

Path Integral Monte Carlo for Interacting Bosons in Quasiperiodic Lattices

Student: Matteo Ciardi (*matteo.ciardi@stud.unifi.it*)

Supervisor: Dr. Fabio Cinti (*fabio.cinti@unifi.it*)

The study of quasicrystalline phases has affirmed itself as an area of great interest in condensed matter physics. Quasiperiodic potentials are characterized by long-range order despite their lack of translational invariance, which locates their quantum properties somewhere in between fully periodic and completely disordered systems. Particles in such a potential undergo a transition from an extended to a localised phase as the intensity of the potential increases. The localised phase is theorized to differ in some of its properties from that occurring in random potentials, making it more stable and possibly more suited for applications.

Recent experiments have successfully identified the localisation transition of three-dimensional system of ultracold bosons in a two-dimensional quasiperiodic lattice. A number of studies have analysed the behaviour of the system, in both homogeneous and trapped systems, by employing different classes of mean field simulations. These approaches, however refined, are usually limited to the determination of properties at $T = 0$.

The present work tackles the problem from a different angle, making use of continuous-space Path Integral Monte Carlo (PIMC) techniques. These allow, in principle, to determine thermodynamic properties of a quantum system at finite temperature with arbitrary precision. We focus on a particular example of quasiperiodic potential, similar to those already realized with optical lattices. We work, however, in a purely two-dimensional case; an experimental study of this has not yet been attempted, but it is within reach of currently available techniques with quasi-two-dimensional optical traps. In order to characterize the localisation transition we exploit the superfluid properties exhibited by systems of bosons at low temperature.

We showcase a detailed description, in terms of estimators peculiar to PIMC simulations, of the properties of bosons in a quasiperiodic potential in two dimensions. We find and present evidence of the localisation transition inside a two-dimensional harmonic trap, for non-interacting and interacting particles alike. Our results demonstrate the applicability of the method to this particular system, paving the way for more extensive studies focused on the determination of properties of the system in the thermodynamic limit and a comparison with realistic experimental systems.

The thesis is structured as follows. Chapter 1 is an introduction to the geometric properties of quasicrystals, as well as to the phases of condensed matter in lattice and disordered systems, with a specific focus on ultracold bosonic atoms. Chapter 2 consists of a review of superfluidity as a macroscopic physical property, and of the conditions that allow its emergence in quantum systems. Chapter 3 is a presentation of PIMC techniques, in particular of the Worm Algorithm, an instrument for efficient simulation of bosonic systems. Chapter 4 introduces the specific details of the model of interest, while chapter 5 contains the results of several simulations. In chapter 6, we look at the results obtained until now and at future perspectives, since our research is ongoing and can branch in a number of different directions.

Path Integral Monte Carlo per bosoni interagenti in reticoli quasiperiodici

Candidato: Matteo Ciardi (*matteo.ciardi@stud.unifi.it*)

Relatore: Dr. Fabio Cinti (*fabio.cinti@unifi.it*)

Lo studio di fasi quasicristalline si è affermato come area di grande interesse nella fisica della materia condensata. I potenziali quasiperiodici sono caratterizzati da ordine a lungo raggio, pur non godendo di invarianza traslazionale, il che colloca le loro proprietà a metà tra i sistemi periodici e quelli completamente disordinati. Le particelle in un simile potenziale effettuano una transizione da una fase estesa a una localizzata quando l'intensità del potenziale aumenta. Si teorizza che la fase localizzata differisca in alcune sue proprietà da quella osservabile in potenziali disordinati, risultando più stabile e forse più adatta per le applicazioni.

Recenti esperimenti sono riusciti ad identificare la transizione di localizzazione di un sistema di atomi ultrafreddi in tre dimensioni all'interno di un reticolo quasiperiodico bidimensionale. Vari studi hanno analizzato il comportamento del sistema, nel caso omogeneo quanto in quello intrappolato, impiegando diversi tipi di simulazioni in campo medio. Questi approcci, tuttavia, si limitano solitamente a determinare le proprietà del sistema a $T = 0$.

In questo lavoro di tesi affrontiamo il problema da un diverso punto di vista, utilizzando tecniche di Path Integral Monte Carlo (PIMC) in spazio continuo. Queste consentono, in linea di principio, di determinare le proprietà termodinamiche di un sistema quantistico a temperatura finita con precisione arbitraria. Ci concentriamo su un particolare esempio di potenziale quasiperiodico, simile a quelli già realizzati con reticoli ottici. Lavoriamo però in un caso puramente bidimensionale; studi sperimentali in questo senso non sono ancora stati effettuati, ma sono alla portata delle tecniche oggi disponibili per sistemi in trappola ottica. Allo scopo di caratterizzare la transizione di localizzazione, sfruttiamo le proprietà superfluide proprie dei sistemi bosonici a bassa temperatura.

Riportiamo una descrizione dettagliata delle proprietà di bosoni in un potenziale quasiperiodico in due dimensioni, in termini degli estimatori caratteristici delle simulazioni PIMC. Troviamo, e presentiamo, chiare indicazioni della transizione di localizzazione in una trappola armonica bidimensionale, sia per particelle non interagenti che interagenti. I nostri risultati dimostrano l'efficacia del metodo in questo particolare sistema, ponendo le basi per studi più completi volti a determinare le proprietà del sistema nel limite termodinamico e a un confronto diretto con sistemi sperimentali realistici.

Nel capitolo 1 discutiamo le proprietà geometriche dei quasicristalli e le fasi della materia condensata in sistemi su reticolo e disordinati, con attenzione particolare riservata agli atomi ultrafreddi. Il capitolo 2 consiste in un'introduzione alla superfluidità come proprietà macroscopica, e alle condizioni che ne permettono la comparsa in sistemi quantistici. Il capitolo 3 è una presentazione delle tecniche PIMC, in particolare del Worm Algorithm, strumento che permette di simulare sistemi di bosoni in modo efficiente. Nel capitolo 4 introduciamo dettagli relativi al sistema in esame, mentre nel capitolo 5 riportiamo i risultati delle nostre simulazioni. Nel capitolo 6 riassumiamo i risultati ottenuti finora e discutiamo le prospettive future, dato che il lavoro di ricerca è ancora in corso e può svilupparsi in diverse direzioni.