pm 0.009$  a partir del gap de energías. Usando el gap en las excitaciones del número de vueltas (*winding number excitations*), Danshita y Polkovnikov (2011) encuentran que  $t_{\text{KT}} = 0.3190 \pm 0.001$ . Por último, a partir de las fluctuaciones en la densidad se ha situado el punto crítico en  $t_{\text{KT}} = 0.2989 \pm 0.0002$  (Rachel *et al.*, 2012).

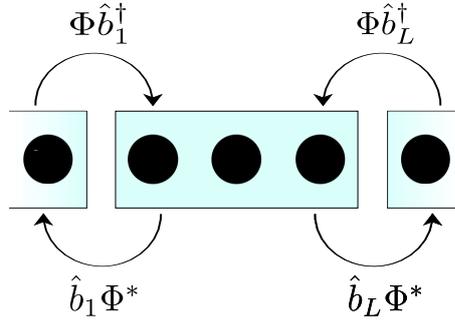
### 5.1.2. Modelo

El modelo BH describe bosones con interacciones de contacto en una red periódica. El hamiltoniano puede ser expresado como:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i) - \mu \sum_j n_j + \frac{U}{2} \sum_j n_j(n_j - 1), \quad (5.1)$$

donde  $t$  es el *hopping*,  $b_i$  el operador destrucción en el sitio  $i$ ,  $\mu$  el potencial químico y  $U$  controla la importancia de la interacción. El operador número de partículas en el sitio  $i$  es  $n_i = b_i^\dagger b_i$ . Asumimos un parámetro de *hopping* y potencial químico positivo,  $t > 0$  y  $\mu > 0$ . En lo que sigue tomamos  $U = 1$ , lo que fija la escala de energías. Por esta razón, el diagrama de fases siempre se especifica en el plano  $(t, \mu)$ .

Por último, recordamos que en el límite  $t/\mu \ll 1$ , el estado fundamental pertenece a la fase MI, mientras que en  $t/\mu \gg 1$  el estado fundamental pertenece a la fase SF.



**Figura 5.1:** Un bloque de tres sitios junto con sus dos vecinos cercanos de los bloques contiguos. El operador de *hopping* entre los dos sitios en los extremos del bloque central y sus respectivos vecinos es aproximado usando un parámetro de orden súper fluido homogéneo  $\Phi = \langle b_1 \rangle = \langle b_L \rangle$  que ha de ser determinado de forma autoconsistente. De esta forma, el hamiltoniano desacopla los grados de libertad del bloque central y sus dos bloques vecinos.

## 5.2. Tres aproximaciones al diagrama de fases

Los dos métodos analizados en la introducción, campo medio y teoría de perturbaciones a orden lineal, aproximan la fase MI de forma pobre. En estas aproximaciones, un estado MI no posee correlaciones entre diferentes sitios. En los tres próximos métodos intentamos mejorar la descripción del estado MI con aproximaciones que permitan ciertas correlaciones. Pondremos especial interés en analizar la capacidad de estos métodos para reproducir un diagrama de fases reentrante y describir el punto KT.

### 5.2.1. Campo medio en *clusters* finitos

El tipo de teoría de campo medio estudiado en el primer capítulo puede ser extendida para tratar *clusters* finitos (Pisarski *et al.*, 2011). Utilizamos un *ansatz* en forma de producto de estados para cada uno de los *clusters* de tamaño  $L$ :

$$|\psi_{\text{var}}^L\rangle = \prod_j |\psi_j^L\rangle, \quad (5.2)$$

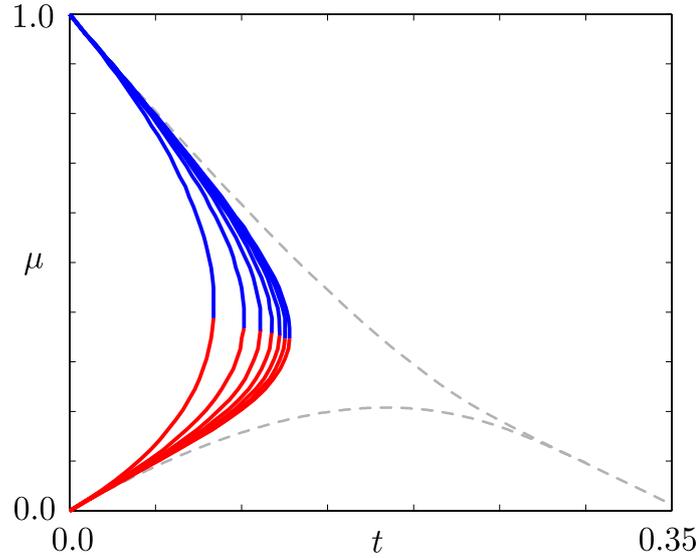
donde  $|\psi_j^L\rangle$  es el estado del *cluster*  $j$ -ésimo. Procedemos a desacoplar el operador de *hopping* que conecta las fronteras de cada *cluster*. Para ello, empleamos la misma aproximación que en la versión simple de campo medio. Como ejemplo, en la figura 5.1 representamos de forma esquemática como desacoplar bloques de tamaño  $L = 3$ . Con esta aproximación obtenemos un hamiltoniano para cada bloque:

$$H_{\text{MF}}^L = -t(\Phi b_1^\dagger + \text{h.c.}) - t(\Phi b_L^\dagger + \text{h.c.}) + 4t|\Phi|^2 - \mu \sum_{j=1}^L n_j - t \sum_{j=2}^{L-1} (b_j^\dagger b_{j+1} + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1), \quad (5.3)$$

donde el parámetro de orden es  $\Phi = \langle b_1 \rangle = \langle b_L \rangle$ . El mínimo de este hamiltoniano puede ser determinado de manera autoconsistente una vez establecida una ocupación máxima por sitio. Un parámetro de orden  $\Phi \neq 0$  es característico de la fase SF y  $\Phi = 0$  señala la fase MI. Notamos que el estado fundamental no será invariante bajo translaciones para *clusters* con más de un sitio.

Para obtener el diagrama de fases, barremos en el plano  $(t, \mu)$  procediendo en cada punto de la siguiente manera. Comenzamos con un valor inicial del parámetro de orden  $\Phi = 0$  y calculamos el estado  $|\psi_0\rangle$  como el mínimo del hamiltoniano que aparece en la ecuación (5.3). A continuación, recalculamos el parámetro de orden  $\Phi' = \langle \psi_0 | b_1 | \psi_0 \rangle$ . Si  $\Phi' = 0$ , el estado es MI. Un valor distinto,  $\Phi' \neq 0$ , indica que la solución no es autoconsistente con un parámetro de orden nulo y en consecuencia estamos en la fase SF.

En la figura 5.2 aparecen las fronteras para *clusters* de tamaños  $L = 1$  a  $L = 8$  para el caso 1D y el primer lóbulo  $n_0 = 1$ . Como referencia, también incluimos las fronteras calculadas con teoría de perturbaciones de orden 12 (Elstner y Monien, 1999). Cuando  $L > 1$ , el estado fundamental es capaz de describir ciertas correlaciones dentro de cada bloque a diferencia de la versión usual de campo medio en la que las correlaciones son nulas. En consecuencia, el estado MI no es igual al vector con densidad uniforme característico del límite  $t = 0$  y puede exhibir ciertas correlaciones. Aún así, la forma cualitativa del diagrama es muy parecida a la obtenida para el caso  $L = 1$ . Incluso el mayor de los casos tratados  $L = 8$  no consigue una mejora sustancial respecto a la aproximación de campo medio estándar. Esto parece indicar

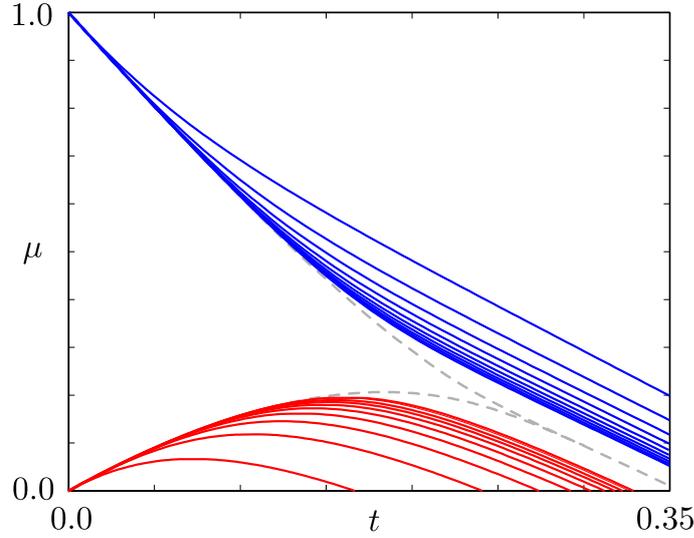


**Figura 5.2:** Diagrama de fases para el modelo BH en 1D en el plano  $(t, \mu)$  aproximado con campo medio en *cluster* finitos de diferente tamaño. La frontera que encierra la menor región MI corresponde a campo medio usual donde el tamaño del *cluster* es  $L = 1$ . Al aumentar  $L$  desde 1 hasta el mayor tamaño empleado 8, crece el área de la fase MI. Las líneas semi-continuas son los resultados de teoría de perturbaciones para orden 12 y se incluyen como referencia.

que campo medio en *cluster* finitos no aproxima eficientemente las correlaciones en un estado MI.

### 5.2.2. Diagonalización exacta

Un sistema de tamaño finito no puede exhibir una transición de fase de manera estricta, sino cambios (*crossover*) entre diferentes regímenes. A pesar de ello, el análisis del pseudo diagrama de fases aporta información al extrapolar al límite termodinámico (Elesin *et al.*, 1994). Utilizando condiciones de frontera periódicas y restringiendo la ocupación a un máximo de 4 bosones por sitio, diagonalizamos *clusters* de tamaño variable  $L = 2, 11$ . Para hallar las fronteras entre los dos regímenes



**Figura 5.3:** Diagrama de fases para el modelo BH en el plano  $(t, \mu)$  aproximado para sistemas finitos de diferente tamaño y condiciones de contorno periódicas en sistemas 1D. Los tamaños tratados van desde  $L = 2$  a  $L = 11$  donde la región MI siempre decrece al aumentar  $L$ . Las líneas semicontinuas representan los resultados de teoría de perturbaciones para orden 12 y las hemos incluido como referencia.

realizamos un barrido en el plano  $t$  y determinamos el valor de  $\mu$  crítico imponiendo:

$$E_p(t) - E_{n_0}(t) + \mu = 0, \quad (\text{partícula}),$$

$$E_h(t) - E_{n_0}(t) + \mu = 0. \quad (\text{hueco})$$

donde  $E_p(t)$ ,  $E_{n_0}(t)$  y  $E_h(t)$  son las energías del estado de menor energía para los sectores con  $L + 1$ ,  $L$  y  $L - 1$  partículas respectivamente. En la figura 5.3 vemos las fronteras calculadas para sistemas finitos de tamaño  $L = 1 \dots 11$ . Una indicación de que estas curvas no producen una transición de fase genuina es que las fronteras para las partículas y para los huecos no se tocan. Más aun, el fenómeno de reentrada aparece para todos los tamaños utilizados.

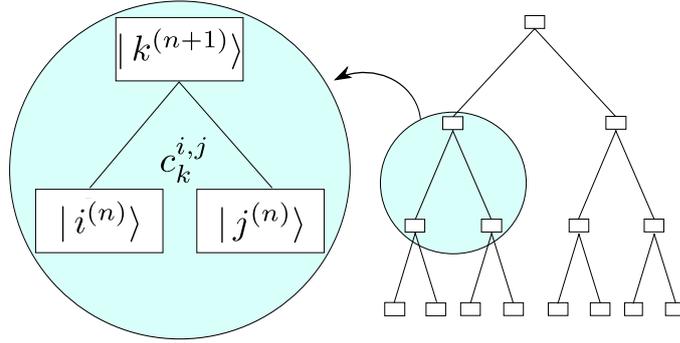
Tanto la diagonalización exacta como campo medio en *clusters* finitos están basados en un *ansatz* que repite infinitas veces un *cluster* de tamaño variable. Esto rompe la simetría translacional original del hamiltoniano BH. Sin embargo, ambos

métodos predican un diagrama de fases muy distinto. Vemos que el cálculo con diagonalización finita produce una sobrestimación sistemática de la fase MI para cualquier tamaño, mientras que campo medio en *cluster* finitos infravalora la misma. Una de las razones detrás de este comportamiento es que a diferencia de campo medio, la diagonalización exacta no es capaz de romper la simetría global  $U(1)$  del hamiltoniano, la cual examinamos en el capítulo 1. Esta conclusión se ve reforzada por resultados obtenidos con métodos más sofisticados como teoría de perturbación variacional (*variational cluster perturbation method*) (Koller y Dupuis, 2006). En este trabajo, se particiona el sistema en *clusters* finitos al igual que en el método de campo medio de varios sitios. En cambio, el *hopping* entre los diferentes bloques se trata con teoría de perturbaciones. De manera crucial, esto permite conservar la simetría  $U(1)$  del modelo BH tanto en los estados MI como en los SF. El diagrama de fases resultante es similar al que se obtiene con diagonalización exacta. En concreto, la región MI aparece sobrestimada y hay reentrada para cualquier tamaño del *cluster*.

### 5.2.3. Grupo de renormalización

En este apartado seguimos un tratamiento similar al usado por Singh y Rokhsar (1992). Estos autores estudian principalmente el diagrama de fases para el caso desordenado. El sistema puro es analizado utilizando el conjunto canónico y, por tanto, sin potencial químico mediante RG. Reformulamos esta aproximación para obtener el diagrama de fases en el plano  $(t, \mu)$  y para ello utilizamos el conjunto gran canónico.

Consideramos un esquema de RG en el espacio real basado en dividir el sistema 1D en bloques de dos sitios sin solapamiento entre sí. Simplificamos el problema estableciendo una ocupación máxima de 2 bosones por sitio. De esta forma, la base del espacio de Hilbert en cada sitio está formada por los estados sin ninguna partícula  $|0\rangle$ , con una partícula  $|1\rangle$  y con dos partículas  $|2\rangle$ . En esta base la contribución



**Figura 5.4:** A la izquierda, los estados de dos bloques de  $2^n$  sitios son utilizados para construir los estados renormalizados de un bloque con  $2^{n+1}$  sitios como  $|k^{(n+1)}\rangle = c_k^{i,j} |i^{(n)}\rangle |j^{(n)}\rangle$ , donde se emplea el convenio de la suma de Einstein y los índices  $i, j, k$  pueden tomar valores 0,1,2. Los coeficientes  $c_k^{i,j}$  son obtenidos diagonalizando el hamiltoniano renormalizado para dos bloques de  $2^n$  sitios, como explicamos en el texto principal. Repitiendo este proceso obtenemos estados renormalizados con la estructura que aparece a la derecha y que recuerda la forma de las ramas de un árbol.

cinética  $K$  para el hamiltoniano de cada uno de los bloques es:

$$\begin{aligned}
 K = & -t_h(|01\rangle\langle 10| + \text{h.c.}) \\
 & -t_o(|11\rangle\langle 20| + |11\rangle\langle 02| + \text{h.c.}) \\
 & -t_p(|21\rangle\langle 12| + \text{h.c.})
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

donde  $t_h$  y  $t_p$  especifican la amplitud de transferencia para una partícula o hueco respectivamente. La magnitud  $t_o$  es la amplitud para la creación o destrucción de un par partícula-hueco a partir de la configuración con densidad uniforme. Cuando construimos  $K$  a partir del hamiltoniano del modelo BH, tendremos que  $t_h = t_o/\sqrt{2} = t_p/2 = t$ . Esto indica que el sistema no tiene simetría partícula-hueco. Añadiendo los términos de interacción y potencial químico al operador cinético  $K$ , construimos el hamiltoniano del bloque  $H_b$ .

Para comenzar el esquema de renormalización, diagonalizamos el hamiltoniano del bloque  $H_b$  e identificamos auto estados  $|0'\rangle, |1'\rangle$  y  $|2'\rangle$  que representan los

estados de menor energía con  $N_p = L - 1$ ,  $N_p = L$  y  $N_p = L + 1$ , donde  $N_p$  es el número de bosones por bloque y  $L$  el número de sitios en el bloque. Al tratar con un *cluster* de dos sitios podemos obtener los estados de manera analítica:

$$|0'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \quad (5.5)$$

$$|1'\rangle = \cos(\theta)|11\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\sin(\theta)(|02\rangle + |20\rangle), \quad (5.6)$$

$$|2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|12\rangle + |21\rangle), \quad (5.7)$$

y sus correspondientes energías son:

$$E_{0'} = -\mu - t_h, \quad (5.8)$$

$$E_{1'} = -2\mu - \sqrt{2}t_o \sin(2\theta) + U \sin^2(\theta), \quad (5.9)$$

$$E_{2'} = -3\mu - t_p + U, \quad (5.10)$$

donde  $\theta = \frac{1}{2} \tan^{-1}(2\sqrt{2}t_o/U)$ . El espacio de Hilbert renormalizado está expandido por los vectores  $\{|0'\rangle, |1'\rangle, |2'\rangle\}$ . Renormalizamos el hamiltoniano restringiéndolo a este subespacio y redefiniendo los parámetros del mismo como:

$$\mu' = E_{1'} - E_{0'} = \mu - t_h[1 - 2\sin(2\theta)] + U \sin^2(\theta), \quad (5.11)$$

$$U' = E_{2'} + E_{0'} - 2E_{1'} = U \sec(2\theta) - t_p - t_h, \quad (5.12)$$

y las nuevas amplitudes de *hopping* son:

$$t'_h = -\langle 0'1' | K | 1'0' \rangle = \frac{t'_h}{2} \cos^2 \theta + \frac{t_p}{4} \sin^2 \theta + \frac{t_o}{2\sqrt{2}} \sin 2\theta, \quad (5.13)$$

$$t'_o = -\langle 1'1' | K | 2'0' \rangle = \frac{t'_o}{2} \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta\right) + \frac{t_h + t_p}{2\sqrt{2}} \cos \theta \sin \theta, \quad (5.14)$$

$$t'_p = -\langle 2'1' | K | 1'2' \rangle = \frac{t_o}{\sqrt{2}} \sin \theta \cos \theta + t_p \cos^2 \theta + \frac{t_h}{2} \sin^2 \theta. \quad (5.15)$$

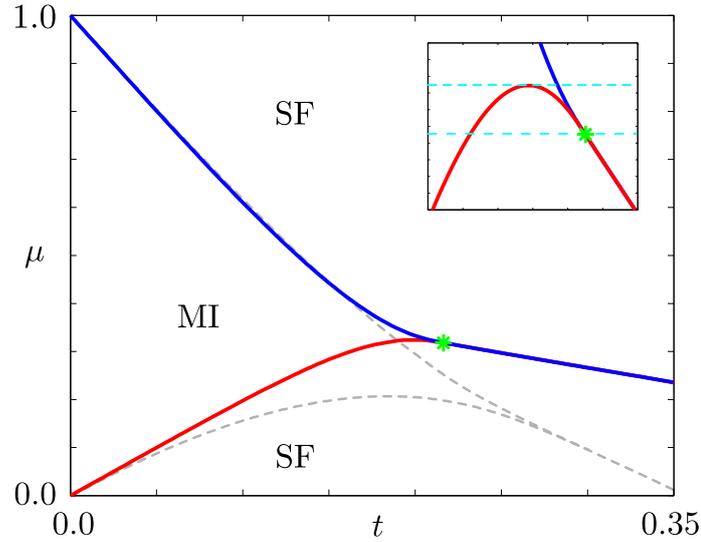
Al repetir la renormalización de los estados estamos aproximando de forma variacional el estado fundamental por un tensor en forma de árbol (*tensor tree network*) TTN como explicamos en la figura 5.4. Después de  $n$  pasos de renormalización,  $|1^{(n)}\rangle$  representa un estado con  $N_p = L$  bosones en una cadena de  $L = 2^n$  sitios. Por otro lado,  $|2^{(n)}\rangle$  y  $|0^{(n)}\rangle$  son estados para un sistema del mismo tamaño pero

con  $N_p = L + 1$  y  $N_p = L - 1$  bosones cada uno. En este esquema de RG sólo obtenemos aproximaciones para el estado MI y para estados SF que poseen un número de partículas  $N_p = L \pm 1$ . Por otro lado, las simetrías de estos tres estados son las mismas que las del hamiltoniano de BH, esto es, son invariantes bajo translaciones y conservan la simetría correspondiente al grupo  $U(1)$ , explicada en el capítulo 1.

El proceso de renormalización converge normalmente después de  $n \sim 100$  pasos. El resultado es un hamiltoniano con simetría partícula-hueco  $t_h^{(n)} = t_o^{(n)} = t_p^{(n)} = t^{(n)}$  que puede haber fluido a varios puntos fijos atractivos. La renormalización de un punto en la región MI fluye a algún punto en la línea  $(t/U)^{(n)} = 0$ . Los estados en esta línea no contienen ninguna correlación entre diferentes sitios. Esto implica que el proceso de renormalización ha eliminado las correlaciones de corto alcance. Por otro lado, un estado SF fluye hacia  $(t/U)^{(n)} = 0.5165$ , aunque este último punto atractivo es artificial. De hecho, al haber restringido severamente la ocupación a  $N_p = L \pm 1$  en el SF, no esperamos que este método produzca resultados precisos para un estado genérico de esta fase. Aún así, la localización de la transición viene dada por la competición entre los estados MI y los estados SF que precisamente exhiben ocupación  $N_p = L \pm 1$ . Por esta razón, esperamos obtener resultados razonables al localizar la región crítica.

Para aproximar el diagrama de fases con RG debemos encontrar los puntos fijos inestables de las ecuaciones (5.11) a (5.15). En la renormalización los parámetros de *hopping* fluyen al mismo valor. Así, las ecuaciones de RG independientes pueden ser reducidas a tres. Éstas son las ecuaciones (5.11), (5.12) y (5.13). Fijando la escala de energías a  $U = 1$ , reducimos a dos las ecuaciones independientes: (5.11) y (5.13). Aún así, encontrar los puntos fijos de un sistema de dos ecuaciones no lineales de forma analítica puede ser complicado. Para evitar estas dificultades, procedemos de forma numérica.

Detectamos la transición calculando los puntos en los que el gap en la energía entre el estado fundamental con  $N_p = L$  partículas y los estados excitados con  $N_p = L \pm 1$  se cierra. Barremos en el plano  $(t, \mu)$  implementando en cada punto el proceso de renormalización e identificamos los puntos de la transición como aquellos



**Figura 5.5:** Diagrama de fases para el modelo BH 1D en el plano  $(t, \mu)$  calculado mediante RG. El símbolo \* marca la localización de la transición KT que ocurre en  $t_{KT} = 0.215$  (Singh y Rokhsar, 1992). El recuadro es una ampliación de la región cercana a este punto crítico y muestra que el diagrama posee la característica de reentrada. Las líneas semicontinuas representan los resultados de teoría de perturbaciones para orden 12 y están incluidas como referencia.

que cumplen  $E_1 - E_0 = 0$  (frontera para la partícula) o  $E_2 - E_1 = 0$  (frontera para el hueco). El diagrama de fases calculado de esta forma aparece en la figura 5.5. En esta figura también hemos incluido el punto KT, el cual puede ser encontrado analíticamente como un punto fijo inestable localizado en  $t_{KT} = 0.215$  (Singh y Rokhsar, 1992). En el recuadro aparece un zoom de la región cercana a este punto crítico. En él podemos ver que la reentrada aparece cerca del punto KT.

Utilizando los resultados para los métodos tratados podemos concluir ciertas características que son necesarias a la hora de describir la reentrada. Este fenómeno siempre está presente en *clusters* finitos. Por ello, las correlaciones de corto alcance parecen jugar un papel determinante. En RG hemos restringido la ocupación a 2 bosones por sitio. Así, no parece imprescindible incluir mayores ocupaciones para obtener un diagrama de fases reentrante. Notamos que estas características son

menos exigentes que las necesarias para describir el punto KT. En este último caso, ocupaciones mayores que 3 bosones por sitio y correlaciones de largo alcance son necesarios.

Las correlaciones son el ingrediente fundamental a la hora de describir la fase MI. A su vez, la habilidad para exhibir correlaciones depende del grado de entrelazado del sistema,  $\chi$ . Aún así, un vector con gran entrelazado puede no aproximar bien el estado fundamental si no se ha producido una buena minimización. Es importante encontrar un algoritmo eficiente de minimización de la energía dentro de la familia de estados con un entrelazado determinado  $\chi$ , es decir, dentro de la familia de MPS de dimensión  $\chi$ . Por ejemplo, la estructura de TTN del estado fundamental para la aproximación de RG permite al sistema exhibir estados entrelazados y por tanto contiene correlaciones cuánticas. Aún exhibiendo reentrada, este método no produce un diagrama cuantitativamente correcto. Esto es así aunque, presumiblemente, RG produce estados con gran entrelazado. En la próxima sección empleamos iTEBD para encontrar la mejor aproximación para el estado fundamental empleando MPS con una dimensión de las matrices,  $\chi$ , dada. También veremos como una descripción correcta del diagrama de fases, excepto el punto KT, es posible para valores de  $\chi$  relativamente bajos.

### 5.3. Entrelazado finito

En esta sección, analizamos los cambios del sistema ante un incremento gradual del entrelazado permitido entre las diferentes partes del sistema. Utilizamos la simetría translacional del modelo BH para trabajar en el límite termodinámico. En principio, podríamos utilizar tanto iDMRG como iTEBD para obtener ese límite. La convergencia es más rápida con iDMRG aunque este método puede no llegar al mínimo absoluto cuando el entrelazado es pequeño (Dukelsky *et al.*, 1998). Por esta razón, utilizamos iTEBD que converge al mínimo absoluto independientemente del entrelazado que permitimos en el sistema. Así nos aseguramos que los resultados muestran la mejora al incrementar el entrelazado y no se introducen efectos espureos

debidos a una subóptima convergencia del método.

Para obtener los resultados que mostramos en esta sección, hemos restringido el número máximo de bosones por sitio a 4. Esto es suficiente para estudiar el diagrama de fases para densidades cercanas a la unidad. La convergencia con iTEBD se ha realizado decreciendo el paso temporal gradualmente hasta  $\delta t = 10^{-5}$ . De esta forma, el MPS que obtenemos tras la minimización cumple las condiciones canónicas descritas en el capítulo 2.

En lo que sigue, utilizamos  $\chi$  para referirnos a la dimensión de las matrices del MPS que utilizamos. Recordamos que un MPS con dimensión  $\chi$  tiene un rango de Schmidt menor o igual que  $\chi$ . En consecuencia, esta cantidad cuantifica, en cierto modo, la cantidad de entrelazado permitido al sistema. Abusando del lenguaje, algunas veces nos referiremos a la dimensión de las matrices,  $\chi$ , como el entrelazado del sistema.

Nuestro principal objetivo es estudiar la evolución del diagrama de fases y la aparición de reentrada cuando aumentamos el entrelazado desde el límite  $\chi = 1$ . También utilizamos datos obtenidos a entrelazado finito para extrapolar la localización del punto KT cuando  $\chi \rightarrow \infty$ . Antes de llevar a cabo estos cálculos, comenzamos analizando la naturaleza de las transiciones de fase y su caracterización para  $\chi$  finito.

### 5.3.1. Transición de fase

En un punto crítico la longitud de correlación,  $\xi$ , es estrictamente infinita. Esta divergencia es difícil de reproducir para la mayoría de los métodos numéricos existentes. Por ejemplo, para un cálculo en un sistema de tamaño finito  $L$ , la longitud de correlación nunca puede exceder ese valor,  $\xi < L$ , y no podremos describir un punto crítico. Al emplear iTEBD no tendremos este problema pues trabajamos directamente en el límite termodinámico. Aún así, este algoritmo no es capaz de reproducir una transición de fase genuina. Esto se debe a que un entrelazado finito limita la longitud de correlación del sistema, como vamos a ver a continuación.

Calabrese y Cardy (2004) y Vidal *et al.* (2003) estudian la dependencia de la entropía de Von Neumann y la longitud de correlación cerca de un punto crítico utilizando teoría de campos conforme. Suponemos un sistema 1D infinito en una fase en la que las correlaciones decaen exponencialmente. La relación entre la entropía y la longitud de correlación,  $\xi$ , en las proximidades de la criticalidad es:

$$S_{\frac{1}{2}} \sim \frac{c}{6} \ln \left( \frac{\xi}{a} \right), \quad (5.16)$$

donde  $S_{\frac{1}{2}}$  es la entropía de Von Neumann de cada uno de los dos bloques semifinitos en los que dividimos el sistema,  $c$  es la carga central correspondiente a la teoría conforme que describe el punto crítico y  $a$  es el espaciado de la red.

Por otro lado, obtenemos el máximo absoluto de la entropía que un estado MPS de dimensión  $\chi$ , finita, es capaz de exhibir. Suponemos que este estado tiene un rango de Schmidt igual a  $\chi$ , de forma que puede ser expresado como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha} |\Phi_{\alpha}^{[L]}\rangle |\Phi_{\alpha}^{[R]}\rangle, \quad (5.17)$$

donde  $\lambda_{\alpha}$  representa los coeficientes de Schmidt asociado a los vectores  $|\Phi_{\alpha}^{[L]}\rangle$  correspondiente a la parte izquierda del sistema y  $|\Phi_{\alpha}^{[R]}\rangle$  a la parte derecha. La entropía máxima se obtiene cuando todos los coeficientes de Schmidt son iguales:  $\lambda_{\alpha} = \lambda$  para  $\alpha = 1 \dots \chi$ . Teniendo en cuenta la ortonormalidad del estado en la ecuación (5.17) encontramos que  $\lambda = \chi^{-1/2}$ . Deducimos que una cota superior a la entropía máxima que este estado es capaz de describir es  $S_{\frac{1}{2}}(\chi) \leq \ln \chi$ . En un punto crítico sabemos que la entropía ha de divergir en el límite  $\chi \rightarrow \infty$ , pero nunca lo podrá hacer más rápido que esta ley. Asumimos que esta divergencia viene dada por una parte singular (Eisert *et al.*, 2010):

$$S_{\frac{1}{2}} \sim \frac{c\kappa}{6} \ln \chi. \quad (5.18)$$

donde  $\kappa$  ha de ser un número real tal que  $c\kappa/6 < 1$ . En concreto,  $\kappa$  controla la divergencia de la entropía en las proximidades de un punto crítico y parece razonable pensar que tan solo dependerá de la naturaleza del mismo. Igualando la parte singular de la entropía de Von Neumann en las ecuaciones (5.16) y (5.18), obtenemos que la longitud de correlación en el punto crítico diverge como:

$$\xi_c(\chi) \sim \chi^{\kappa}, \quad (5.19)$$

Al limitar  $\chi$  no puede haber divergencia en la longitud de correlación y la transición entre las fases ocurre en puntos pseudo-críticos para los cuales  $\xi$  es máxima.

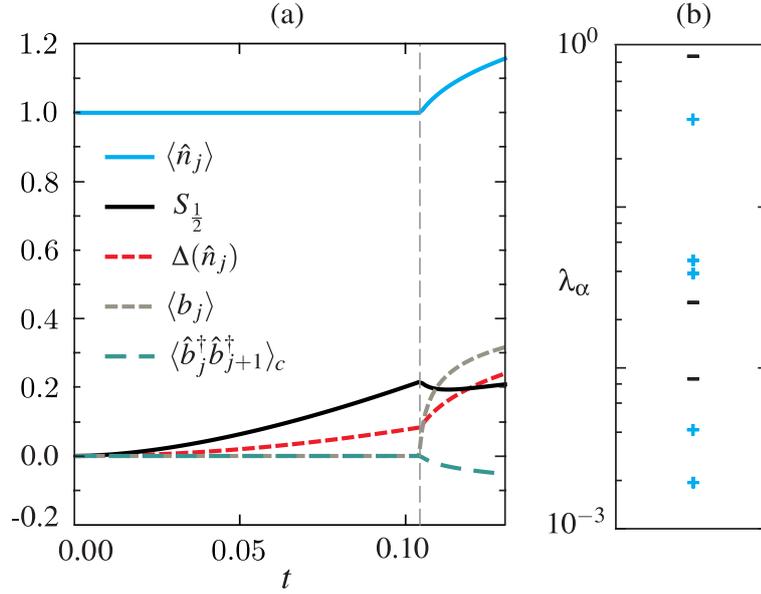
En definitiva, hemos encontrado que las transiciones desde una fase con correlaciones que decaen exponencialmente a otra cualquiera no ocurren en un punto crítico genuino cuando el entrelazado es finito. Las transiciones aparecen en una región cercana a éste, donde la longitud de correlación está caracterizada por la relación que aparece en la ecuación (5.19). Este resultado es muy útil a la hora de obtener información acerca del punto crítico utilizando cálculos a  $\chi$  finito.

### 5.3.2. Marcas de la criticalidad

A pesar de no simular una divergencia en la longitud de correlación, un cálculo a entrelazado  $\xi$  produce transiciones de fase con cambios abruptos en ciertas observables. Para ejemplificar este punto, en el panel (a) de la figura 5.6 hemos representado diferentes magnitudes al variar el *hopping* y fijando el potencial químico a  $\mu = 0.6$ . Entre estas magnitudes hay algunas que corresponden a observables locales:  $\langle n_j \rangle$ , su varianza  $\Delta(n_j) = \langle n_j^2 \rangle - \langle n_j \rangle^2$ , el parámetro de orden  $\langle b_j^\dagger \rangle$ , así como correlaciones entre primeros vecinos  $\langle b_j^\dagger b_{j+1}^\dagger \rangle_c = \langle b_j^\dagger b_{j+1}^\dagger \rangle - \langle b_j^\dagger \rangle \langle b_{j+1}^\dagger \rangle$ . También hemos utilizado cantidades globales como la entropía de Von Neumann de la cadena seminfinita,  $S_{1/2}$ . En todas ellas podemos ver un cambio abrupto en el mismo punto,  $t = 0.105$ , señalando la transición de la fase MI a la SF. Este resultado ilustra el desarrollo anterior donde deducimos la existencia de puntos pseudo críticos en los que ocurre la transición cuando el entrelazado está limitado.

Entre las cantidades que hemos representado en la figura 5.6 está el parámetro de orden SF,  $\langle b_i \rangle$ . Una característica importante de los cálculos a entrelazado finito es que permiten la rotura de simetrías en la fase ordenada, al igual que ocurre en la aproximación de campo medio. De hecho, veremos a continuación que el caso  $\chi = 1$  produce resultados idénticos a los de esta aproximación. Esto se debe a que la familia de estados considerada en campo medio es, en realidad, la familia de MPS de dimensión  $\chi = 1$ .

En lo que sigue, elegimos  $\langle n \rangle$  para caracterizar la transición. Al conocer el valor



**Figura 5.6:** (a) Diferentes magnitudes para el caso  $\chi = 3$  en función del parámetro de *hopping* para un potencial químico fijo  $\mu = 0.60$ . Las magnitudes representadas son: la ocupación por sitio  $\langle n_j \rangle$ , su varianza  $\Delta(n_j)$ , el parámetro de orden  $\langle b_j^\dagger \rangle$ , así como la correlación a primeros vecinos  $\langle b_j^\dagger b_{j+1}^\dagger \rangle_c$ , y la entropía de Von Neumann de la cadena seminfinita  $S_{\frac{1}{2}}$ . Todas estas cantidades muestran un cambio abrupto en el mismo punto  $t = 0.105$  y pueden ser usadas para detectar la transición. (b) El espectro de Schmidt,  $\lambda_\alpha$ , aparece para  $\chi = 13$  en el punto  $\mu = 0.2$  y  $t = 0.22$  que pertenece a la fase MI. Los coeficientes no degenerados se representan como ‘-’, mientras que los degenerados dos veces por ‘+’.

de este observable en la fase MI,  $\langle n \rangle = 1$ , localizar un punto crítico es numéricamente menos costoso. Dado un valor de *hopping* fijo, extrapolamos varios valores de la ocupación en función de  $\mu$  en la fase SF para hallar el punto donde  $\langle n \rangle = 1$ . De esta forma podemos localizar los puntos donde ocurre la transición sin tener que realizar un barrido en  $\mu$  para cada valor de  $t$ .

Para cálculos más allá de campo medio hemos de tener cuidado en los vectores de Schmidt que despreciamos. De hecho, el algoritmo iTEBD puede fallar al minimizar el estado fundamental para ciertos valores de  $\chi$ . Este fallo está causado por

la estructura del espectro de los coeficientes de Schmidt o espectro de Schmidt. En el panel (b) de la figura 5.6 podemos ver estos coeficientes para un punto del MI,  $t = 0.22$  y  $\mu = 0.20$ , utilizando entrelazado  $\chi = 13$ . Como podemos observar, los únicos autovalores que no están degenerados son el primero, octavo y noveno. A la hora de minimizar, hemos de elegir el entrelazado respetando esta estructura de degeneraciones, pues si no incluimos todos los vectores de Schmidt de un subespacio degenerados, el algoritmo iTEBD puede no converger satisfactoriamente. Para evitar estos problemas utilizamos valores MPS de dimensión  $\chi = 1, 3, 5, 7, 8, 9, 11, \dots$  a la hora de calcular el diagrama de fases.

### 5.3.3. Espectro de Schmidt

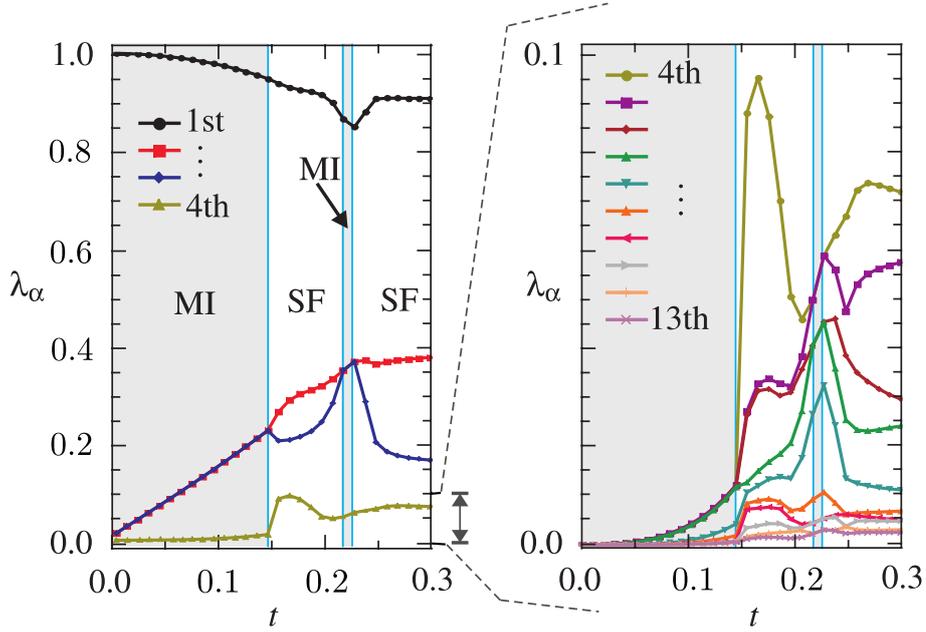
A continuación exploramos formas alternativas de caracterizar la transición. El espectro de Schmidt ha sido utilizado para detectar transiciones entre fases topológicas. En estas fases, existen diferentes estado fundamentales que no están conectados por una operación de simetría del sistema sino que su clasificación obedece argumentos topológicos (Wen *et al.*, 1989). La teoría de Landau de rotura de simetrías espontánea no predice transiciones entre fases topológicamente triviales a fases topológicas.

Pollmann *et al.* (2010) estudian como las degeneraciones del espectro de Schmidt en la fase de Haldane (Haldane, 1988) son consecuencia de la topología y colapsan cuando hay una transición a otra fase topológicamente trivial. En el caso que nos ocupa no tratamos con fases topológicas. A pesar de ello, la transición de la fase MI a la SF también puede ser caracterizada por el colapso de la estructura de degeneraciones del espectro de Schmidt. Aunque en nuestro problema, el colapso de la estructura de degeneración del espectro es consecuencia de la rotura espontánea de simetrías.

Consideramos la inversión espacial  $\mathcal{I}$  respecto a un *link* de la cadena 1D:

$$\mathcal{I} \left( |\psi^{[L]}\rangle |\psi^{[R]}\rangle \right) = |\psi^{[R]}\rangle |\psi^{[L]}\rangle \quad (5.20)$$

donde  $|\phi^{[L]}\rangle$  especifica el estado de la parte izquierda del sistema respecto al punto



**Figura 5.7:** Espectro de Schmidt  $\lambda_\alpha$  representado en función del *hopping* para un valor del potencial químico constante  $\mu = 0.20$ . A la izquierda aparecen los cuatro coeficientes de Schmidt mayores, mientras que en la izquierda podemos ver los coeficientes desde el cuarto al decimotercero. La región sombreada indica los valores de  $t$  en los que el estado fundamental aproximado es un MI.

de inversión y  $|\phi^{[R]}\rangle$  de la parte derecha. Al aplicar este operador sobre el estado fundamental en la forma de Schmidt dado en la ecuación (5.17), obtendremos que:

$$\mathcal{I}(|\Psi\rangle) = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_\alpha \mathcal{I}(|\Phi_\alpha^{[L]}\rangle|\Phi_\alpha^{[R]}\rangle). \quad (5.21)$$

En la fase MI la presencia del gap hace que el estado fundamental conserve todas las simetrías del sistema y en concreto, la invarianza bajo inversión espacial  $\mathcal{I}$ . Cómo la descomposición de Schmidt ha de ser única salvo rotaciones en los espacios degenerados de los coeficientes de Schmidt, deducimos que el operador  $\mathcal{I}$  ha de ser

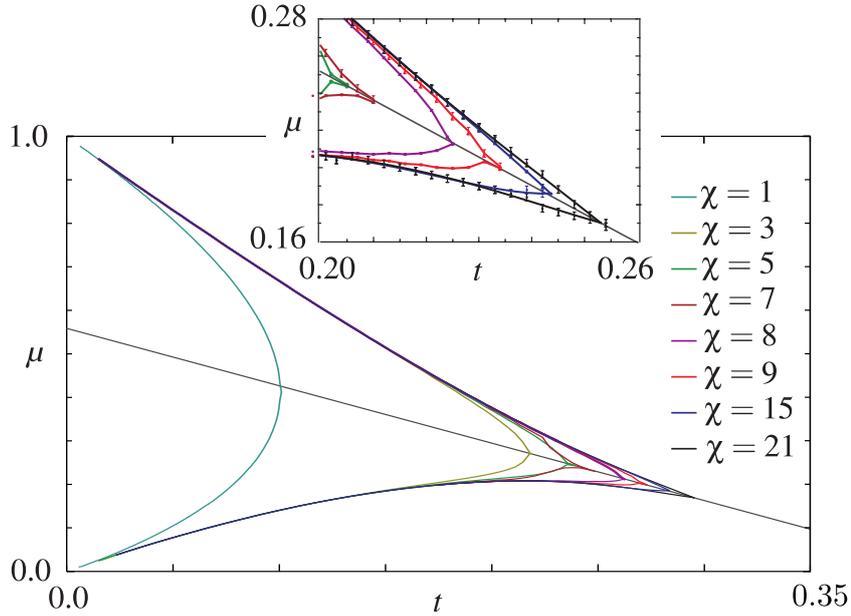
diagonal en bloques en estos subespacios.

$$\mathcal{I} = \left( \begin{array}{c|ccc} \mathcal{I}_{\lambda_1} & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & \mathcal{I}_{\lambda_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & & \mathcal{I}_{\lambda_k} \end{array} \right), \quad (5.22)$$

En resumen, en la fase MI los autoestados de Schmidt invariantes bajo inversión no tienen porque estar degenerados. En cambio, los estados que no respeten  $\mathcal{I}$  han de estar degenerados en el coeficiente de Schmidt. Además, restringir todos los vectores de Schmidt a estados invariantes bajo inversión produciría un estado fundamental pobre. Es por ello que esperamos que estas degeneraciones debidas a la inversión ocurran en la fase MI. De este modo relacionamos la estructura de degeneraciones que aparece en la fase MI en términos de una simetría original del hamiltoniano.

En la fase SF el gap desaparece y el estado fundamental no tiene por qué respetar las simetrías originales del hamiltoniano BH. Así el razonamiento anterior falla y no hay ninguna restricción que fuerce a tener degeneraciones en los coeficientes de Schmidt. Por tanto, la diferencia en la estructura del espectro de Schmidt en ambas fases ha de ser nítida. La fase MI se caracterizará por la existencia de cierto número de coeficientes degenerados que colapsarán a un espectro sin degeneraciones en la transición a la fase SF. Esto concuerda muy bien con los datos numéricos que hemos obtenido. En la figura 5.7 hemos representado los coeficientes de Schmidt para el caso  $\chi = 13$  al variar  $t$  para  $\mu = 0.2$ . En esta figura podemos ver como la estructura de degeneraciones se conserva durante toda la fase MI mientras que en el SF no hay degeneración en ninguno de los coeficientes de Schmidt (salvo degeneraciones accidentales).

Otro detalle importante que podemos apreciar en la figura 5.7 es la aparición de reentrada. Así,  $\chi = 13$  parece ser suficiente para que este fenómeno aparezca. En lo que sigue vamos a analizar más detenidamente la evolución del diagrama de fases para diferentes valores del entrelazado.

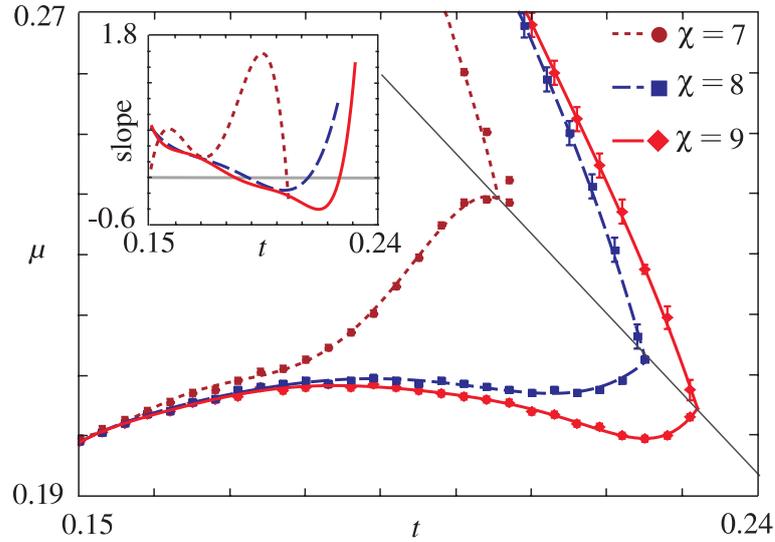


**Figura 5.8:** Diagrama de fases del modelo BH en sistemas 1D para una secuencia de entrelazados crecientes  $\chi = 1$  a  $\chi = 21$ . La fase MI aumenta gradualmente conforme  $\chi$  aumenta. El panel pequeño es un aumento de la zona cercana al punto KT. En muy buena aproximación vemos que la línea recta  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$  interseca la punta de todas las fronteras.

### 5.3.4. Diagrama de fases en función del entrelazado

Utilizando los cambios abruptos en la densidad  $\langle n \rangle$ , calculamos el lóbulo de la fase MI para diferentes valores del entrelazado como se muestra en la figura 5.8. Cuando  $\chi$  aumenta vemos que la fase MI también lo hace desde el caso de campo medio que corresponde a  $\chi = 1$ . En consecuencia, todos los cálculos a  $\chi$  finito subestiman la región MI como ocurría en las dos aproximaciones de campo medio vistas con anterioridad.

De la figura 5.8 concluimos que un entrelazado relativamente bajo,  $\chi \sim 21$ , es suficiente para describir el diagrama de fases de manera cuantitativa, excepto una región muy próxima al punto KT. De hecho, la mejora más substancial de la región MI ocurre al incrementar desde el caso de  $\chi = 1$  a  $\chi = 3$ . En este último caso, el área de la fase MI es aproximadamente el 95% del área total. Esto ocurre pese a



**Figura 5.9:** Diagrama de fases del modelo BH en sistemas 1D para los casos  $\chi = 7, 8, 9$ . Las fronteras para el hueco y la partícula han sido ajustadas a un polinomio de orden 4 y las derivadas de estos ajustes aparece en el panel secundario. En éste apreciamos que los casos  $\chi = 8, 9$  poseen regiones con pendientes negativas señalando así la reentrada. Por el contrario, el caso  $\chi = 7$  sólo muestra una pequeña región de pendiente negativa cerca de la punta. En la figura principal también hemos incluido la línea  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$  la cual interseca en muy buena aproximación las puntas de los lóbulos para los tres entrelazados considerados.

que un estado fundamental con ese entrelazado no es capaz de describir longitudes de localización mayores que  $\xi \sim 2$  en unidades del espaciado de la red. Más aún, el caso con  $\chi = 3$  tiene muchos menos parámetros libres que el cálculo exacto realizado para el campo medio desacoplado de tamaño  $L = 8$ . Esto ilustra la potencia de un MPS infinito para describir los grados de libertad relevantes.

En la figura 5.8 podemos apreciar la evolución de las fronteras en una región cercana al punto crítico KT. Vemos como éstas evolucionan desde la forma redondeada característica de la aproximación de campo medio a una más puntiaguda. También podemos observar que la línea recta  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$  interseca todas estas puntas en muy buena aproximación. Esta propiedad va a ser muy útil en breve, pues

nos permitirá una localización precisa del punto KT mediante un escalado de datos con entrelazado finito. La reentrada aparecerá una vez la punta se haya movido a valores suficientemente grande de  $t$  en esa línea.

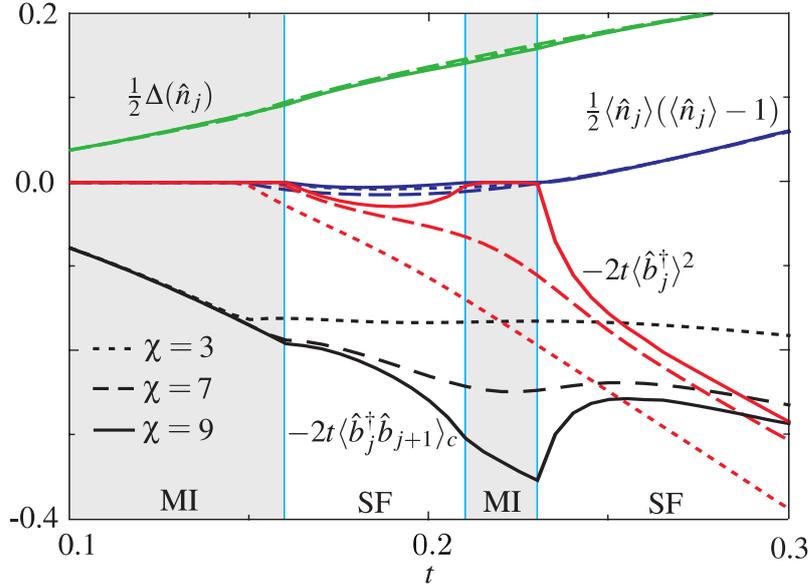
A continuación determinamos el entrelazado mínimo requerido para que la reentrada aparezca. Para ello, ampliamos los caso  $\chi = 7, 8$  y  $9$  en el panel principal de la figura 5.9. En el panel secundario podemos ver la pendiente de la frontera para el hueco. Observamos que los casos  $\chi = 8, 9$  muestran claramente la reentrada mientras que para el caso  $\chi = 7$  tan solo aparece una pendiente negativa en una región muy próxima a la punta. En consecuencia afirmamos que un MPS de dimensión  $\chi = 8$  es capaz de describir un diagrama de fases reentrante. Examinando la estructura de degeneraciones de Schmidt en la figura 5.6 (b) vemos que, curiosamente, el coeficiente de Schmidt correspondiente a  $\chi = 8$  es el primero no-degenerado después de las 3 parejas degeneradas que siguen al primer coeficiente de Schmidt.

Analizamos los mecanismos que dan lugar a la reentrada. Para ello, escribimos la energía por sitio del modelo BH como:

$$\epsilon = -t \left( \langle b_j^\dagger b_{j+1} \rangle_c + \langle b_j^\dagger \rangle^2 + \text{c.c.} \right) - \mu \langle n_j \rangle + \frac{1}{2} \Delta \langle n_j \rangle + \frac{1}{2} \langle n_j \rangle (\langle n_j \rangle - 1), \quad (5.23)$$

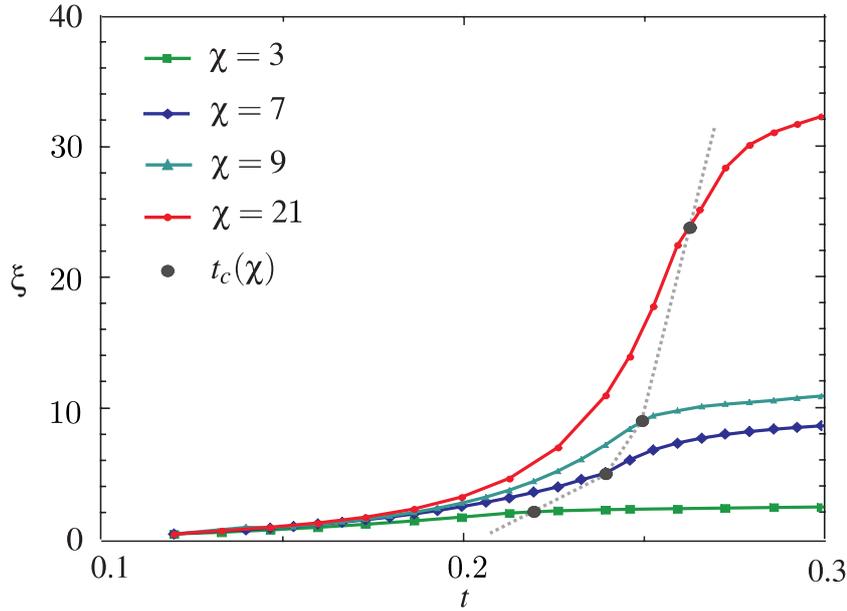
De esta forma exponemos las dos contribuciones cinéticas de la energía: mediante rotura de simetrías que implica  $\langle b_j^\dagger \rangle \neq 0$  y mediante las correlaciones de sitios cercanos,  $\langle b_j^\dagger b_{j+1} \rangle_c \neq 0$ . Cuando cualquiera de estas contribuciones es distinta de cero inducen una varianza en la ocupación distinta de cero,  $\Delta \langle n_j \rangle \neq 0$ . En la fase SF todas las contribuciones podrán ser distintas de cero. Sin embargo, en la fase MI el estado conserva el número de partículas y tendremos que  $\langle b_j^\dagger \rangle = 0$ . En concreto, en el estado MI con entrelazado unidad todos los sitios contienen un número bien definido e igual de partículas,  $n_0$ . Este estado no contiene ninguna contribución cinética a la energía. Por el contrario, el SF puede reducir su energía rompiendo la simetría en el caso  $\chi = 1$ . Esta es la razón por la que  $\chi = 1$  produce una sobrestimación de la fase SF.

Cuando  $\chi > 1$ , no es tan fácil analizar los diferentes términos que contribuyen a la energía. En la figura 5.10 hemos representado las diferentes contribuciones a la energía que aparecen en la ecuación (5.23) para entrelazado  $\chi = 3, 7$  y  $9$  a lo largo de



**Figura 5.10:** Diferentes contribuciones a la energía por sitio que aparecen en la ecuación (5.23) para  $\chi = 3$  (línea punteada),  $\chi = 7$  (línea discontinua) y  $\chi = 9$  (línea continua). En concreto,  $\frac{1}{2}\Delta(n_j)$  es la varianza de la ocupación de cada sitio y es distinta de cero siempre y cuando haya fluctuaciones en la ocupación. En cambio,  $\langle n_j \rangle (\langle n_j \rangle - 1)$  es diferente de cero tan sólo en la fase SF debido a una ocupación promedio diferente a la unidad. La contribución cinética está compuesta por el parámetro de orden SF,  $\langle b_j^\dagger \rangle^2$ , y por las correlaciones,  $\langle b_j^\dagger b_{j+1} \rangle_c$ .

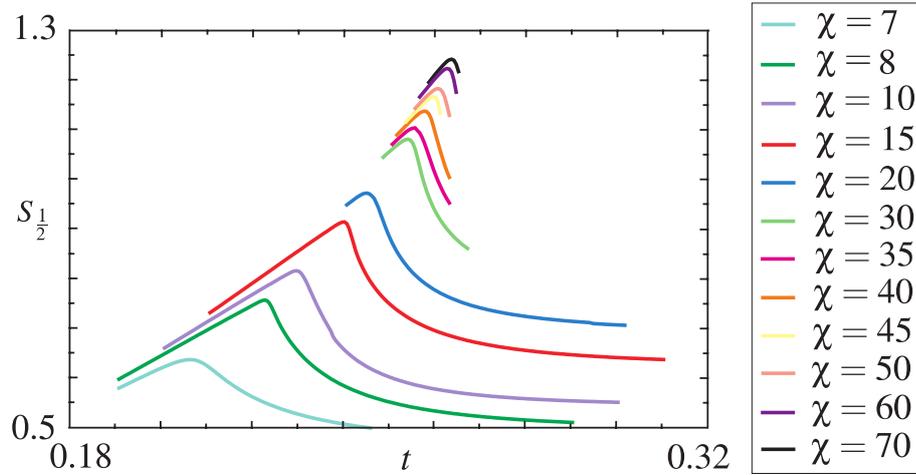
una línea de potencial químico constante  $\mu = 0.204$  para la cual la reentrada aparece cuando  $\chi = 9$ . En primer lugar, la energía debida a las fluctuaciones en la ocupación son muy similares para los diferentes valores del entrelazado que se presentan. Estas energías crecen de manera monótona conforme  $t$  aumenta e independientemente de la fase. Así que la mayor diferencia viene dada por la contribución cinética. En concreto, la reentrada coincide con una supresión completa del parámetro de orden,  $\langle b_j^\dagger \rangle = 0$ , y con un incremento significativo de la correlación  $\langle b_j^\dagger b_{j+1} \rangle_c \neq 0$ . Es decir, el fenómeno estudiado aparece cuando el estado fundamental es capaz de exhibir una cantidad mínima de correlaciones y para ello es necesario un entrelazado mínimo,  $\chi = 8$ . De hecho, para  $\chi = 3$  vemos que la contribución a la energía de las



**Figura 5.11:** Longitud de correlación  $\xi$  en función del *hopping*. El potencial químico para cada valor de  $t$  se ha escogido siguiendo la línea  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$ . El cálculo se ha realizado para valores del entrelazado  $\chi = 3, 7, 9, 21$ . En la leyenda indicamos a que curva corresponde cada caso. La estimación para los distintos puntos críticos KT está señalada mediante el símbolo  $\bullet$ . La línea de puntos une los puntos KT para cada valor de  $\chi$  y sirve como guía visual.

correlaciones satura para  $t < 0.15$  lo que imposibilita la reentrada a la fase MI.

A continuación, estimamos la longitud de correlación mínima necesaria para describir la reentrada. En la figura 5.11, podemos ver la longitud de correlación del estado fundamental del modelo BH en función de  $t$ . El valor de  $\mu$  se ha escogido en la línea descrita por  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$ . Los puntos KT están contenidos en buena aproximación en esta línea, al menos para  $\chi \leq 21$ . De abajo a arriba, cada una de las líneas en esta figura corresponde a  $\chi = 3, 7, 9, 21$ . La línea punteada une las distintas estimaciones del punto KT para cada uno de los valores de  $\chi$ . Para el caso  $\chi = 9$ , donde aparece la reentrada, la longitud de correlación es  $\xi \leq 10$ , en unidades del espaciado de la red. Concluimos que la reentrada puede ser descrita



**Figura 5.12:** Entropía de Von Neumann de la cadena seminfinita  $S_{1/2}$  para diferentes entrelazados calculada en función del *hopping*  $t$  y para un valor del potencial químico dado por la recta  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$ . El entrelazado que corresponde a cada curva va desde  $\chi = 7$  (curva inferior) a  $\chi = 70$  (curva superior).

con longitudes de correlación relativamente pequeñas.

### 5.3.5. Punto Kosterlitz-Thouless a densidad unidad

Como ya hemos visto en el apartado 5.3.2, no existen puntos críticos genuinos cuando el entrelazado es finito debido a la imposibilidad de producir una longitud de correlación infinita. Aún así, las transiciones entre distintas fases exhiben muchas de las propiedades de los puntos críticos como cambios abruptos en ciertas magnitudes. Nos concentramos en obtener la localización del punto crítico KT a densidad unidad mediante un extrapolación a entrelazado finito (Tagliacozzo *et al.*, 2008).

Para determinar la localización de los puntos pseudo-críticos para diferentes valores del entrelazado, asumimos que todos ellos se sitúan en la línea  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$  que aparece en la figura 5.8. Como ya comprobamos, esta aproximación es muy buena para valores de entrelazado  $\chi = 7, \dots, 21$  y asumimos que también es cierta cuando  $\chi$  es mayor. Al contrario de lo que ocurría al atravesar

la transición genérica lejos de la punta del lóbulo MI, el punto KT es mucho más difícil de caracterizar pues ocurre sin cambios abruptos en ninguna magnitud.

En nuestro desarrollo, caracterizamos la transición a entrelazado finito mediante el máximo en la entropía de Von Neumann. Es decir, calculamos el estado fundamental para valores crecientes de  $t$  y potencial químico dado por  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$  y localizamos la transición cuando  $S_{1/2}$  exhibe un máximo. En la figura 5.12 podemos ver el resultado de este cálculo. Los máximos de la entropía son mayores conforme el entrelazado aumenta desde  $\chi = 7$  (curva inferior) a  $\chi = 70$  (curva superior), lo que indica que la entropía diverge en el límite  $\chi \rightarrow \infty$ . Para cada valor de  $\chi$ , asumimos que estos máximos ocurren justo en la transición de la fase MI a la SF. Denotamos el valor crítico del *hopping* donde esto ocurre por  $t_c(\chi)$ . Podemos escalar  $t_c(\chi)$  para obtener el valor a entrelazado infinito utilizando, por ejemplo, una ley de potencias. No obstante, vamos a ver como ésta no es la ley que mejor describe la naturaleza del punto KT.

Para valores de  $t$  próximos al punto crítico KT, la longitud de correlación cumple (Sachdev, 2001):

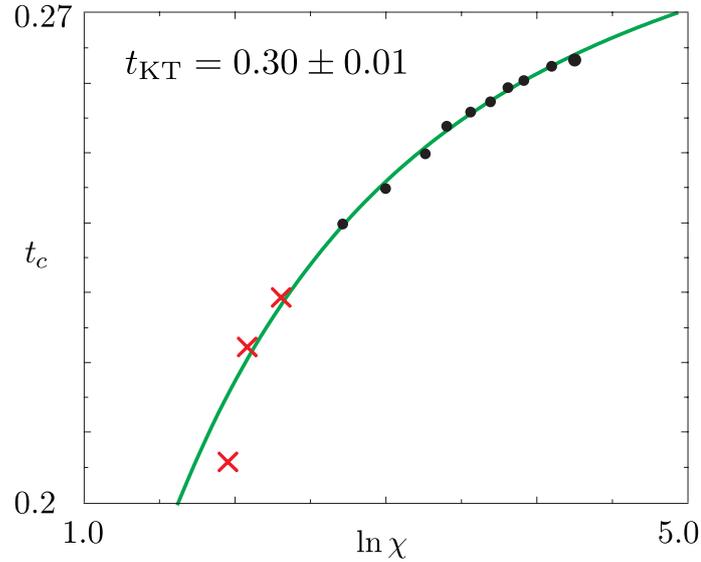
$$t(\xi) = \frac{C_1}{(\ln \xi + C_2)^2} + t_{\text{KT}}, \quad (5.24)$$

donde  $C_1, C_2$  son constantes reales y  $t_{\text{KT}}$  es la localización del punto crítico. Ahora bien, en la apartado 5.3.2 vimos que la longitud de correlación máxima que un estado con entrelazado limitado era capaz de reproducir es  $\xi \sim \chi^\kappa$ . Así, obtenemos:

$$t_c(\chi) = \frac{B_1}{(\ln \chi + B_2)^2} + t_{\text{KT}}, \quad (5.25)$$

donde  $B_1$  y  $B_2$  vuelven a ser constantes reales y  $t_c(\chi)$  es el valor del *hopping* donde aparecerá el punto crítico a  $\chi$  finito.

Finalmente, procedemos a determinar la transición para  $\chi$  finito mediante la ley que aparece en la ecuación (5.25) y obtener así una estimación de  $t_{\text{KT}}$ . En la figura 5.13 mostramos el valor del *hopping* para los máximos en la entropía de la figura 5.12 y el ajuste de los mismos a la ley de la ecuación (5.25). Los puntos correspondientes a entrelazado pequeño  $\chi = 7, 8, 10$  no han sido incluidos en el ajuste, pues empeoran la calidad del mismo. Esto indica que los cálculos con  $\chi < 10$  no son



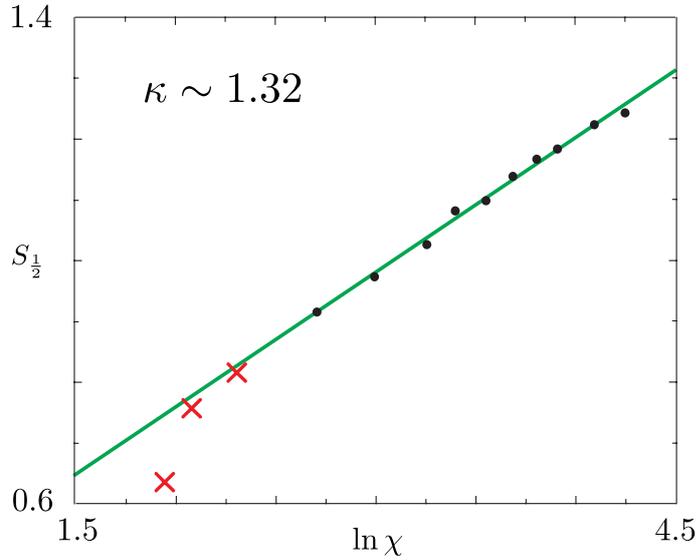
**Figura 5.13:** Localización de los puntos pseudo-críticos,  $t_c$ , para diferentes valores del entrelazado en función de  $\ln \chi$ . Utilizamos  $\bullet$  para valores del entrelazado  $\chi > 10$  mientras que empleamos el símbolo  $\times$  para entrelazado  $\chi = 7, 8, 10$ . La línea ajusta los puntos para  $\chi > 10$  a la ecuación (5.25) obteniendo  $B_1 = -1.22$ ,  $B_2 = 1.93$  y la estimación del punto crítico,  $t_{\text{KT}} = 0.30 \pm 0.01$ .

capaces de reproducir una longitud de correlación suficientemente grande como para que se cumpla la ley (5.24), pues esta sólo ha de ser válida suficientemente cerca del punto crítico. Esto implica, de algún modo, que la aparición de la reentrada es necesaria para que esta ley pueda ser aplicada. Del ajuste deducimos la localización del punto crítico KT:

$$t_{\text{KT}} = 0.30 \pm 0.01. \quad (5.26)$$

Este resultado concuerda muy bien con varios de los trabajos previos que hemos revisado en el comienzo de este capítulo.

En el desarrollo que hemos realizado, hemos asumido que  $S_{1/2}$  alcanza un máximo en los puntos KT para cualquier entrelazado. Esta hipótesis está fuertemente sustentada por los datos obtenidos en la figura 5.13. Aún así, ésta no es una propiedad trivial. Buonsante y Vezzani (2007) han estudiado el mismo punto crítico



**Figura 5.14:** Entropía de Von Neumann de la cadena seminfinita,  $S_{1/2}$ , para los puntos pseudo-críticos y diferentes valores del entrelazado,  $\chi$ , en función del  $\ln \chi$ . Utilizamos  $\bullet$  para valores del entrelazado  $\chi > 10$  mientras que empleamos el símbolo  $\times$  para entrelazado  $\chi = 7, 8, 10$ . La línea continua es un ajuste de los datos para  $\chi > 10$  a la expresión  $A_1 \ln \chi + A_2$ . El ajuste por mínimos cuadrado da un valor  $A_1 = 0.22$  mientras que  $A_2 = 0.32$ .

que nosotros en el modelo BH. En su trabajo, utilizan varias magnitudes generales para localizar la transición en sistemas finitos y obtienen que la entropía de Von Neumann no exhibe ninguna anomalía en la transición. En concreto, para minimizar utilizan diagonalización exacta en un subespacio con un número de partículas bien definido que implica la conservación de la simetría  $U(1)$  del hamiltoniano en la fase SF. Esto indica la importancia de romper la simetría  $U(1)$  en la fase SF a la hora de localizar la transición KT utilizando la entropía de Von Neumann.

Utilizamos los datos ya expuestos para obtener más información acerca de como un MPS describe un punto crítico KT. De la ecuación (5.18) podemos hallar la relación entre la entropía de Von Neumann máxima en la transición y el entrelazado. Para ello, representamos los máximos en la entropía frente a  $\ln(\chi)$  en la figura 5.14. Ajustamos los datos a una línea recta. De nuevo, hemos tenido cuidado de descartar

los puntos con entrelazado pequeño  $\chi = 7, 8, 10$ . Estos pueden no seguir las leyes de escalado correspondientes a la transición. Del ajuste obtenemos:

$$\kappa \sim 1.32. \tag{5.27}$$

Este valor concuerda muy bien con el encontrado por Tagliacozzo *et al.* (2008) para el punto KT en el modelo de Heisenberg. Esto proporciona indicios de que el valor de  $\kappa$  es independiente de los detalles microscópicos si no que depende de la clase de universalidad de la transición.



# Summary

The physical principles that explain the behaviour of a system containing a few particles can be very different from the principles that govern the collective motion of the many-body system. This situation often arises when the interactions between the constituents of the system are important. These interactions are usually very difficult to treat analytically and computational methods are required. Due to the improvements of modern computer, the simulation of many-body interacting systems has become a very active area of research in physics.

This work is devoted to the study of several many-body quantum systems in which interactions between different particles play a prominent role. To do so, we have mainly employed numerical methods. We have focused on certain fermionic and bosonic systems in low dimensions. We may notice that there are important experimental setups which allow to explore the physics of low dimensions. For example, the confinement of atoms in a one-dimensional (1D) or two-dimensional (2D) effective potential is possible in optical lattices. From a theoretical point of view, quantum interacting systems in low dimensions are rather interesting. First of all, quantum fluctuations grows as the dimension decreases. Furthermore, interactions between particles are often more important for low dimensional systems due to several reasons as, for example, the fact that impacts between particles are much more likely to happen. Indeed, there are examples of 1D quantum interacting systems displaying interesting properties without analogue in greater dimensions. One of them is the Luttinger liquid which exhibit spin-charge separation and only occurs for interacting electrons in 1D lattices. In greater dimensions, a system of interacting electrons usually behaves in a similar way as systems composed of non-interacting

electrons.

In the following, we summarize most of our work discussed in this memory and present the main results obtained.

## Electronic interacting systems with disorder

In our work, we have first investigated disordered electronic systems. These sort of materials have random local properties which destroy translational symmetry. Specifically, we focus on non-crystalline solids in which each electron feels a random potential. These systems are very common, as all the solids contain certain degree of disorder due to impurities or imperfections of the lattice. Some materials in which disorder plays an important role are doped semiconductors, amorphous solids or inversion layers.

In his seminal work, Anderson (1958) proved that the disorder can localize non-interacting electrons. An electron in a localized state is restricted to move in a relatively small region of the system. Indeed, its wave function possesses an exponential decay with a well defined localization length,  $\xi$ . When all the electrons in a sample are localized by the disorder, there is not charge transport at zero temperature and the system is an Anderson insulator. In the strongly localized regime, where the localization length is similar to the lattice constant, electrons have a very restricted mobility resulting in a lack of screening of the interactions. For this reason, interactions are very important in this regime.

We have studied a spinless interacting fermionic system in a regular lattice in which translational symmetry is broken by an on-site random potential and particles can tunnel to nearest neighbours sites. We have used a tight-binding Hamiltonian:

$$H = \sum_i (\phi_i - \mu) n_i + \sum_{i \neq j} V_{i,j} (n_i - K) (n_j - K) - t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (5.28)$$

where  $\phi_i$  is a random site energy with a uniform distribution in the interval  $[-W/2, W/2]$ ,  $t$  is the hopping parameter,  $\mu$  is the chemical potential and  $K$  is the compensation constant. Most of our work has been performed at half filling for which  $K = 1/2$  and  $\mu = 0$ . The coefficients  $V_{i,j}$  determine the type of the in-

teraction. We have employed long-range interactions  $V_{i,j} = V/r_{ij}^\alpha$ . We have settled  $\alpha = 1$  to treat the familiar case of Coulomb interactions. As we will discuss later on, we have also used  $\alpha = 1/2$  to handle certain problems in 1D systems. Finally, nearest-neighbours interactions correspond to  $V_{i,j} = V$ , when  $i, j$  are nearest neighbours, and zero otherwise. For the long- and short-range cases, the parameter  $V$  corresponds to the strength of the interaction.

We have employed two numerical approaches to study disorder and interacting electrons. In the first one, the Hamiltonian is partially diagonalized. Such a partial diagonalization has been carried out using ARPACK open library, which are based on a variant of the Lanczos algorithm and allows to efficiently obtain a few eigenvectors and their eigenvalues. The largest system sizes considered with this method are  $N = 24$  for one dimension and  $N = 4 \times 6$  for two. In the second approach, we have used a numerical algorithm to obtain the classical ground state, *i.e.*, the lowest energy configuration of the  $t = 0$  limit and a fairly complete set of low-energy configurations, needed to recalculate the new ground state in the presence of quantum effects as we will discuss shortly. The algorithm employed to compute the classical low-energy configurations is based on the work of Díaz-Sánchez *et al.* (2000).

### Quantum Coulomb gap (Chapter 3)

Anderson insulators can exhibit interesting transport properties. At very low temperatures, localized electrons jump via phonon-assisted hopping and the transition rates depend exponentially on distance and energy. The typical hopping distance and energy are functions of the temperature and the mechanism is known as variable-range hopping. The non-interacting version of this phenomenon was explained by Mott (1968). When long-range interactions between electrons are taken into account, the problem becomes much more complicated. Pollak (1970) was the first to point out the existence of a dip, known as Coulomb gap, around the Fermi level in the density of states (DOS) for Coulomb interactions. Efros and Shklovskii (1975) obtained the shape of the gap in the classical or completely localized regime,  $t = 0$ . The shape of the Coulomb gap depends on the dimension of

the system  $d$  and is given by:

$$\rho(\epsilon) \sim |\epsilon|^{d-1}, \quad (5.29)$$

for  $d > 1$ . In this formula, the energy  $\epsilon$  is measured with respect to the Fermi energy. For  $d = 1$ , there exist logarithmic corrections to the DOS (Raikh y Efros, 1987). Efros y Shklovskii (1975) also proposed an extension of the non-interacting variable-range hopping model in which the constant DOS of the non-interacting case is replaced by the DOS of the interacting one. Basically, the presence of the Coulomb gap limits the hopping of electrons at low energies and, thus, it reduces the conductivity at low temperatures. One implicit approximation performed in the argument of Efros and Shklovskii is that weak quantum effects do not alter the shape of the DOS.

In chapter 3, we have studied the effects of a small hopping contribution,  $t$ , in the shape of the Coulomb gap. We have employed the Hamiltonian in equation (5.28) with long-range interactions. Our main goal has been the study of 2D systems with Coulomb interactions,  $V(r) = V/r$ , but we have also analysed 1D systems with  $V(r) = V/\sqrt{r}$ . This last interaction produces a linear gap in the classical DOS of 1D systems, which is similar to the one appearing in 2D systems with a Coulomb interaction. This linear gap is easier to analyse numerically than the logarithmic gap produced by a Coulomb interaction in one dimension.

We have computed the DOS using exact diagonalization of small systems (Pino *et al.*, 2012b). In the classical case, finite size effects produce a non-zero DOS at the Fermi energy which vanishes in the thermodynamical limit as  $\rho(0) \sim 1/L$ , where  $L$  is the lineal size of the system (Baranovskii *et al.*, 1979). We expect a similar picture when weak quantum effects are taken into account. The first thing we have done is to analyse finite size effects in the quantum case. We have checked that there is a region of energies, around the middle of each branch of the Coulomb gap, where finite size effects are small for the sizes available with our exact diagonalization algorithm. We have taken advantage of this fact to extract information about the behaviour of an intermediate region of the gap when hopping is small but non-zero.

In the panel (a) of figure 3.2, we plotted the DOS as a function of the energy for several hopping amplitudes in 1D systems of size  $N = 20$ . From top to bottom, the lines appearing in the figure correspond to the hopping values  $t = 0, 0.1, 0.2, 0.3$ . We can appreciate that the DOS at an intermediate region of energies inside the gap widens monotonically when increasing the hopping parameter from  $t = 0$  to  $t = 0.3$ . In the panel (b) of figure 3.2, we show the DOS as a function of the energy for 2D systems of size  $N = 4 \times 5$ . The lines in this figure correspond to  $t = 0, 0.1, 0.2, 0.3$ , as indicated in the legend. Similarly to the 1D case, we can observe that the gap in the DOS widens at an intermediate energy region as  $t$  increases up to  $t = 0.2$ , though the changes are smaller than in the 1D case. We stress that the tendency for  $t = 0.3$  seems to be the opposite that the one for a smaller hopping. That is, the DOS at  $t = 0.3$  seems to narrow respect the DOS at  $t = 0.2$ . We conclude that our direct diagonalization method predicts a widening of the Coulomb gap when weak quantum effects are taken into account.

Our direct diagonalization method is constrained to small systems. So we have developed an alternative procedure, based on perturbation theory, which allows the computation of the DOS for larger system sizes (Pino *et al.*, 2012c). Usually, perturbation theory is difficult to apply to the kind of interacting system we are treating. In fact, a small perturbation of a hopping term between two given sites affects particles which are arbitrarily far away of those sites due to the long-range character of the interaction. Then, the analysis based on perturbation theory must be performed over the full many-body space instead of the one-particle states. We have overcome these difficulties for small enough  $t$  by only considering the most relevant hopping terms when computing the local DOS at a given site. We remark that the results for the DOS using exact diagonalization and our perturbation based method are in very good agreement for hopping  $t = 0.1$  and small size.

We have employed the algorithm based on perturbation theory to obtain the DOS. In figure 3.7, we presented the DOS as a function of the energy for  $t = 0$  (dashed line) and  $t = 0.1$  (solid line). In panel (a) we plotted the results for 1D systems of size  $N = 256$ . In panel (b), we showed results for 2D system of size

$N = 10$ . We can conclude that the DOS widens for a intermediate energy region for the 1D and 2D case, as it was also found using exact diagonalization.

Our method based on perturbation theory allows the computation of the DOS for much larger sizes than the ones attainable with exact diagonalization. So we have been able to explore the shape of the DOS near the Fermi energy. In figure 3.8, we represented the DOS at zero energy,  $\rho(\epsilon = 0)$ , as a function of the inverse of the linear size,  $1/\sqrt{N}$ , for 2D system with  $\sqrt{N} = 4, 6, 8, 10$ . The result is compatible with a vanishing DOS at the Fermi level in the thermodynamical limit.

One of the result that we have extracted from our perturbation based theory is that each site of the system contributes with a well defined energy,  $\epsilon_i(t)$ , to the DOS when quantum effects are small,  $t \ll 1$ . Then, we can extend the notion of site energy, very useful in the classical theory of Coulomb glasses, to the quantum case. We would like to remark that the classical Coulomb gap can be regarded as a consequence of the stability of the ground state under particle-hole excitations. This stability condition is that for an empty site  $i$ , with site energy  $\epsilon_i$ , and an occupied site  $j$ , with site energy  $\epsilon_j$ , the energy of transferring the electron from  $i$  to  $j$  must be positive. This implies:

$$\epsilon_j - \epsilon_i - \frac{V}{r_{ij}} \geq 0, \quad (5.30)$$

where  $r_{ij}$  is the distance between the site  $i$  and the site  $j$ .

We have also presented an intuitive argument which gives insight into the mechanism leading to the widening of the Coulomb gap for small  $t$ . We can see the net effect of the quantum corrections as the hardening of the classical constraints, equation (5.30), for the ground state. In particular an occupied site with energy  $\epsilon_i(t)$  and a nearest neighbour empty site with energy  $\epsilon_j(t)$  must satisfy the condition

$$\epsilon_j(t) - \epsilon_i(t) - V \geq t, \quad (5.31)$$

where  $\epsilon_i(t)$  is the site energy up to the second order in  $t$ .

We may notice that the widening of the Coulomb gap with transfer energy  $t$ , specially on low dimensional systems, should be taken into account in the interpretation of tunnelling experiments in the strongly localized regime (Massey y Lee,

---

2000). It may also affect variable range hopping conductance. A calculation based on the classical DOS will overestimate the conductance, since the widening of the gap will not be taken into account.

### Localization and interactions (Chapter 4)

Anderson localization may occur in single-particle states and in many-body states. Nowadays, the non-interacting problem is well understood. Summarizing, any amount of disorder localizes all the single-particle states in 1D and 2D systems. In the 3D case, it localizes the single-particle states at low enough energy but the states at the middle of the band can be extended if the disorder is weak. Then, a metal-insulator transition can be induced by varying the density of electrons in a 3D sample. It is unknown whether interactions may change qualitatively the non-interacting picture. For example, Kravchenko and Sarachik (2004) have observed a metallic phase in 2D electronic disordered systems which is thought to be a consequence of the interactions. Basko *et al.* (2006) have also proposed the existence of an extended phase at high enough temperatures for interacting systems in which the disorder is strong enough to localize all the single-particle states. If this phase exist, the many-body states at the center of the band, which are the important ones at infinite temperature, must be delocalized.

In chapter 4, we have studied the localization properties for the Anderson spinless model with nearest-neighbours and Coulomb interactions in 1D systems. Our results indicates that interactions do not substantially alter the localization properties for many-body states at low energies. This result holds for both, short- and long-range interactions.

Finally, we have computed the localization length,  $\xi$ , for the eigenstate in the middle of the band using nearest-neighbours interactions. To do so, we have calculated this state via an exact diagonalization and we have employed the exponential decay of two particles correlations in order to extract  $\xi$ . In figure 4.5, we can see  $\xi$  as a function of the interaction strength,  $V$ , for hopping  $t = 0.3$ . For repulsive interactions and strength  $|V| \simeq t$ ,  $\xi$  is almost three times larger than for the non-

interacting case.

We have seen that our results indicate that nearest-neighbours interactions increase substantially the localization length of electrons in a many-body state. We have obtained a similar result for Coulomb interactions, though the increase in  $\xi$  is smaller than the one for the nearest-neighbours case.

## Bose-Hubbard model

The Bose-Hubbard model (BH) is a minimal many-body Hamiltonian that contains the key physics of strongly interacting soft-core bosons on a periodic lattice. It embodies the competition between the kinetic and repulsive on-site interaction energies giving rise to a quantum phase transition. For small interactions the bosons are completely delocalized leading to a superfluid (SF) phase, while for sufficiently large interactions, and a commensurate density, the bosons become localized and enter the Mott insulator (MI) phase. By increasing the depth of the optical lattice potential this archetypal SF to MI transition has been experimentally observed in cold-atom systems with one dimensional 1D (Stöferle *et al.*, 2004), 2D (Spielman *et al.*, 2007), and 3D (Greiner *et al.*, 2002) lattices.

The BH Hamiltonian in the grand canonical ensemble is:

$$H = -t \sum_{i,j} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i) - \mu \sum_j n_j + \frac{U}{2} \sum_j n_j(n_j - 1), \quad (5.32)$$

where  $b_j, b_j^\dagger$  are the bosonic creation and annihilation operators at site  $j$  and  $n_j = b_j^\dagger b_j$  is the corresponding number operator. Here  $t > 0$  is the hopping amplitude of bosons between neighbouring sites,  $\mu$  is the chemical potential and  $U > 0$  is the repulsive on-site interaction strength. In the following we fix our energy scale by setting  $U = 1$  and consider the phase diagram in the  $(t, \mu)$  plane.

In the  $t = 0$  limit, the energy eigenstates possess a well defined occupation at each lattice site. The ground state is uniformly filled with  $n$  bosons in each site giving a commensurate density so long as the chemical potential fulfils.

$$n - 1 < \mu < n. \quad (5.33)$$

In the case  $\mu > 0$ , the ground state at zero hopping is filled with at least one boson per site. Excitations above this state can be constructed by adding (particle excitations) or removing (hole excitations) a boson to the ground state at any site. The energy of these lowest particle and hole excitation with respect to the ground state energy is  $\Delta_p(\mu) = -\mu + n$  and  $\Delta_h(\mu) = \mu - n + 1$ . For a non-integer  $\mu$ , we see from equation (5.33) that  $\Delta_p(\mu) > 0$  and  $\Delta_h(\mu) > 0$ . Thus, a defining characteristic of the MI phase is the gap induced by the interaction for both particles and hole excitations.

Keeping  $\mu > 0$  constant, the particle and hole gaps decrease when hopping is increased from the  $t = 0$  limit. Depending on  $\mu$ , there is a hopping value at which one of the particle or hole gaps becomes zero. At this point, the system undergoes a phase transition to the gapless SF phase. Commonly the system goes from a commensurate to an incommensurate density when generically crossing the MI-SF phase transition. We refer to the phase boundary in which the particle gap closes as the particle boundary and as the hole boundary when the hole gap closes. Crossing the phase boundaries from the MI to the SF region produces an increase (particle boundary) or decrease (hole boundary) in the density.

In the 1D BH model, quantum fluctuations destroy long-range order in the SF phase. Instead, this phase exhibits quasi-long-range order with algebraic decaying correlations, such as  $\langle b_0^\dagger b_x \rangle \sim x^{-K/2}$  with  $K = \pi/\sqrt{\rho_s c t}$ , where  $\rho_s$  is the superfluid density and  $c = \partial\rho/\partial\mu$  is the compressibility. Within the MI phase correlations decay exponentially fast with a correlation length  $\xi$ , such as  $\langle b_0^\dagger b_x \rangle \sim \exp(-x/\xi)$ . These correlations indicate that the bosons in a MI state are localized over a typical region of length  $\xi$  contrasting to the SF regime where particles can move over the whole system.

In the SF region, the constant-density region are curves in the  $(\mu, t)$  plane due to the need for positive compressibility,  $\kappa > 0$ . Thus, the particle and hole boundaries surrounding each of the MI regions must collapse in a constant-density curve in the SF phase resulting in the well known MI lobe structure. It also implies that the MI to SF transition at the tip of each of the MI lobes then occurs at constant

density coinciding with the merging of the particle and hole boundaries. The scaling theory developed by Fisher *et al.* (1989) showed that generic transitions are in the universality class of the Gaussian model, while the transition occurring at the tips belongs to the universality class of the  $XY$ -model in  $d + 1$  dimension. Thus, a Kosterlitz-Thouless (KT) critical point appears at the tips of each MI lobe in the 1D problem so both, particle and hole gaps, close exponentially slowly as  $\Delta(t) = A \exp(-B/\sqrt{t_{\text{KT}} - t})$ , with  $A, B$  real constants (Kosterlitz y Thouless, 1973).

Unlike in higher dimensions the phase diagram of the BH model in one dimension and near the unit density possesses regions in which increasing the hopping amplitude can result in a sequence of phase transitions MI-SF-MI-SF. This type of re-entrance is well known in classical systems like liquid crystals yet its origin in quantum systems is still not well understood. Re-entrant behaviour was first convincingly demonstrated by an exhaustive 12th order strong coupling expansion (SCE) analysis (Elstner y Monien, 1999).

In part of our work, we have analysed the BH model in one dimension directly in the thermodynamical limit. For this task, we have used our own implementation of the infinite time-evolving block decimation (iTEBD) algorithm (Vidal, 2007), which finds the ground state by applying an imaginary time-evolution. We stress that iTEBD minimizes a Hamiltonian with translational symmetry and nearest-neighbours interactions in a family of states, called matrix product states, with restricted entanglement between any two halves of the chain. This allows us to determine to what extent entanglement, which signals the presence of quantum correlations and fluctuations in the ground state, is essential for re-entrance to emerge.

### Phase diagram of the 1D Bose-Hubbard model (Chapter 5)

First of all, we have used several relatively simple approaches to compute the phase diagram of the BH model and we have examined whether they are able to predict re-entrance or not (Pino *et al.*, 2012a). These approaches are decoupled mean-field approximation, exact diagonalization and a method based on renorma-

lization group (RG) in real space. We have found that the last one is capable of describing a re-entrant phase diagram.

In figure 5.5, we showed the phase diagram in the  $(t, \mu)$  plane computed with the RG based approximation. The area enclosed by the continuous lines and the  $\mu$  axis belongs to the MI phase, while the area outside belongs to the SF one. As a reference, the phase boundary obtained with the 12th order perturbation theory is included as the dashed lines. The star indicates the estimation of the KT critical point obtained with RG (Singh y Rokhsar, 1992). In the inset, a zoomed area near the tip is shown. There, the appearance of re-entrance is evident. Then, we have shown that our real-space RG scheme does in fact reproduce this phenomenon despite being much simpler than the DMRG, high order perturbation theory or quantum Monte Carlo. We may notice that this method does not allow the spontaneous symmetry breaking, characterized by a non-zero superfluid order parameter, as it happens in mean-field like approaches. In fact, the success of this method to reproduce re-entrance can be seen as an indication of the importance to describe the relevant fluctuations of the SF phase in a particle-number symmetric way, which is only possible for a vanishing SF order parameter.

We have also analysed the re-entrance phenomenon directly in the thermodynamic limit by utilizing the infinite time-evolving block decimation (iTEBD) algorithm to variationally minimize an infinite matrix product state (MPS) parametrized by a set of matrix of certain dimension (Pino *et al.*, 2012d). We say that an infinite MPS has dimension  $\chi$ , if  $\chi$  is the maximum Schmidt rank allowed for any division of the system in two semi-infinite lattices. Briefly, a MPS with  $\chi < \infty$  is only able to show a finite amount of entanglement between different parts of the system, which implies that the quantum correlations are also bounded. For example, the correlation length in a gapped phase must be finite whenever  $\chi < \infty$ . Indeed, the maximum correlation length that a MPS of dimension  $\chi$  can reproduce near a critical point scales as:

$$\xi_c(\chi) \sim \chi^\kappa, \quad (5.34)$$

where  $\kappa$  depends on the nature of the transition. Then, a MPS of finite dimension

cannot properly describe a critical point due to the impossibility to simulate a diverging correlation length. However, as in the finite size scaling, we can extract information about the criticality itself by extrapolating the adequate magnitudes at finite  $\chi$ .

We remark that a  $\chi = 1$  calculation is equivalent to the mean field approximation, which does not display re-entrance at all. So re-entrance will emerge as  $\chi$  is increased from this limit. Re-entrant behaviour of the MI lobes is a subtle feature which is often not captured accurately by commonly used approximations. So we may expect that the quantum correlations, and thus the entanglement, needed to describe this phenomenon should be large. Contrarily to this expectation, we have seen that a modest value of  $\chi = 8$  and a correlation length, in unit of lattice space, of  $\xi \lesssim 10$  is enough to describe a re-entrance phase diagram. We have also checked that a  $\xi = 21$  is enough to describe quantitatively the phase boundaries of the BH model for unit density, except near the KT point.

In figure 5.8, we plotted the boundaries of the MI lobe in the  $(t, \mu)$  plane determined by iTEBD calculations for a sequence  $\chi$  ranging from a mean-field value of  $\chi = 1$  to  $\chi = 21$ . The inset shows a zoom in of the tip region for  $\chi = 5$  to  $\chi = 21$ . We see that, up to a good approximation, the tips of all the lobes intersect the line  $\mu(t) = -1.538t + 0.559$  displayed in the figure.

We have estimated the location of the KT critical point occurring at unit density by employing a finite entanglement scaling. To determine this critical point, we have assumed that with increasing  $\chi$  the trajectory of the tip towards the true KT point is given by the line  $\mu(t)$  defined before. Previous calculations, shown in figure 5.8, confirmed this to be a good approximation for  $3 \leq \chi \leq 21$ . In contrast to the generic transitions used to constrain the lobe structure, locating the pseudo-critical point at the tip, where the density remains fixed at unity, is a more difficult task. For this reason we instead exploit the local maxima anomaly in Von-Neumann entropy.

In figure 5.12 the half-chain entropy  $S_{\frac{1}{2}}$  is shown as a function of  $t$  along the line  $\mu(t)$  for a sequence of finite-entanglement calculations ranging from  $\chi = 7$  (bottom) to  $\chi = 70$  (top). The local maxima anomaly persists at the tip for a hopping value

increasing with  $\chi$  suggestive of a divergence in the  $\chi \rightarrow \infty$  limit. From these maxima we extract the critical hopping  $t_c(\chi)$  for each  $\chi$  providing the raw data necessary for finite-entanglement scaling. From these data alone it is possible to perform a crude scaling analysis, such as a simple power-law extrapolation, without recourse to prior knowledge of the nature of the transition, and obtain a reasonable initial estimate of its location. However, to proceed more accurately we have found another scaling law which takes into account the infinite order nature of the transition:

$$t_c(\chi) = \frac{B_1}{(\ln \chi + B_2)^2} + t_{\text{KT}}, \quad (5.35)$$

where  $B_1, B_2$  are real constants,  $t_c(\chi)$  is the hopping value at which the transition occurs for a finite entanglement  $\chi$ , and  $t_{\text{KT}}$  is the hopping value at which occurs the KT transition. To derive this expression, it has been important to use equation (5.34), which relates the entanglement and the correlation length at the critical point  $t_c(\chi)$ .

In figure 5.13, we plotted the hopping  $t_c(\chi)$  as a function of  $\ln(\chi)$ , for  $\chi = 7, 8, 10 \dots 70$ . The line fits the points to the law in (5.35). We notice that we have only fitted the data for  $\chi > 10$ , represented as dots ( $\bullet$ ) in the figure. This is because the quality of the fitting becomes worst when the points for  $\chi = 7, 8, 10$ , represented as crosses ( $\times$ ), are included. So, we have only taken into account the tips of MI lobes where re-entrance has already been firmly established, signifying the fundamental connection between the KT point and this phenomenon. Finally, from the fitting we have obtained a new estimation of the KT point as

$$t_{\text{KT}} = 0.30 \pm 0.01 \quad (5.36)$$

in excellent agreement with the best previous works, based on DMRG. This illustrates how relatively low cost iTEBD calculations cannot only provide qualitative insight into the lobe structure but, in combination with the appropriate scaling relations, also provides quantitatively accurate estimations of critical points via finite-entanglement scaling.

## Conclusions

We enumerate the main conclusions that can be extracted from our work:

- For the Anderson model with long-range interactions, we have developed a perturbation theory in configuration space to compute the DOS including small quantum effects. We have also seen that, in this regime, each site contributes to the DOS with a well defined energy, as in the classical case.
- We have studied the DOS for the Anderson model including small quantum effects with long-range interactions in 1D and 2D systems. Our results indicate that the DOS at intermediate energies inside the Coulomb gap widens upon including weak quantum effects. We have obtained that the DOS at the Fermi level remains zero in the thermodynamical limit for a finite but small value of the hopping parameter. Consequently, the soft gap appearing in the DOS for the classical limit survives to the inclusion of small quantum effects. In view of this, we may talk about the quantum Coulomb gap.
- In the 1D Anderson model, we have also computed the effects that interactions produce in the localization length. Regarding the ground state, we have found that the localization length of non-interacting electrons and of interacting ones is very similar. This result has been obtained for both long-range and nearest-neighbours interactions. However, the interactions significantly enhance the delocalization of electrons in a many-body state at the center of the band. This result occurs for long- and short-range interactions, but the latter is the one which produces a greater delocalization.
- We have performed a finite entanglement study of the phase diagram of the BH model at zero temperature. We have seen that a computation with a moderate entanglement,  $\chi = 8$ , is able to reproduce a re-entrant phase diagram. This implies that a correlation length  $\xi < 10$  is enough to describe the basic mechanism which leads to re-entrance.

- We have also analysed the BH phase diagram at zero temperature using three relatively simple methods. Our results indicate that an approximation that allows spontaneous symmetry breaking tends to overestimate the SF phase and hides the mechanisms behind the re-entrant behaviour. We also found that a method based on RG predicts a re-entrant phase diagram. This approximation is much simpler than the ones which has been used in previous works to reproduce the same phenomenon.
- A finite-entanglement scaling has been used to locate the KT critical point appearing in the BH model at low density. We have characterized the KT point at finite entanglement using the Von-Neumann entropy. After that, we have extrapolated the results for several  $\chi$  to the limit  $\chi \rightarrow \infty$ . We have used the iTEBD algorithm, which works directly in the thermodynamical limit, and a scaling law which takes into account the characteristic of the KT critical point, Our estimation of the critical hopping is  $t_{\text{KT}} = 0.30 \pm 0.01$ , which is in very good agreement with previous works.



# Acrónimos

- **1D**  $\Rightarrow$  Unidimensional.
- **2D**  $\Rightarrow$  Bidimensional.
- **3D**  $\Rightarrow$  Tridimensional.
- **BH**  $\Rightarrow$  Bose-Hubbard.
- **DDE**  $\Rightarrow$  Densidad De Estados.
- **DMRG**  $\Rightarrow$  *Density Matrix Renormalization Group* – Grupo de renormalización de la matriz densidad.
- **iTEBD**  $\Rightarrow$  *infinite Time Evolving Block Decimation* – Evolución en el tiempo con método de diezmado infinito.
- **KT**  $\Rightarrow$  Kosterlitz-Thouless.
- **MPS**  $\Rightarrow$  *Matrix Product States* – Estados producto de matrices.
- **MI**  $\Rightarrow$  *Mott Insulator* – Aislante de Mott.
- **RG**  $\Rightarrow$  *Renormalization Group* – Grupo de renormalización.
- **SF**  $\Rightarrow$  *Super Fluid* – Superfluido.
- **SVD**  $\Rightarrow$  *Singular Value Decomposition* – Descomposición en valores singulares.
- **TEBD**  $\Rightarrow$  *Time Evolving Block Decimation* – Evolución en el tiempo con método de diezmado.

- **VRH**  $\Rightarrow$  *Variable Range Hoopping* – Salto de rango variable.

# Bibliografía

- ABRAHAMS, E., ANDERSON, P. W., LICCIARDELLO, D. C., Y RAMAKRISHNAN, T. V. 1979. Scaling theory of localization - absence of quantum diffusion in 2 dimensions. *Physical Review Letters*, **42**(10), 673–676.
- AHARONY, A., ZHANG, Y. Z., Y SARACHIK, M. P. 1992. Universal crossover in variable range hopping with Coulomb interactions. *Physical Review Letters*, **68**(26), 3900–3903.
- ALTSHULER, B. L., Y ARONOV, A. G. 1979. Zero bias anomaly in tunnel resistance and electron-electron interaction. *Solid State Communications*, **30**(3), 115–117.
- AMICO, L., Y PENNA, V. 1998. Dynamical Mean Field Theory of the Bose-Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **80**(Mar), 2189–2192.
- ANDERSON, P. W. 1958. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, **109**(5), 1492–1505.
- BARANOVSKII, S. D., EFROS, A. L., GELMONT, B. L., Y SHKLOVSKII, B. I. 1979. Coulomb gap in disordered systems - computer-simulation. *Journal of Physics C*, **12**(6), 1023–1034.
- BARANOVSKII, S. D., SHKLOVSKII, B. I., Y EFROS, A. L. 1980. Elementary excitations in disordered systems with localized electrons. *Soviet JETP*, **51**(1), 199–207.

- BARDARSON, J. H., POLLMANN, F., Y MOORE, J. E. 2012. Unbounded Growth of Entanglement in Models of Many-Body Localization. *Physical Review Letters*, **109**(Jul), 017202.
- BASKO, D. M., ALEINER, I. L., Y ALTSHULER, B. L. 2006. Metal-insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states. *Annals of Physics*, **321**, 1126.
- BATROUNI, GHASSAN GEORGE, SCALETTAR, RICHARD T., Y ZIMANYI, GERGELY T. 1990. Quantum critical phenomena in one-dimensional Bose systems. *Physical Review Letters*, **65**(Oct), 1765–1768.
- BERKOVITS, R. 2003. Electron-hole generations: a numerical approach to interacting fermion systems. *Solid State Communications*, **127**, 725–729.
- BLOCH, I., DALIBARD, J., Y ZWERGER, W. 2008. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, **80**(Jul), 885–964.
- BREUER, HP, Y PETRUCCIONE, F. 2002. *The theory of open quantum systems*. 1st edn. Oxford University Press.
- BRUDER, C., FAZIO, R., Y SCHON, G. 2005. The Bose-Hubbard model: from Josephson junction arrays to optical lattices. *ANNALEN DER PHYSIK*, **14**(9-10), 566–577.
- BUONSANTE, P., Y VEZZANI, A. 2007. Ground-State Fidelity and Bipartite Entanglement in the Bose-Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **98**(Mar), 110601.
- BUTKO, V. Y., DiTUSA, J. F., Y ADAMS, P. W. 2000. Coulomb gap: How a metal film becomes an insulator. *Physical Review Letters*, **84**(7), 1543–1546.
- CALABRESE, P., Y CARDY, J. 2004. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2004**(06), P06002.
- CARTER, J. M., Y MACKINNON, A. 2005. Disorder and interactions in one-dimensional systems. *Physical Review B*, **72**(2), 024208.

- 
- CHICÓN, R., ORTUÑO, M., Y POLLAK, M. 1988. Hardening of the Coulomb gap by electronic polarons. *Physical Review B*, **37**(18), 10520–10525.
- CLADIS, P. E. 1975. New Liquid-Crystal Phase Diagram. *Physical Review Letters*, **35**(Jul), 48–51.
- CLARK, S. R. 2007. *Strongly correlated one-dimensional systems of cold atoms in optical lattices*. Ph.D. thesis, Trinity College, Oxford.
- COHEN-TANNOUJDI, C., , LALOE, F., Y DUI, B. 2006. *Quantum Mechanics (2 vol. set)*. Wiley-Interscience.
- CUEVAS, E., Y ORTUÑO, M. 1992. Coulomb gap and tunneling conductance in one-dimensional and 2-dimensional systems. *Philosophical Magazine B*, **65**(4), 681–684.
- DANSHITA, I., Y POLKOVNIKOV, A. 2011. Superfluid-to-Mott-insulator transition in the one-dimensional Bose-Hubbard model for arbitrary integer filling factors. *Physical Review A*, **84**(Dec), 063637.
- DAVIES, J. H. 1985. The density of states in the Coulomb gap. *Philosophical Magazine B*, **52**(3), 511–520.
- DÍAZ-SÁNCHEZ, A., MÖBIUS, A., ORTUÑO, M., NEKLIODOV, A., Y SCHREIBER, M. 2000. Nonergodic effects in the Coulomb glass: Specific heat. *Physical Review B*, **62**(12), 8030–8037.
- DOMINGUEZ-ADAME, F., Y MALYSHEV, V. A. 2004. A simple approach to Anderson localization in one-dimensional disordered lattices. *American Journal of Physics*, **72**(2), 226–230.
- DUKELSKY, J., MARTIN-DELGADO, M. A., NISHINO, T., Y SIERRA, G. 1998. Equivalence of the variational matrix product method and the density matrix renormalization group applied to spin chains. *Europhysics Letters*, **43**(4), 457–462.

- EFROS, A. L. 1976. Coulomb gap in disordered systems. *Journal of Physics C*, **9**(11), 2021–2030.
- EFROS, A. L., Y SHKLOVSKII, B. I. 1975. Coulomb gap and low-temperature conductivity of disordered systems. *Journal of Physics C*, **8**(4), L49–L51.
- EISERT, J., CRAMER, M., Y PLENIO, M. B. 2010. Colloquium: Area laws for the entanglement entropy. *Reviews of Modern Physics*, **82**(1), 277–306.
- EJIMA, S., FEHSKE, H., Y GEBHARD, F. 2011. Dynamic properties of the one-dimensional Bose-Hubbard model. *EPL*, **93**(3).
- ELESIN, V. F., KASHURNIKO, V. A, Y OPENOV, L. A. 1994. Mott-Insulator Superfluid-Liquid transition in a 1D boson Hubbard-Model. *Soviet JETP*, **60**(3), 177–181.
- ELSTNER, N, Y MONIEN, H. 1999. Dynamics and thermodynamics of the Bose-Hubbard model. *Physical Review B*, **59**(19), 12184–12187.
- EPERLEIN, F., SCHREIBER, M., Y VOJTA, T. 1997. Quantum Coulomb glass within a Hartree-Fock approximation. *Physical Review B*, **56**(10), 5890–5896.
- EPERLEIN, F., SCHREIBER, M., Y VOJTA, T. 1998. Quantum Coulomb glass - Hartree-Fock approximation versus exact diagonalization. *Physica Status Solidi B*, **205**(1), 233–236.
- FISHER, M. P. A., WEICHMAN, P. B., GRINSTEIN, G., Y FISHER, D. S. 1989. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Physical Review B*, **40**(Jul), 546–570.
- FREERICKS, J. K., Y MONIEN, H. 1994. Phase diagram of the Bose-Hubbard model. *Europhysics Letters*, **26**(7), 545–550.
- FREERICKS, J. K., Y MONIEN, H. 1996. Strong-coupling expansions for the pure and disordered Bose-Hubbard model. *Physical Review B*, **53**(Feb), 2691–2700.

- 
- GREINER, M., MANDEL, O., ESSLINGER, T., HÄNSCH, T. W., Y BLOCH, I. 2002. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, **415**(3), 39–44.
- HALDANE, F. D. M. 1988. O(3) Nonlinear  $\sigma$  Model and the Topological Distinction between Integer- and Half-Integer-Spin Antiferromagnets in Two Dimensions. *Physical Review Letters*, **61**(Aug), 1029–1032.
- HARTMANN, M. J., PRIOR, J., CLARK, S. R., Y PLENIO, M. B. 2009. Density Matrix Renormalization Group in the Heisenberg Picture. *Physical Review Letters*, **102**(Feb), 057202.
- HESS, HARALD F., DECONDE, KEITH, ROSENBAUM, T. F., Y THOMAS, G. A. 1982. Giant dielectric constants at the approach to the insulator-metal transition. *Physical Review B*, **25**(Apr), 5578–5580.
- JAKSCH, D., BRUDER, C., CIRAC, J. I., GARDINER, C. W., Y ZOLLER, P. 1998. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Physical Review Letters*, **81**(Oct), 3108–3111.
- JEON, G. S., WU, S., LEE, H. W., Y CHOI, M. Y. 1999. Localization in one- and two-dimensional quantum Coulomb glasses. *Physical Review B*, **59**, 3033–3039.
- KASHURNIKOV, V. A., Y SVISTUNOV, B. V. 1996. Exact diagonalization plus renormalization-group theory: Accurate method for a one-dimensional superfluid-insulator-transition study. *Physical Review B*, **53**(May), 11776–11778.
- KASHURNIKOV, V. A., KRASAVIN, A. V., Y SVISTUNOV, B. V. 1996. Mott-insulator-superfluid-liquid transition in a one-dimensional bosonic Hubbard model: Quantum Monte Carlo method. *JETP letters*, **64**(2), 99–104.
- KOLLER, W., Y DUPUIS, N. 2006. Variational cluster perturbation theory for Bose-Hubbard models. *Journal of Physics-Condensed Matter*, **18**(41), 9525–9540.

- KOSTERLITZ, J. M., Y THOULESS, D. J. 1973. Ordering, metastability and phase-Transitions in 2 dimensional systems. *Journal of physics C-solid state physics*, **6**(7), 1181 – 1203.
- KRAUTH, W. 1991. Bethe ansatz for the one-dimensional boson Hubbard model. *Physical Review B*, **44**(Nov), 9772–9775.
- KRAUTH, W., CAFFAREL, M., Y BOUCHAUD, J-P. 1992. Gutzwiller wave function for a model of strongly interacting bosons. *Physical Review B*, **45**(Feb), 3137–3140.
- KRAVCHENKO, S. V., Y SARACHIK, M. P. 2004. Metal-insulator transition in two-dimensional electron systems. *Reports on Progress in Physics*, **67**(1), 1–44.
- KÜHNER, T. D., Y MONIEN, H. 1998. Phases of the one-dimensional Bose-Hubbard model. *Physical Review B*, **58**(Dec), R14741–R14744.
- KÜHNER, T. D., WHITE, S. R., Y MONIEN, H. 2000. One-dimensional Bose-Hubbard model with nearest-neighbor interaction. *Physical Review B*, **61**(May), 12474–12489.
- LAEUCHLI, A. M., Y KOLLATH, C. 2008. Spreading of correlations and entanglement after a quench in the one-dimensional Bose-Hubbard model. *Journal of Statistical Mechanics-Theory and Experiment*, MAY.
- LEE, M., MASSEY, J. G., NGUYEN, V. L., Y SHKLOVSKII, B. I. 1999. Coulomb gap in a doped semiconductor near the metal-insulator transition: Tunneling experiment and scaling ansatz. *Physical Review B*, **60**(3), 1582–1591.
- LEHOUCQ, R. B., SORENSEN, D. C., Y YANG, C. 1998. *ARPACK Users' guide*. Philadelphia: SIAM.
- LI, Q. M., Y PHILLIPS, P. 1993. Effect of quantum hopping on the Coulomb gap of localized electrons in disordered systems. *Physical Review B*, **48**(20), 15035–15039.

- 
- MASON, W., KRAVCHENKO, S. V., BOWKER, G. E., Y FURNEAUX, J. E. 1995. Experimental evidence for a Coulomb gap in two dimensions. *Physical Review B*, **52**(11), 7857–7859.
- MASSEY, J. G., Y LEE, M. 1995. Direct observation of the coulomb correlation gap in a nonmetallic semiconductor, Si:B. *Physical Review Letters*, **75**(23), 4266–4269.
- MASSEY, J. G., Y LEE, M. 2000. Evidence for many-electron composite charge excitations in a Coulomb glass. *Physical Review B*, **62**(20), R13270–R13273.
- MONTHUS, C., Y GAREL, T. 2010. Many-body localization transition in a lattice model of interacting fermions: Statistics of renormalized hoppings in configuration space. *Physical Review B*, **81**(13), 134202.
- MOTT, N. F. 1968. Conduction in glasses containing transition metal ions. *Journal of Non-Crystalline Solids*, **1**(1), 1–17.
- OGANESYAN, V., Y HUSE, D. A. 2007. Localization of interacting fermions at high temperature. *Physical Review B*, **75**(15), 155111.
- ORÚS, R., Y VIDAL, G. 2008. Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution. *Physical Review B*, **78**(Oct), 155117.
- OVADYAHU, Z., Y POLLAK, M. 1997. Disorder and magnetic field dependence of slow electronic relaxation. *Physical Review Letters*, **79**(3), 459–462.
- PAI, R. V., PANDIT, R., KRISHNAMURTHY, H. R., Y RAMASESHA, S. 1996. One-Dimensional Disordered Bosonic Hubbard Model: A Density-Matrix Renormalization Group Study. *Physical Review Letters*, **76**(Apr), 2937–2940.
- PAL, A., Y HUSE, D. A. 2010. Many-body localization phase transition. *Physical Review B*, **82**(17), 174411.
- PALASSINI, M., Y GOETHE, M. 2012. Elementary excitations and avalanches in the Coulomb glass. *Journal of Physics: Conference Series*, **376**(1), 012009.

- PINO, M., PRIOR, J., Y CLARK, S. R. 2012a. Capturing the re-entrant behavior of one-dimensional Bose–Hubbard model. *physica status solidi (b)*, n/a–n/a.
- PINO, M., SOMOZA, A. M., Y ORTUÑO, M. 2012b. Quantum Coulomb gap. *Journal of Physics: Conference Series*, **376**(1), 012006.
- PINO, M., SOMOZA, A. M., Y ORTUÑO, M. 2012c. Quantum Coulomb gap in low dimensions. *Physical Review B*, **86**(Sep), 094202.
- PINO, M., PRIOR, J., SOMOZA, A. M., JAKSCH, D., Y CLARK, S. R. 2012d. Reentrance and entanglement in the one-dimensional Bose-Hubbard model. *Physical Review A*, **86**(Aug), 023631.
- PISARSKI, P., JONES, R. M., Y GOODING, R. J. 2011. Application of a multisite mean-field theory to the disordered Bose-Hubbard model. *Physical Review A*, **83**(May), 053608.
- POLLAK, M. 1970. Effect of carrier-carrier interactions on some transport properties in disordered semiconductors. *Discussions of the Faraday Society*, **50**, 13–19.
- POLLAK, M., ORTUÑO, M., Y FRYDMAN, A. 2012. *The electron glass*. Cambridge: Cambridge University Press.
- POLLMANN, F., TURNER, A. M., BERG, E., Y OSHIKAWA, M. 2010. Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension. *Physical Review B*, **81**(Feb), 064439.
- PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A., Y VETTERLING, W. T. 1992. *Numerical Recipes in FORTRAN 77: The Art of Scientific Computing*. Vol. 1. Cambridge university press.
- RACHEL, S., LAFLORENCIE, N., SONG, H. F., Y LE HUR, K. 2012. Detecting Quantum Critical Points Using Bipartite Fluctuations. *Physical Review Letters*, **108**(Mar), 116401.

- 
- RAIKH, M. E., Y EFROS, A. L. 1987. State density near the Fermi level in 1D systems with localized electrons. *JETP Letters*, **45**(5), 280–283.
- ROKHSAR, D. S., Y KOTLIAR, B. G. 1991. Gutzwiller projection for bosons. *Physical Review B*, **44**(Nov), 10328–10332.
- ROUX, G., BARTHEL, T., MCCULLOCH, I. P., KOLLATH, C., SCHOLLWÖCK, U., Y GIAMARCHI, T. 2008. Quasiperiodic Bose-Hubbard model and localization in one-dimensional cold atomic gases. *Physical Review A*, **78**(Aug), 023628.
- RUIZ, J., CUEVAS, E., ORTUÑO, M., TALAMANTES, J., MOCHENA, M., Y POLLAK, M. 1994. Relaxation effects in the Coulomb glass. *Journal of Non-Crystalline Solids*, **172**, 445–448.
- SACHDEV, S. 2001. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge: Cambridge University Press.
- SASLOW, W. M., Y PARKER, G. 1986. Melting of Frustrated Spins: Mechanism for Reentrant Ferromagnetic-Spin-Glass Behavior. *Physical Review Letters*, **56**(Mar), 1074–1077.
- SCHMITTECKERT, P., SCHULZE, T., SCHUSTER, C., SCHWAB, P., Y ECKERN, U. 1998a. Anderson Localization versus Delocalization of Interacting Fermions in One Dimension. *Physical Review Letters*, **80**(Jan), 560–563.
- SCHMITTECKERT, P., JALABERT, R. A., WEINMANN, D., Y PICHARD, J-L. 1998b. From the Fermi Glass towards the Mott Insulator in One Dimension: Delocalization and Strongly Enhanced Persistent Currents. *Physical Review Letters*, **81**(Sep), 2308–2311.
- SHKLOVSKII, B. I., Y EFROS, A. L. 1984. *Electronic Properties of Doped Semiconductors*. Berlin: Springer.
- SINGH, K. G., Y ROKHSAR, D. S. 1992. Real-space renormalization study of disordered interacting bosons. *Physical Review B*, **46**(Aug), 3002–3008.

- SPIELMAN, I. B., PHILLIPS, W. D., Y PORTO, J. V. 2007. Mott-Insulator Transition in a Two-Dimensional Atomic Bose Gas. *Physical Review Letters*, **98**(Feb), 080404.
- STÖFERLE, T., MORITZ, H., SCHORI, C., KÖHL, M., Y ESSLINGER, T. 2004. Transition from a Strongly Interacting 1D Superfluid to a Mott Insulator. *Physical Review Letters*, **92**(Mar), 130403.
- TAGLIACOZZO, L., DE OLIVEIRA, THIAGO. R., IBLISDIR, S., Y LATORRE, J. I. 2008. Scaling of entanglement support for matrix product states. *Physical Review B*, **78**(Jul), 024410.
- VIDAL, G. 2007. Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in One Spatial Dimension. *Physical Review Letters*, **98**(Feb), 070201.
- VIDAL, G., LATORRE, J. I., RICO, E., Y KITAEV, A. 2003. Entanglement in Quantum Critical Phenomena. *Physical Review Letters*, **90**(Jun), 227902.
- VIDAL, GUIFRÉ. 2004. Efficient Simulation of One-Dimensional Quantum Many-Body Systems. *Physical Review Letters*, **93**(Jul), 040502.
- VIGNALE, G. 1987. Quantum electron glass. *Physical Review B*, **36**(15), 8192–8195.
- VIGNALE, G., SHINOZUKA, Y., Y HANKE, W. 1986. Effect of quantum hopping on the Coulomb gap of localized-electrons in disordered-systems. *Physical Review B*, **34**(4), 3003–3006.
- VOJTA, M. 2003. Quantum phase transitions. *Reports on Progress in Physics*, **66**(12), 2069.
- VOJTA, T., Y SCHREIBER, M. 2001. Localization and conductance in the quantum Coulomb glass. *Philosophical Magazine B*, **81**(9), 1117–1129.
- VOJTA, T., EPPERLEIN, F., Y SCHREIBER, M. 1998. Quantum Coulomb glass: Anderson localization in an interacting system. *Physica Status Solidi B*, **205**(1), 53–59.

- WEN, X. G., WILCZEK, F., Y ZEE, A. 1989. Chiral spin states and superconductivity. *Physical Review B*, **39**(Jun), 11413–11423.
- WENG, X.-G. 2004. *Quantum Field Theory of Many-Body Systems*. Oxford: Oxford University Press.
- WHITE, A. E., DYNES, R. C., Y GARNO, J. P. 1986. Corrections to the one-dimensional density of states - observation of a Coulomb gap. *Physical Review Letters*, **56**(5), 532–535.
- WHITE, S. R. 1992. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, **69**, 2863–2866.
- WHITE, S. R., Y NOACK, R. M. 1992. Real-space quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, **68**(Jun), 3487–3490.
- WILSON, K. G. 1975. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, **47**(Oct), 773–840.
- ZAKRZEWSKI, J., Y DELANDE, D. 2008. Accurate determination of the superfluid-insulator transition in the one-dimensional Bose-Hubbard model. AIP Conference Proceedings, vol. 1076.
- ZHANG, Y. Z., DAI, P. H., LEVY, M., Y SARACHIK, M. P. 1990. Probing the Coulomb gap in insulating n-type CdSe. *Physical Review Letters*, **64**(22), 2687–2690.