

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**Geração de corrente no modelo
integrável de 3+1 poços**

Wallace da Silva Carvalho

Porto Alegre - RS
Setembro de 2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Geração de corrente no modelo integrável de 3+1 poços

Wallace da Silva Carvalho

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado como requisito parcial para a obtenção do grau de bacharel em Física.

Orientadora: Profa. Dra. Angela Foerster

Coorientador: Prof. Dr. Leandro Hayato Ymai

Porto Alegre - RS

Setembro de 2022

Agradecimentos

Cursei Bacharelado em Física pela primeira vez nos anos de 2000 a 2001, na Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN. Uma série de dúvidas, problemas e questões pessoais reiteradas vezes me afastaram do curso. Hoje, após mais de 20 (vinte) anos, estou enfim concluindo-o (espero).

Sempre me sentia constrangido quando alguém me perguntava o porquê de ter insistido tanto em terminar esse curso, nunca sabia como responder. Entre outras coisas que se seguiram como consequências difíceis dessa minha decisão: gastei muito dinheiro com gasolina e multas (moro em Caxias do Sul); quase perdi minha carteira de motorista; bati meu carro; acordava de duas a três vezes por semana às 4h da manhã para dirigir até Porto Alegre, assistir aulas e voltar correndo para trabalhar o resto do dia; deixei de dar a devida atenção à minha esposa e ao meu filho; perdi inúmeros finais de semana estudando e/ou fazendo trabalhos. Digo isso apenas para ilustrar quão irracional foi essa minha decisão de terminar o curso de Bacharelado em Física na UFRGS.

Finalmente, acho que encontrei a resposta: não existe razão. É completamente irracional mesmo. Fiz isso porque amo Física e porque queria aprender. É uma das coisas que me definem. Não sou talentoso, nem mais inteligente do que a média, mas sou mais esforçado do que todos que conheço.

Mesmo com todo o esforço, nada disso teria sido possível sem o apoio (quase) incondicional:

- Da minha esposa, Jaqueline Stefani, grande e eterno amor da minha vida;
- Do meu filho, Augusto Ferreira Carvalho (espero que algum dia compreenda o que fiz);
- Do meu enteado/filho/amigo, Gustavo Stefani Sauthier, que sempre faz perguntas excelentes e me deixa embaraçado, porque quase nunca sei respondê-las;
- Do meu chefe, Dr. Fabiano de Moraes, que sempre me ajudou com a flexibilização

de horários na jornada de trabalho, quando possível;

- Da minha orientadora, Dra. Angela Foerster, e do meu co-orientador, Dr. Leandro Hayato Ymai, que me aceitaram no grupo de pesquisa, orientaram, ensinaram, acompanharam e estimularam (vocês provavelmente nunca irão compreender plenamente o quanto sou grato a vocês por isso);

- De vários professores do Instituto de Física da UFRGS, que prefiro não nomear pelo risco de deixar de fora alguém que mereceria ser citado.

A todos vocês, mas especialmente à minha esposa, que teve de suportar a maior parte do peso das minhas decisões, agradeço e dedico este trabalho.

*“I was taught at school that you should
never start a sentence without knowing the
end of it.”^a*

Paul Dirac

^aEm uma história, talvez apócrifa, esse foi o comentário feito por Dirac, em resposta a Niels Bohr, que estava enfrentando dificuldades para escrever um artigo e teria comentado: “I do not know how to finish this sentence”. Infelizmente, só me lembrei dessa citação de Dirac após ter escrito a maior parte desta monografia.

Resumo

O objetivo principal deste trabalho é gerar corrente em modelo de tunelamento quântico integrável de sistemas de átomos em condensação de Bose-Einstein com quatro poços na configuração “aberta” (3+1), identificando e estudando suas propriedades. Inicialmente será feita uma revisão desse modelo, com a apresentação dos regimes das dinâmicas, do hamiltoniano efetivo e das cargas conservadas. Em seguida, será mostrado como é possível gerar corrente no modelo de 3+1 poços a partir de protocolo em que o sistema (no regime ressonante) é submetido a um campo externo que implementa um termo de quebra de integrabilidade. O efeito geral dessa quebra de integrabilidade é alterar a dinâmica de tunelamentos, de modo que o sistema passa a apresentar circulação de partículas em um sentido bem determinado (horário ou anti-horário). Será conduzida uma análise a partir de operadores de corrente que sinalizam fluxos de partículas e serão apresentados resultados analíticos obtidos para os valores esperados de alguns operadores de interesse.

Palavras-chave: Corrente. Tunelamento. Integrabilidade. Física Quântica.

Abstract

The main purpose of this work is to generate current in an integrable four potential wells model comprised of Bose-Einstein condensates in an “open”(3+1) arrangement, identifying and studying its properties. Initially, a review of this model will be presented, including the dynamics regimes, effective hamiltonian, and conserved quantities. Next, it will be shown how it is possible to generate current in the 3+1 wells model, following a protocol in which the system (in the resonant regime) is submitted to an external field that implements an integrability condition break. The overall effect of this integrability break is to alter the tunneling dynamics in such a way as to make the particles circulate between wells in a well-defined direction (clockwise or counter-clockwise). An analysis will be conducted using current operators that measure particle flows and analytical results concerning expected values of some operators of interest will be presented.

Keywords: Current. Tunneling. Integrability. Quantum Physics.

Lista de Figuras

2.1	Esquema ilustrativo da geometria do modelo de 3+1 poços.	6
2.2	Quantidades conservadas	8
2.3	Energias	9
2.4	Dinâmicas para estado inicial $ 6, 0, 0, 0\rangle$	12
2.5	Dinâmicas para estado inicial $ 6, 0, 0, 2\rangle$	13
3.1	Protocolo para gerar estado com corrente	16
3.2	Perfil da dinâmica com corrente no modelo de 3+1 poços.	17
3.3	Protocolo numérico e dinâmicas para corrente no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$	18
3.4	Protocolo numérico e dinâmicas para corrente no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$	19
3.5	Dinâmicas para correntes no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ e no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ para um estado inicial de Fock $ N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, com $N_4 \neq 0$	20
3.6	Esquema de correntes entre dois sítios no modelo de 3+1 poços	23
3.7	Esquema de correntes por sítio no modelo de 3+1 poços	24
3.8	Esquema de corrente circular efetiva no modelo de 3+1 poços	25
3.9	Comparação entre resultados numérico e analítico para o gráfico de $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle / N \times$ μ	26
3.10	Gráfico da evolução temporal dos valores esperados dos operadores de cor- rente $\hat{\mathcal{J}}_{12}$, $\hat{\mathcal{J}}_{23}$ e $\hat{\mathcal{J}}_{31}$ para o caso da linha “f” da figura 3.11	27
3.11	Gráficos de dinâmicas e de $\langle \hat{\mathcal{J}}_i \rangle / N \times Jt$ para alguns valores do parâmetro de quebra de integrabilidade μ do gráfico da figura 3.9	28
3.12	Comparação entre resultados numéricos e analíticos para a evolução tem- poral de $\langle \hat{N}_1 \rangle / N$, $\langle \hat{N}_2 \rangle / N$ e $\langle \hat{N}_3 \rangle / N$, a partir de um estado inicial $ N, 0, 0, 0\rangle$	29
A.1	Gráficos de $\frac{d\langle \hat{N}_i \rangle}{dt} \times Jt$ no regime ressonante - Comparação entre expressões obtidas pelo hamiltoniano (2.1) e pelo hamiltoniano efetivo (2.2).	43

Notação

Todos os operadores são identificados por um chapéu ($\hat{\mathcal{O}}$).

O subscrito “eff”, p.ex., em $\langle \dots \rangle_{\text{eff}}$, indica que a quantidade foi numericamente calculada pela diagonalização do hamiltoniano efetivo. Na ausência desse subscrito, subentende-se que a quantidade foi numericamente calculada pela diagonalização do hamiltoniano geral do modelo de 3+1 poços.

Todas as expressões analíticas apresentadas são deduzidas a partir do hamiltoniano efetivo. Para tornar isso claro, identificamos a quantidade com um “*under*” tilde, p. ex., em $\langle \hat{n}_k(t) \rangle$.

Em todo trabalho foram usadas unidades tais que $\hbar = 1$.

Sumário

Agradecimentos	i
Resumo	iv
Abstract	v
Lista de Figuras	vi
Notação	vii
1 Introdução	1
2 Modelo de 3+1 poços	5
2.1 Hamiltoniano e hamiltoniano efetivo	5
2.2 Quantidades conservadas	7
2.3 Regimes	8
2.4 Dinâmicas	10
3 Geração de corrente	14
3.1 Protocolos para geração de corrente	14
3.1.1 Protocolo para gerar estado com corrente	15
3.1.2 Protocolo numérico para obtenção dos parâmetros	16
3.2 Dinâmicas com corrente e controle de circulação	18
3.3 Operadores de corrente	20
3.3.1 Operadores de corrente por sítio ($\hat{\mathcal{J}}_i$) e entre dois sítios ($\hat{\mathcal{J}}_{ij}$)	22
3.3.2 Operador de corrente circular efetiva ($\hat{\mathcal{J}}$)	24
3.4 Análise das dinâmicas com corrente	25

4 Conclusão	30
Referências Bibliográficas	32
APÊNDICES	37
A Operadores de corrente	38
A.1 Pelo hamiltoniano efetivo (2.2)	38
A.2 Pelo hamiltoniano geral integrável (2.1)	41
A.3 Comparação entre as descrições pelo hamiltoniano efetivo e pelo hamiltoniano geral integrável	42
B Expressões analíticas	44
B.1 Definições	45
B.2 Relações e identidades	45
B.3 Valor esperado do operador de corrente circular efetiva para estado $ \Psi\rangle$	48
B.4 Dinâmica dos valores esperados dos números de partículas em cada poço para estado $ \Psi\rangle$	50
B.5 Dinâmicas no regime ressonante para estado de Fock	52
C Quantidades conservadas	54
C.1 Operadores \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2	54
C.2 Operador de corrente circular efetiva $\hat{\mathcal{J}}$	56
C.3 Uma nota final sobre as quantidades conservadas	58
D Implementação	60

Capítulo 1

Introdução

No início do século XX, Satyendra Nath Bose, físico indiano, desenvolveu um método extremamente elegante, baseado apenas em Mecânica Estatística e na hipótese dos *quanta* de luz, pelo qual foi capaz de demonstrar a lei de Planck da radiação de corpo negro de uma forma mais satisfatória do que havia sido feito até então, essencialmente tratando a radiação como um gás de bósons. Bose solicitou a Einstein que intervisse para que o artigo fosse publicado na revista *Zeitschrift für Physik*. Einstein não apenas interveio como traduziu o artigo para o alemão, que foi publicado nessa revista em 1924 com o título "A lei de Planck e a hipótese dos *quanta* de luz" [1]. Ao final do artigo, Einstein escreveu a seguinte nota: "A demonstração da fórmula de Planck por Bose constitui, na minha opinião, um progresso importante. O método utilizado aqui pode conduzir à teoria quântica dos gases perfeitos, como vou expor em outro lugar". Einstein cumpriu sua promessa e publicou em seguida dois tratados, o primeiro ainda em 1924 [2], o segundo em 1925 [3]. Nesses tratados, ampliou o tratamento estatístico da radiação inicialmente conduzido por Bose, estabelecendo o que hoje conhecemos como estatística de Bose-Einstein e prevendo, entre outros efeitos, a condensação de Bose-Einstein.

Hoje sabemos que há dois tipos de partículas na natureza: férmions, que obedecem à estatística de Fermi-Dirac e ao princípio de exclusão de Pauli; e bósons (assim chamados em homenagem a Bose), que seguem a estatística de Bose-Einstein. Os bósons, porém, não obedecem ao princípio de exclusão de Pauli; portanto, em condições de temperaturas ultrafrias (próximas a 0 K), podem formar Condensados de Bose-Einstein (CBEs). Os CBEs são estados da matéria compostos por agregados de bósons em que a maioria desses bósons (idealmente todos) ocupam o estado de mais baixa energia (estado funda-

mental). Por essa razão, um CBE é essencialmente um gás de bósons “degenerado”. Esse efeito tem relação com a natureza ondulatória da matéria e pode ser observado quando o comprimento de onda de De Broglie dos bósons é comparável às distâncias interatômicas [3].

Devido às baixíssimas temperaturas necessárias para sua formação, os CBEs apenas foram observados experimentalmente setenta anos após sua previsão teórica, em um trabalho conjunto de físicos liderados por Cornell e Wieman [4], na Universidade de Colorado; e, de forma independente, Ketterle [5, 6], no MIT. Esse feito rendeu a Cornell, Wieman e Ketterle o prêmio Nobel de Física de 2001. Com o desenvolvimento tecnológico subsequente, seguiu-se um grande controle experimental sobre CBEs, que, por sua vez, possibilitou o surgimento de novas áreas de pesquisa na física de átomos ultrafrios. Entre essas, a pesquisa em sistemas integráveis de CBEs acoplados por tunelamento quântico, que é foco deste trabalho.

Um exemplo que se pode destacar na pesquisa de átomos ultrafrios é o experimento conduzido em Heidelberg, pelo grupo de Oberthaler [7]. Nesse experimento foi observado tunelamento e o fenômeno de autoaprisionamento não linear em um sistema de átomos ultrafrios de dois poços. Esse sistema pode ser qualitativamente descrito por um modelo de Bose-Hubbard de dois sítios, que possui a interessante característica de ser integrável.

Embora a maioria dos sistemas quânticos não possa ser tratada de forma analítica devido a sua complexidade, em especial sistemas de várias partículas (comumente chamados de sistemas quânticos de “muitos corpos” pela literatura), existem algumas classes de sistemas que são ditos integráveis por possuírem soluções analíticas exatas para os autoestados e autovalores do hamiltoniano.

Ao estudar o modelo de Heisenberg, que descreve as propriedades de pontos críticos e transições de fase em sistemas magnéticos por meio do tratamento quântico de *spins* interagentes, Bethe [8] propôs um *Ansatz* por meio do qual pôde mostrar que o modelo de Heisenberg possui soluções analíticas para os autoestados e autovalores de seu hamiltoniano. A partir do trabalho de Bethe, o estudo de sistemas quânticos integráveis recebeu inicialmente contribuições de Baxter [9, 10], Faddeev [11], Lieb [12], Yang [13], entre outros. Subsequentemente, este estudo se desenvolveu e expandiu muito, e hoje sistemas integráveis podem ser encontrados em diferente áreas, como por exemplo, matéria condensada [14, 15, 16], teoria de campos [17, 18], física atômica e molecular [19, 20, 21, 22]

e átomos ultrafrios [23].

Alguns dos desenvolvimentos mais recentes na área de sistemas quânticos integráveis estão relacionados ao método de espalhamento quântico inverso, às vezes chamado de método do *Ansatz* de Bethe algébrico, devido especialmente às contribuições da escola russa. Esse método foi aplicado com sucesso na obtenção de soluções exatas para o hamiltoniano do modelo de Bose-Hubbard de dois sítios [24, 25, 26, 27, 28].

Entretanto, o modelo de Bose-Hubbard apenas é integrável para dois sítios [29]. Para mais de dois sítios foi proposta uma extensão do método do espalhamento quântico inverso [30, 31] que permitiu a descoberta de uma classe geral de hamiltonianos que descrevem modelos integráveis de tunelamento quântico de $n+m$ poços, com a obtenção exata de seus autovalores, autovetores e do conjunto completo de suas quantidades conservadas. Trabalhos anteriores estudaram aplicações de alguns desses modelos na atomotrônica, um campo de estudos recente, em que se propõe dispositivos quânticos análogos a componentes de circuitos eletrônicos [32, 33]. Mostrou-se que o sistema integrável de $2+1$ poços é capaz de implementar chaveamento, em um análogo quântico ao transistor [34] (ver também [35, 36]). No sistema integrável de $2+2$ poços, de configuração fechada, desenvolveram-se protocolos para produção de estados NOON e interferometria [37, 38, 39].

Neste trabalho será estudado o sistema integrável de $3+1$ poços, que se distingue do modelo de $2+2$ poços pela geometria, apresentando configuração aberta. Para o modelo de $3+1$ poços já foi investigada uma possível aplicação em interferometria [40]. Entretanto, aqui o objetivo é investigar a geração de corrente, identificando e estudando as propriedades das correntes geradas nesse modelo. A geração de corrente e o controle do direcionamento de seu fluxo ao longo de uma rede de circuitos mais complexos é de potencial interesse para a atomotrônica. Este trabalho se justifica não apenas por esse potencial interesse, mas também como um estudo um pouco mais aprofundado de características inerentes ao controle dos fluxos de partículas e dinâmicas de tunelamentos no modelo de $3+1$ poços, visando o futuro desenvolvimento de dispositivo quântico.

O trabalho é estruturado da seguinte forma: inicialmente, no capítulo 2, será feita uma revisão do modelo de $3+1$ poços, com a discussão de alguns aspectos importantes desse modelo. Serão apresentados o hamiltoniano, o hamiltoniano efetivo (que representa adequadamente a dinâmica do modelo no regime ressonante), as quantidades conservadas e as dinâmicas para diferentes regimes, que dependem dos parâmetros de interação e tu-

nelamento usados. Em seguida, no capítulo 3, será mostrado como se pode gerar corrente no modelo de 3+1 poços. Para isso, será apresentado um protocolo para a preparação de estado em que o sistema apresenta corrente, introduzindo um termo que quebra (temporariamente) a integrabilidade do hamiltoniano. Em seguida, será mostrado um protocolo numérico capaz de identificar o parâmetro de quebra de integrabilidade que gera a dinâmica desejada. Serão definidos operadores que sinalizam a presença de fluxos de partículas entre os poços, a partir dos quais se conduzirá uma análise das dinâmicas com corrente. Finalmente, serão apresentadas expressões analíticas obtidas para esses operadores. No capítulo 4 será feita uma síntese dos resultados obtidos, com uma conclusão e a apresentação de perspectivas futuras.

O capítulo 3 consiste em uma contribuição original do autor.

Capítulo 2

Modelo de 3+1 poços

O presente capítulo tem como objetivo apresentar o modelo integrável de 3+1 poços e resumir suas propriedades. Alguns dos resultados deste capítulo foram apresentados em trabalhos anteriores (p. ex., [31, 40, 41]). Essa revisão se faz necessária para a compreensão adequada do capítulo 3, em que se discutirá a geração de corrente nesse modelo.

2.1 Hamiltoniano e hamiltoniano efetivo

O hamiltoniano do modelo integrável de 3+1 poços considerado neste trabalho é

$$\begin{aligned} \hat{H} = & U(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)^2 \\ & - \frac{J}{\sqrt{3}} \left[(\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger)\hat{a}_4 + (\hat{a}_1 + \hat{a}_2 + \hat{a}_3)\hat{a}_4^\dagger \right] \end{aligned} \quad (2.1)$$

Nessa expressão, \hat{a}_i^\dagger e \hat{a}_i são os operadores de criação e aniquilação de bósons, respectivamente, com $i = 1, \dots, 4$; $\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ é o operador de número de partículas no i -ésimo poço; U é a constante ou parâmetro de interação das partículas intra-poço e entre-poços; e J é a constante ou parâmetro de tunelamento entre os poços.

Uma interpretação intuitiva é imediata. Identificam-se a parte de interação (\hat{H}_{int}) e a parte de tunelamento (\hat{H}_{tun}) pelas expressões:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} = & U(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)^2 \\ \hat{H}_{\text{tun}} = & - \frac{J}{\sqrt{3}} \left[(\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger)\hat{a}_4 + (\hat{a}_1 + \hat{a}_2 + \hat{a}_3)\hat{a}_4^\dagger \right] \end{aligned}$$

de modo que o hamiltoniano 2.1 pode ser escrito como $\hat{H} = \hat{H}_{\text{int}} + \hat{H}_{\text{tun}}$.

Ressalte-se que esse hamiltoniano é obtido diretamente da expressão para modelos integráveis de $n+m$ poços que decorrem da generalização de modelos de Bose-Hubbard para $n+m$ poços com redefinição dos pseudovácuos, em uma versão estendida do método de espalhamento quântico inverso [31]:

$$\hat{H}_{n,m} = U(\hat{N}_A - \hat{N}_B)^2 + \mu(\hat{N}_A - \hat{N}_B) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m t_{i,j}(\hat{a}_i \hat{b}_j^\dagger + \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j)$$

desde que se faça $n = 3$, $m = 1$, $\hat{N}_A = \hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3$, $\hat{N}_B = \hat{N}_4$, $\mu = 0$ (sem potencial externo) e $t_{i,j} = -J/\sqrt{3}$, $\forall i, j$ (o modelo considerado apresenta tunelamento isotrópico).

Há dois subespaços ou classes, A e B . O subespaço A consiste nos poços 1, 2 e 3; o subespaço B consiste no poço 4.

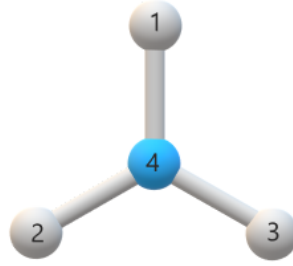


Figura 2.1: Esquema ilustrativo da geometria do modelo de 3+1 poços. Os poços são representados por esferas, os tunelamentos entre os poços são representados por cilindros. Nesta figura as cores representam a classe a que pertencem os poços: a cor cinza indica que os poços 1, 2 e 3 pertencem à classe A; a cor ciano indica que o poço 4 pertence à classe B.

O hamiltoniano (2.1) pode ser reescrito em termos de um hamiltoniano efetivo quando os efeitos de interação são muito mais significativos do que os efeitos de tunelamento.

Considere-se a quantidade $\chi = |U(N - 2N_4)/J|$, em que U é o parâmetro de interação, J é o parâmetro de tunelamento, N é o número total de partículas e N_4 é o número de partículas no poço 4¹. Dizemos que o sistema está no regime ressonante quando $\chi \gg 1$.

¹ χ é definido para a dinâmica de um estado inicial de Fock $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$. Uma forma mais geral de escrever χ , que pode ser usada para qualquer modelo integrável de $n+m$ poços, é a seguinte: $\chi = |U(M - P)/J|$, onde M é a quantidade de partículas nos poços que compõem a classe A e P é a quantidade de partículas nos poços que compõem a classe B. No modelo de 3+1 poços, tem-se $M = N_1 + N_2 + N_3$ e $P = N_4$.

Pode-se então mostrar, por teoria de perturbação dependente do tempo [40], que, para um estado inicial do tipo $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, e no regime ressonante, o hamiltoniano 2.1 pode ser representado, para fins de dinâmicas, pelo seguinte hamiltoniano efetivo:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = J_{\text{eff}} \left[(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger) + (\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger) + (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_3 \hat{a}_1^\dagger) \right] \quad (2.2)$$

com:

$$J_{\text{eff}} = \frac{J^2(N+1)}{12U(N-2N_4-1)(N-2N_4+1)}. \quad (2.3)$$

2.2 Quantidades conservadas

O método do espalhamento quântico inverso fornece duas quantidades conservadas para o modelo, \hat{H} e \hat{N} . Uma extensão desse método, conforme [31], resulta nas seguintes quantidades conservadas adicionais:

$$\hat{Q}_1 = \frac{1}{2} \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right) \quad (2.4)$$

$$\hat{Q}_2 = \frac{1}{6} \left[\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 4\hat{N}_3 + (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) - 2(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1) - 2(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2) \right] \quad (2.5)$$

Tem-se então que (ver figura 2.2)

$$[\hat{H}, \hat{N}] = [\hat{H}, \hat{Q}_1] = [\hat{H}, \hat{Q}_2] = [\hat{Q}_1, \hat{Q}_2] = 0.$$

Em analogia à condição de integrabilidade clássica de Arnold-Liouville, o sistema é dito integrável por possuir soluções exatas fornecidas pela referida extensão do método de espalhamento quântico inverso para os autoestados e autovalores do hamiltoniano (2.1) e por apresentar quatro quantidades conservadas independentes, em involução². Neste trabalho, a quantidade de poços (ou modos) equivale à quantidade de graus de liberdade do sistema. Portanto, temos quatro graus de liberdade e quatro quantidades conservadas. É importante ressaltar que a definição de integrabilidade para sistemas quânticos ainda está em discussão. Ver, por exemplo, [42].

O hamiltoniano efetivo (2.2) pode ser reescrito em termos das quantidades conservadas (2.4) e (2.5) do seguinte modo:

²Ver o Apêndice C, em especial a subseção (C.3), para discussões complementares.

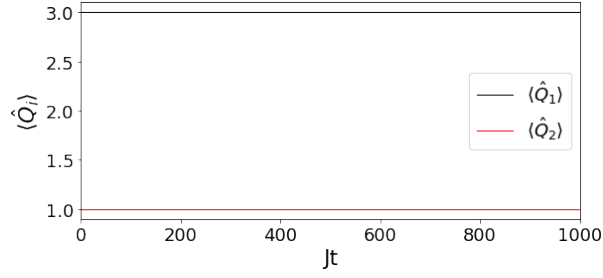


Figura 2.2: Quantidades conservadas. Como $[\hat{H}, \hat{Q}_1] = [\hat{H}, \hat{Q}_2] = 0$ e \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 não dependem explicitamente do tempo, $\frac{d\langle \hat{Q}_1 \rangle}{dt} = \frac{d\langle \hat{Q}_2 \rangle}{dt} = 0$. Portanto, $\langle \hat{Q}_1 \rangle$ e $\langle \hat{Q}_2 \rangle$ são constantes. Esse gráfico foi calculado numericamente pela diagonalização do hamiltoniano (2.1). J aqui é o parâmetro de tunelamento do hamiltoniano (2.1) que foi feito igual a 1. Como usamos $\hbar = 1$ (em todo este trabalho), J tem unidade de $[T]^{-1}$ e Jt é adimensional.

$$\hat{H}_{\text{eff}} = J_{\text{eff}} \left[2 \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 \right) - 3 \left(\hat{Q}_1 + \hat{Q}_2 \right) \right] \quad (2.6)$$

2.3 Regimes

O sistema considerado apresenta características e dinâmicas distintas dependendo do número de partículas e dos valores dos parâmetros de interação e de tunelamento. De especial interesse para este trabalho é o regime ressonante, em que o sistema apresenta dinâmicas harmônicas (o que facilita a derivação de resultados analíticos).

Na figura 2.3 são exibidos gráficos das energias do modelo de 3+1 poços em função de $|UN/J|$. O gráfico da esquerda mostra que, para $N = 6$, a partir de $|UN/J| \approx 1$ (linha vertical tracejada preta) começa a ocorrer formação de quatro bandas de energias. Gráficos das energias para diferentes valores de N apresentam comportamento semelhante, diferindo apenas na quantidade de bandas formadas. Assim, como mencionado na seção 2.1, o regime ressonante pode ser associado à condição $|U(N - 2N_4)/J| \gg 1$, o que corresponde a uma parte da região do espectro em que as bandas de energias estão bem definidas. O gráfico da direita é uma versão *zoomed out* do gráfico da esquerda, mostrando que, para $N = 6$, as quatro bandas de energias estão concentradas em torno das retas que definem $E = 0$, $E = U(N - 4)^2$, $E = U(N - 2)^2$ e $E = UN^2$.

Essas bandas de energias são formadas quando a contribuição da parte de tunelamento se torna muito menor que a contribuição da parte de interação do hamiltoniano (2.1). É fácil perceber que os estados de Fock são autoestados da parte de interação do hamiltoniano. Quando $|UN/J| \gg 1$ os autovalores de energias estarão então concentra-

dos em retas próximas àquelas retas que definem as energias da parte de interação do hamiltoniano. Para $N = 6$, temos apenas quatro possíveis energias da parte de interação (E_i) associadas a todos os estados de Fock:

$$|6, 0, 0, 0\rangle, |0, 6, 0, 0\rangle, |0, 0, 6, 0\rangle, \dots \implies E_i = U(N - 2N_4)^2 = UN^2$$

$$|5, 0, 0, 1\rangle, |0, 5, 0, 1\rangle, |0, 0, 5, 1\rangle, \dots \implies E_i = U(N - 2N_4)^2 = U(N - 2)^2$$

$$|4, 0, 0, 2\rangle, |0, 4, 0, 2\rangle, |0, 0, 4, 2\rangle, \dots \implies E_i = U(N - 2N_4)^2 = U(N - 4)^2$$

$$|3, 0, 0, 3\rangle, |0, 3, 0, 3\rangle, |0, 0, 3, 3\rangle, \dots \implies E_i = U(N - 2N_4)^2 = 0$$

Desse modo, é possível mostrar que se N for par serão formadas $(N+2)/2$ bandas de energia e se N for ímpar serão formadas $(N+1)/2$ bandas de energia quando $|UN/J| \gg 1$.

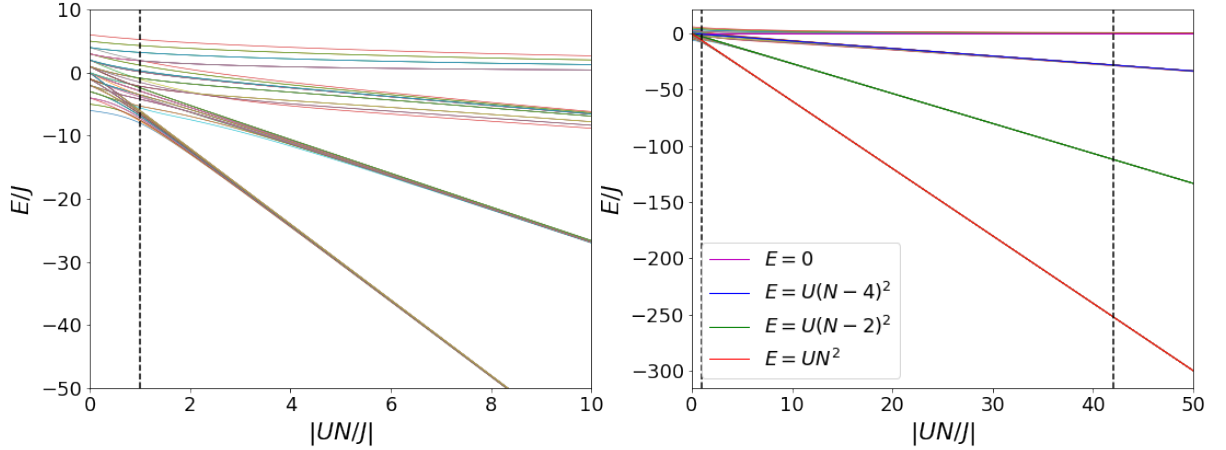


Figura 2.3: Energias. No gráfico da esquerda é possível perceber o início da formação de quatro bandas de energias a partir de $|UN/J| \approx 1$ (linha tracejada vertical preta). No gráfico da direita, mostra-se que essas quatro bandas de energias podem ser associadas aos quatro possíveis valores das energias da parte de interação do hamiltoniano: $E_i = UN^2$, $E_i = U(N - 2)^2$, $E_i = U(N - 4)^2$, $E_i = 0$. No gráfico da direita, a linha vertical tracejada preta à direita corresponde aos parâmetros $N = 6$, $U/J = -7$, usados em boa parte deste trabalho.

Embora neste trabalho nos interesseamos especialmente pelo regime ressonante, é importante mencionar que, seguindo classificação proposta em [43], podem-se definir ainda os regimes de Rabi, Josephson e Fock.

No regime de Rabi, o termo de tunelamento do hamiltoniano contribui mais para a energia total do sistema do que o termo de interação. O regime de Josephson é uma região intermediária, em que o termo de interação apresenta uma contribuição significativamente maior do que o termo de tunelamento. O regime de Fock é aquele em que a contribuição do termo de interação é ainda maior do que no regime de Josephson. O regime ressonante pode ser associado assim aos regimes de Josephson e de Fock.

Em termos mais precisos, para o modelo de 3+1 poços, dado um estado inicial $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, esses regimes correspondem às seguintes condições:

$$\begin{cases} |U(N - 2N_4)/J| \ll 1 & : \text{Regime de Rabi} \\ 1 \ll |U(N - 2N_4)/J| \ll N^2 & : \text{Regime de Josephson} \\ |U(N - 2N_4)/J| \gg N^2 & : \text{Regime de Fock} \end{cases}$$

É interessante observar que existem também modelos de Bose-Hubbard com tunelamento não-linear [44].

2.4 Dinâmicas

Seja um estado inicial qualquer $|\phi\rangle$, pode-se calcular sua evolução temporal pela seguinte expressão:

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{n=1}^d e^{-i\lambda_n t} |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \phi \rangle.$$

Aqui, λ_n são os autovalores do hamiltoniano em relação ao qual se está calculando a evolução temporal e $|\psi_n\rangle$ são os respectivos autoestados. Logo, para um operador \hat{O} qualquer:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \phi(t) | \hat{O} | \phi(t) \rangle = \sum_{n,m=1}^{d,d} e^{i\omega_{mn}t} \langle \psi_m | \hat{O} | \psi_n \rangle |\langle \psi_n | \phi \rangle|^2, \quad (2.7)$$

com $\omega_{mn} = \lambda_m - \lambda_n$ ³. Nos limites superiores dos somatórios acima, d é a dimensão do espaço de Hilbert considerado.

No caso do hamiltoniano do modelo de 3+1 poços, pode-se determinar a dimensão notando-se que os estados de Fock são bases desse espaço. Basta então contar quantos estados de Fock existem para um certo número total de partículas N . Isso equivale a um exercício comum em Mecânica Estatística (ou Análise Combinatória) de contar de quantas formas se pode distribuir N bolas idênticas em 4 caixas. Ou seja,

$$d = \frac{(N+3)!}{N!3!} = \frac{(N+3)(N+2)(N+1)}{6}$$

³Essas expressões são numericamente muito úteis e foram usadas para os cálculos dos gráficos de todas as evoluções temporais de operadores que aparecem neste trabalho, inclusive dos gráficos da figura 2.2.

Usando a equação (2.7), geramos os gráficos das figuras 2.4 e 2.5, que mostram o comportamento das dinâmicas no modelo de 3+1 poços para estados iniciais de Fock $|6, 0, 0, 0\rangle$ e $|6, 0, 0, 2\rangle$, respectivamente.

Na figura 2.4, os gráficos da coluna da esquerda, calculados numericamente pela diagonalização do hamiltoniano (2.1), exemplificam o comportamento geral das dinâmicas para diferentes regimes no modelo de 3+1 poços.

O gráfico de cima corresponde ao regime de Rabi, em que não há bandas de energias bem definidas, com contribuição maior do termo de tunelamento do hamiltoniano (2.1). Percebe-se a formação de batimentos na dinâmica. No gráfico do centro, os parâmetros usados estão na região de transição entre o regime de Rabi e o regime de Josephson, com condições próximas ao regime ressonante. No gráfico de baixo, a dinâmica exemplifica a transição entre o regime de Josephson e o regime de Fock, com $1 \ll |UN/J| \sim N^2$. Nesse último caso, o sistema está no regime ressonante. Os gráficos da direita, calculados numericamente pela diagonalização do hamiltoniano efetivo (2.2) mostram que, a medida que se entra no regime ressonante, o hamiltoniano efetivo passa a descrever a dinâmica de forma cada vez mais precisa. Quando se está no regime ressonante, não se percebe diferenças entre as dinâmicas calculadas numericamente pelo hamiltoniano (2.1) e as dinâmicas calculadas numericamente pelo hamiltoniano efetivo (2.2).

Na figura 2.5 mostramos que o sistema se comporta de forma semelhante aos gráficos da figura 2.4 quando se parte de um estado inicial $|6, 0, 0, 2\rangle$. Observa-se que, mesmo quando há partículas no poço 4, o hamiltoniano efetivo ainda descreve adequadamente a dinâmica do sistema no regime ressonante, não sendo possível notar diferenças entre as dinâmicas calculadas numericamente pelo hamiltoniano (2.1) e as dinâmicas calculadas numericamente pelo hamiltoniano efetivo (2.2). Note-se que, no regime ressonante, o sistema exhibe o fenômeno de autoaprisionamento, de modo semelhante ao que se observa no modelo de 1+1 poços [26, 27, 28], em que o valor esperado do número de partículas nos poços da classe A ($\langle \hat{N}_1 \rangle + \langle \hat{N}_2 \rangle + \langle \hat{N}_3 \rangle$) e o valor esperado do número de partículas nos poços da classe B ($\langle \hat{N}_4 \rangle$) permanecem constantes.

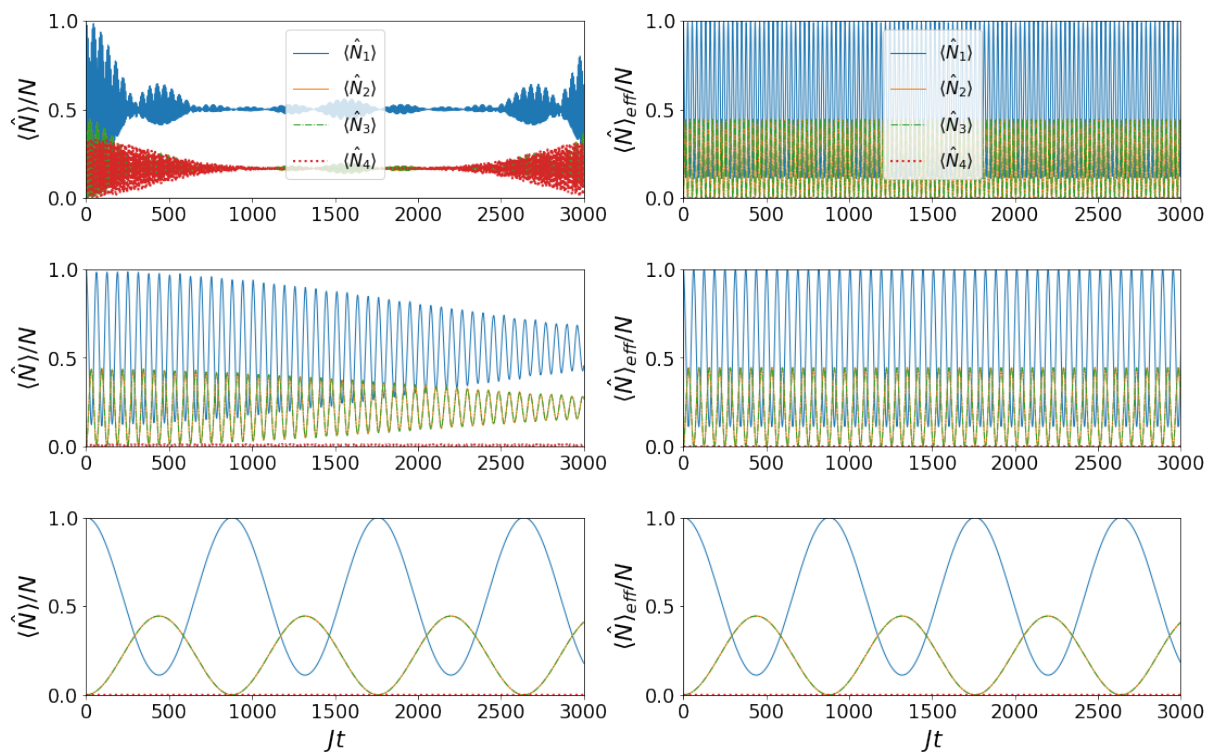


Figura 2.4: Dinâmicas para estado inicial $|6, 0, 0, 0\rangle$. Na coluna da esquerda são mostrados os gráficos das dinâmicas $(\langle \hat{N} \rangle / N)$ calculados numericamente pela diagonalização do hamiltoniano (2.1). Na coluna da direita são mostrados os gráficos das dinâmicas calculados numericamente pela diagonalização do hamiltoniano efetivo (2.2) que correspondem aos mesmos parâmetros dos gráficos da coluna da esquerda. Os parâmetros são os seguintes: na linha de cima, $U/J = -0.001$; na linha central, $U/J = -0.2$; na linha de baixo, $U/J = -7$.

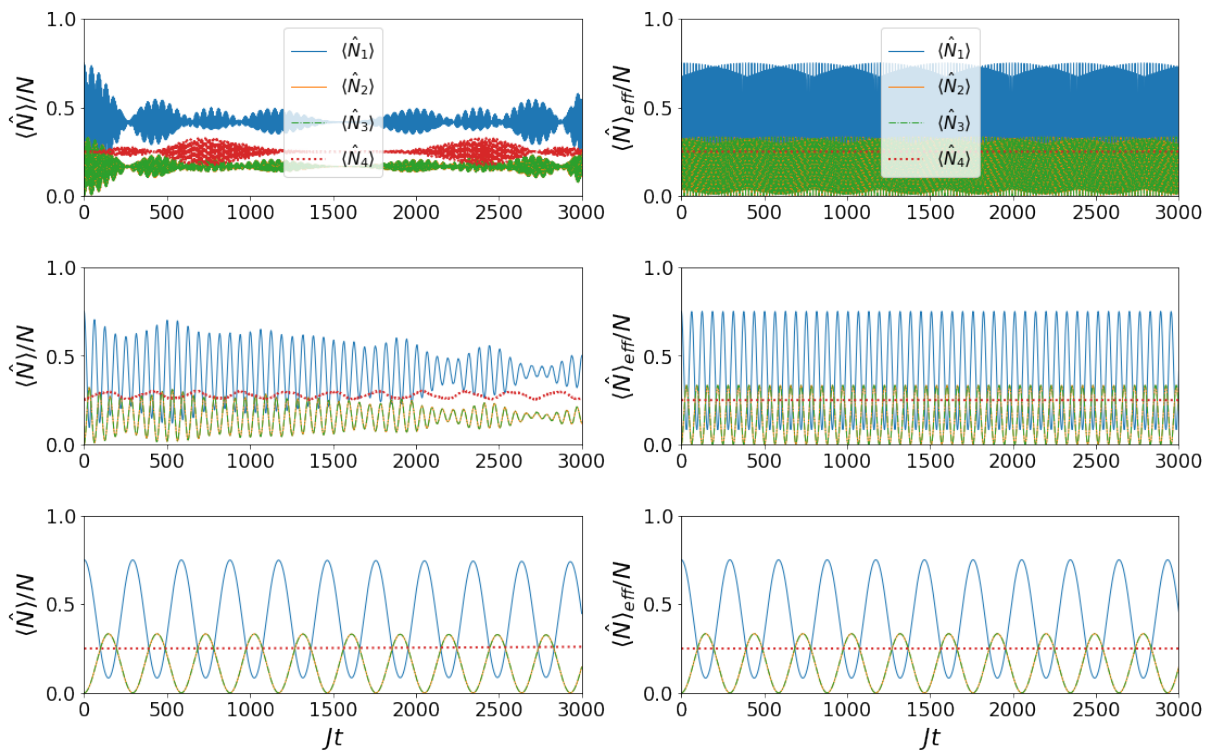


Figura 2.5: Dinâmicas para estado inicial $|6, 0, 0, 2\rangle$. Na coluna da esquerda são mostrados os gráficos das dinâmicas $(\langle \hat{N} \rangle / N)$ calculados numericamente pela diagonalização do hamiltoniano (2.1). Na coluna da direita são mostrados os gráficos das dinâmicas calculados numericamente pela diagonalização do hamiltoniano efetivo (2.2) que correspondem aos mesmos parâmetros dos gráficos da coluna da esquerda. Os parâmetros são os seguintes: na linha de cima, $U/J = -0.001$; na linha central, $U/J = -1.5$; na linha de baixo, $U/J = -7$.

Capítulo 3

Geração de corrente

Neste capítulo será mostrado como é possível controlar os tunelamentos do modelo de 3+1 poços no regime ressonante (controlando, por sua vez, as fases relativas e as amplitudes das dinâmicas), de modo a gerar circulação de partículas em um determinado sentido de interesse. Esse comportamento da dinâmica pode ser compreendido como uma corrente efetiva circulando nos poços da classe A do modelo (poços 1, 2, 3), em sentido horário ou anti-horário.

Para isso, inicialmente estabeleceremos um protocolo para manipular um estado de Fock inicial e obter um estado com corrente, a partir da introdução de um termo de quebra de integrabilidade. Será então apresentado um protocolo numérico capaz de identificar os parâmetros que geram a dinâmica desejada. Com isso, mostraremos ser possível ainda controlar o número médio de partículas circulando no modelo e o período dessa circulação. Serão definidos a seguir operadores que sinalizam a presença de corrente entre os poços. Finalmente, faremos uma análise das dinâmicas obtidas com o uso desses operadores e apresentaremos alguns resultados analíticos de interesse.

3.1 Protocolos para geração de corrente

Considere-se a adição do termo $\hat{B} = \mu(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)$ a (2.1), de modo que o hamiltoniano resultante $\hat{H}_B = \hat{H} + \hat{B}$ é:

$$\begin{aligned} \hat{H}_B = & U(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)^2 + \mu(\hat{N}_2 - \hat{N}_1) \\ & - \frac{J}{\sqrt{3}} \left[(\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger)\hat{a}_4 + (\hat{a}_1 + \hat{a}_2 + \hat{a}_3)\hat{a}_4^\dagger \right] \end{aligned} \quad (3.1)$$

A adição desse termo torna \hat{H}_B não integrável, pois os comutadores

$$[\hat{H}_B, \hat{Q}_1] = \mu(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1)$$

$$[\hat{H}_B, \hat{Q}_2] = \frac{1}{3}\mu(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 - \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3)$$

são diferentes de zero quando $\mu \neq 0$.

O parâmetro de quebra μ corresponde a um campo externo aplicado que altera a parte de interação do hamiltoniano (2.1) em relação aos poços 1 e 2. Esse parâmetro adicional permite a obtenção da dinâmica desejada, como veremos a seguir.

3.1.1 Protocolo para gerar estado com corrente

Primeiro definimos o seguinte operador de evolução temporal:

$$\hat{U}(t, \mu) = \exp(-it\hat{H}_B) = \exp\left\{-it\left[\hat{H} + \mu(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)\right]\right\}. \quad (3.2)$$

Aplicamos então o seguinte protocolo, que pode ser dividido em duas etapas. Na primeira, deixa-se que o sistema, inicialmente no estado de Fock $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, evolua pelo hamiltoniano integrável por um tempo t_0 . Na segunda etapa, aplica-se um campo externo de modo a implementar o termo de quebra $\hat{B} = \mu(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)$, e deixa-se que o sistema evolua por um intervalo de tempo $t_1 \ll t_0$ ¹. No tempo $t_0 + t_1$, desliga-se o campo externo, obtendo-se um estado $|\Psi\rangle$. Após a preparação desse estado, o sistema passa a evoluir temporalmente pelo hamiltoniano integrável². Importante ressaltar que devem ser usados parâmetros de interação (U) e tunelamento (J) de modo a garantir que o sistema permaneça no regime ressonante (tal que $\chi = |U(N - 2N_4)/J| \gg 1$). A figura 3.1 ilustra o que foi dito.

Definindo o estado inicial $|\Psi_0\rangle = |N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$ e com o operador de evolução

¹Essa restrição permite que resultados analíticos sejam obtidos. Além disso, experimentalmente é importante garantir que possíveis efeitos dissipativos decorrentes da aplicação do campo externo possam ser desprezados.

²Todos os gráficos de evolução temporal de valores esperados de operadores nas seções seguintes são obtidos numericamente a partir da diagonalização do hamiltoniano integrável **após o preparo do estado** $|\Psi\rangle$, exceto quando houver manifestação contrária.

temporal (3.2), o protocolo pode ser então matematicamente descrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= \hat{U}(t_0, 0)|\Psi_0\rangle \\ |\Psi\rangle &= \hat{U}(t_1, \mu)|\Psi_1\rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

Os parâmetros adicionais t_0 , t_1 e μ fornecem um meio de manipular o estado $|\Psi\rangle$, de modo que o sistema apresente circulação de corrente.

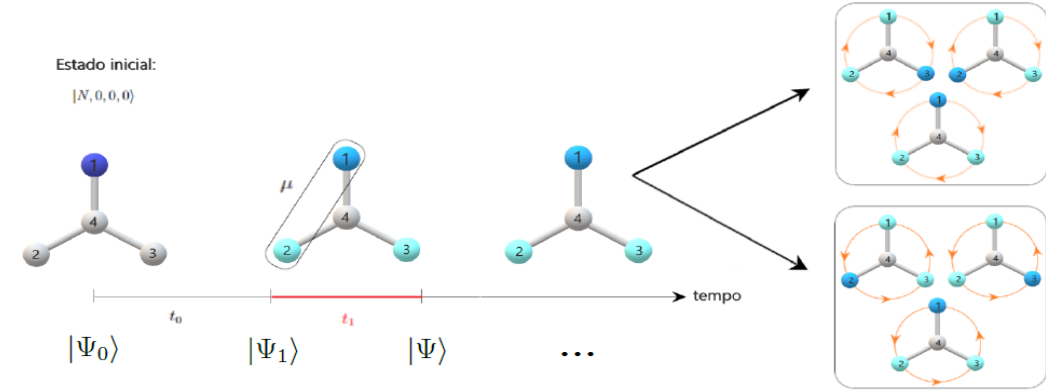


Figura 3.1: Protocolo para gerar estado com corrente. Considerando um estado inicial do tipo $|N, 0, 0, 0\rangle$, permite-se que o sistema evolua por um tempo t_0 de acordo com o hamiltoniano integrável. Ao final desse tempo, aplica-se um campo externo μ para implementar o termo de quebra $\hat{B} = \mu(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)$ e deixa-se que o sistema evolua por um tempo t_1 . Ao final do tempo $t_0 + t_1$, desliga-se o campo externo e pode-se obter um estado resultante $|\Psi\rangle$, com circulação de partículas no sentido horário (*box* de cima) ou anti-horário (*box* de baixo) após o sistema voltar a evoluir temporalmente pelo hamiltoniano integrável, dependendo dos parâmetros usados. As cores na figura representam os valores esperados de partículas em cada poço. Azul escuro equivale a N partículas, cinza equivale ao vácuo, e os demais tons de azul equivalem a valores intermediários entre 0 e N . Lembrando que o protocolo deve ser aplicado com parâmetros de interação (U) e tunelamento (J) de modo a manter o sistema no regime ressonante (tal que $\chi = |U(N - 2N_4)/J| \gg 1$).

3.1.2 Protocolo numérico para obtenção dos parâmetros

Utilizamos uma estratégia *top-bottom*. É fácil prever qual a dinâmica que desejamos obter: p. ex., se as partículas estão circulando em sentido anti-horário - o que equivale, por convenção adotada, ao sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ - o valor esperado de partículas no poço 1 vai ser máximo em um momento anterior; seguido pelo valor esperado máximo no poço 2; e o valor esperado máximo no poço 3 ocorrerá em momento posterior. Ou seja, os gráficos dos valores esperados do número de partículas nos poços 1, 2 e 3 devem estar defasados. Espera-se que os gráficos sejam periódicos. Podemos impor como condições adicionais que as defasagens entre os gráficos sejam iguais e que as amplitudes coincidam. A figura

3.2 ilustra o perfil dos gráficos da dinâmica esperada. Com base nisso, foi estabelecido um protocolo para identificar numericamente os parâmetros μ e t_0 que fornecem a dinâmica de interesse.

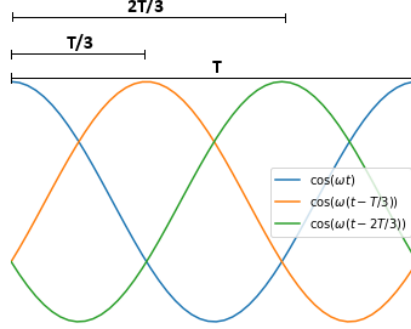


Figura 3.2: Perfil da dinâmica com corrente no modelo de 3+1 poços. Note-se que estamos desconsiderando o poço 4, uma vez que serão usados parâmetros de tunelamento (J) e de interação (U) adequados para manter o sistema no regime ressonante. Nesse regime, as partículas tunelam apenas entre os poços 1, 2 e 3. Esses gráficos foram gerados com funções cosseno defasadas entre si por $T/3$, com T sendo o período das três funções.

No regime ressonante, para um estado de Fock inicial do tipo $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, as dinâmicas dos poços 1, 2 e 3 têm períodos iguais e bem determinados, pela expressão³

$$T = \frac{2\pi}{3|J_{\text{eff}}|} \quad (3.4)$$

com J_{eff} dado pela equação (2.3).

Portanto, para o sentido de circulação $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$, se calcularmos numericamente os valores esperados do número de partículas no poço 1 em $t = 0$ ($\langle \Psi | \hat{N}_1 | \Psi \rangle = \langle \hat{N}_1(t = 0) \rangle$), o valor esperado do número de partículas no poço 2 no tempo $t = T/3$ ($\langle \Psi | \hat{U}^\dagger(T/3, 0) \hat{N}_2 \hat{U}(T/3, 0) | \Psi \rangle = \langle \hat{N}_2(t = T/3) \rangle$) e o valor esperado do número de partículas no poço 3 no tempo $t = 2T/3$ ($\langle \Psi | \hat{U}^\dagger(2T/3, 0) \hat{N}_3 \hat{U}(2T/3, 0) | \Psi \rangle = \langle \hat{N}_3(t = 2T/3) \rangle$), uma condição necessária (mas não suficiente) para a obtenção da dinâmica descrita é que esses valores sejam iguais, ou seja:

$$\langle \hat{N}_1(t = 0) \rangle = \langle \hat{N}_2(t = T/3) \rangle = \langle \hat{N}_3(t = 2T/3) \rangle \quad (3.5)$$

Para identificar a dinâmica com sentido de circulação $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$, a lógica é análoga, bastando fazer a seguinte alteração:

³Ver Apêndice B.

$$\langle \hat{N}_1(t=0) \rangle = \langle \hat{N}_2(t=2T/3) \rangle = \langle \hat{N}_3(t=T/3) \rangle \quad (3.6)$$

3.2 Dinâmicas com corrente e controle de circulação

Para facilitar a obtenção dos parâmetros, fixamos $Jt_1 = 1$. Restam ser obtidos os valores para os parâmetros μ e t_0 que fornecem a dinâmica desejada.

Usando os protocolos descritos na seção 3.1, preparamos um estado $|\Psi\rangle$ e procuramos pelos parâmetros t_0 e μ , tal que ocorra cruzamento entre os gráficos de $\langle \hat{N}_1(t=0) \rangle \times \mu$, $\langle \hat{N}_2(t=T/3) \rangle \times \mu$ e $\langle \hat{N}_3(t=2T/3) \rangle \times \mu$. Ver a figura 3.3.

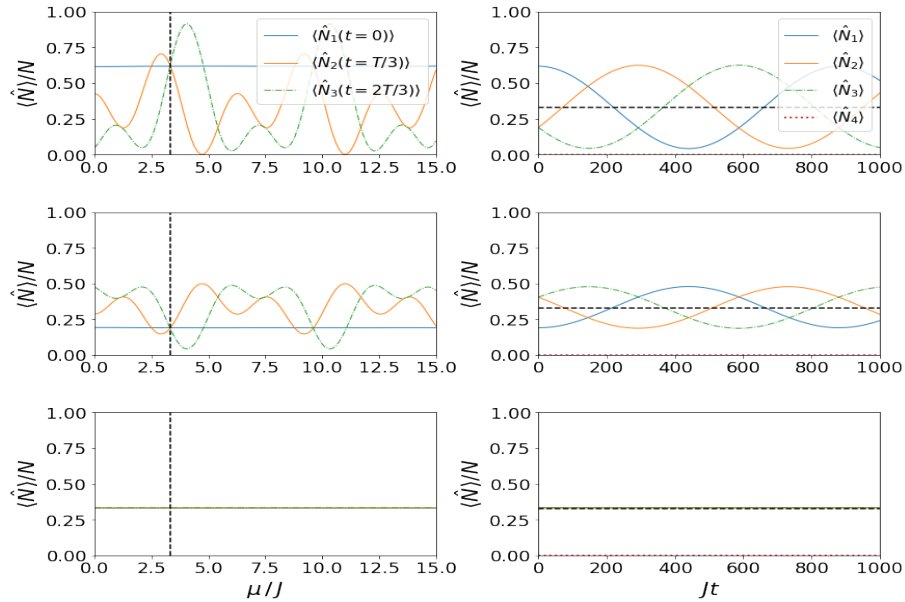


Figura 3.3: Protocolo numérico e dinâmicas para corrente no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$. Na coluna da esquerda são mostrados os gráficos do protocolo numérico utilizado para determinar os parâmetros t_0 e μ . As linhas verticais tracejadas pretas determinam os pontos de cruzamento entre os gráficos e o parâmetro adimensional $\mu/J = 3.33$, que é o mesmo em todos os casos. Na coluna da direita são mostrados os gráficos das dinâmicas correspondentes. O primeiro gráfico no canto superior direito corresponde a um estado inicial de Fock $|N, 0, 0, 0\rangle$. O gráfico do meio corresponde a um estado inicial de Fock $|0, N/2, N/2, 0\rangle$. O gráfico de baixo corresponde a um estado inicial de Fock $|N/3, N/3, N/3, 0\rangle$. As linhas horizontais tracejadas pretas correspondem a $\langle \hat{N}_j \rangle / N = 0.33$. Todas as dinâmicas acima apresentam circulação de partículas no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$. Para esses gráficos tem-se $N = 6$, $U/J = -7$, $Jt_0 = 200$, $Jt_1 = 1$.

Pode-se controlar a intensidade média da corrente em circulação pelo estado de Fock inicial. Um estado altamente assimétrico como $|N, 0, 0, 0\rangle$ favorece o surgimento de uma corrente maior, enquanto que, para um estado de Fock altamente simétrico como $|N/3, N/3, N/3, 0\rangle$, independente do parâmetro μ utilizado, não há corrente. Para o estado $|0, N/2, N/2, 0\rangle$, a intensidade da corrente é intermediária: ocorre circulação de partículas, mas essa circulação é menor do que para o caso do estado inicial $|N, 0, 0, 0\rangle$

(no caso intermediário circulam ~ 2 partículas, enquanto que, no caso de corrente "forte", circulam ~ 4 partículas).

Usando os mesmos protocolos, mas trocando a condição de cruzamento entre os gráficos $\langle \hat{N}_1(t=0) \rangle \times \mu$, $\langle \hat{N}_2(t=T/3) \rangle \times \mu$ e $\langle \hat{N}_3(t=2T/3) \rangle \times \mu$ pelo cruzamento entre os gráficos $\langle \hat{N}_1(t=0) \rangle \times \mu$, $\langle \hat{N}_2(t=2T/3) \rangle \times \mu$ e $\langle \hat{N}_3(t=T/3) \rangle \times \mu$, obtivemos resultados semelhantes, mas agora com dinâmicas de corrente no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$. Ver a figura 3.4.

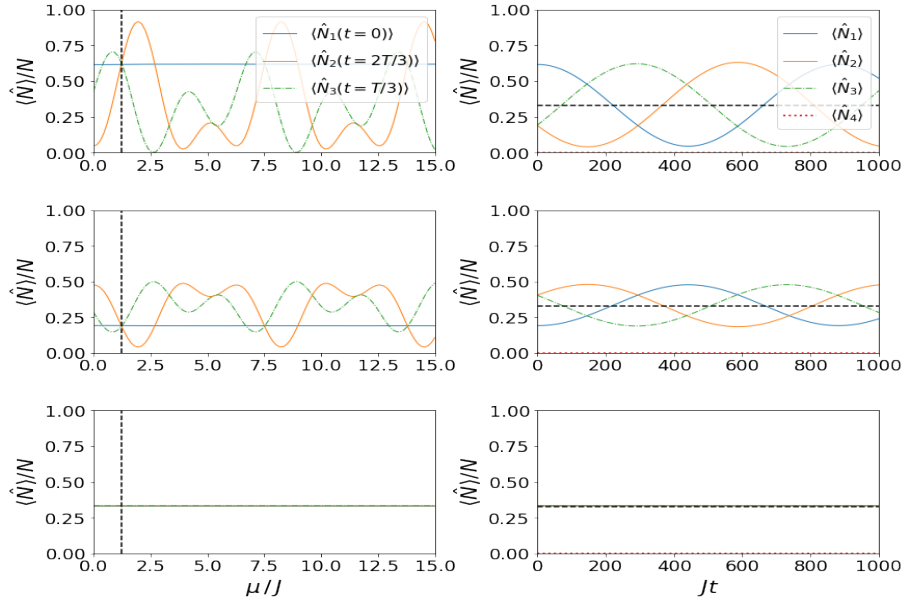


Figura 3.4: Protocolo numérico e dinâmicas para corrente no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$. Os comentários são os mesmos que já foram feitos na figura 3.3, exceto que, aqui, $\mu/J = 1.235$ e todas as dinâmicas apresentam circulação de partículas no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$. Novamente, $N = 6$, $U/J = -7$, $Jt_0 = 200$, $Jt_1 = 1$.

Como J_{eff} depende do número de partículas no poço 4 e o período de oscilação das dinâmicas no regime ressonante depende de J_{eff} , é possível aumentar a frequência (ou, de forma equivalente, diminuir o período) das dinâmicas usando um estado inicial de Fock com partículas no poço 4. Das expressões analíticas para J_{eff} (2.3) e para o período T (3.4), é possível verificar que, para N fixo, a frequência aumenta monotonamente com o incremento de N_4 , de $N_4 = 0$ até $N_4 = N/2$, se N for par; ou de $N_4 = 0$ até $N_4 = (N-1)/2$, se N for ímpar. Na figura 3.5 são apresentadas dinâmicas com circulação de partículas no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ e no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ para estados iniciais de Fock do tipo $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, com $N = N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = 8$ e $N_4 = 2$. Nessa configuração foram obtidos resultados semelhantes aos gráficos das dinâmicas das figuras 3.3 e 3.4, com ~ 2 partículas circulando no caso intermediário e ~ 4 partículas circulando no caso de corrente mais intensa, porém com um período de circulação aproximadamente 4 vezes menor.

No regime ressonante, o número de partículas circulando nos poços 1, 2 e 3 é conservado. Isso é uma consequência de efeitos de segunda ordem e do fato do hamiltoniano do modelo poder ser representado pelo hamiltoniano efetivo 2.2. Para $\hat{N}_{123} = \hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3$, $[\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{N}_{123}] = [\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{N}_4] = 0$, o que decorre da equação da continuidade⁴. Portanto, p. ex., o estado inicial $|8, 0, 0, 2\rangle$ possui dinâmicas com corrente equivalentes àquelas obtidas para o estado inicial $|6, 0, 0, 0\rangle$, mas com período menor.

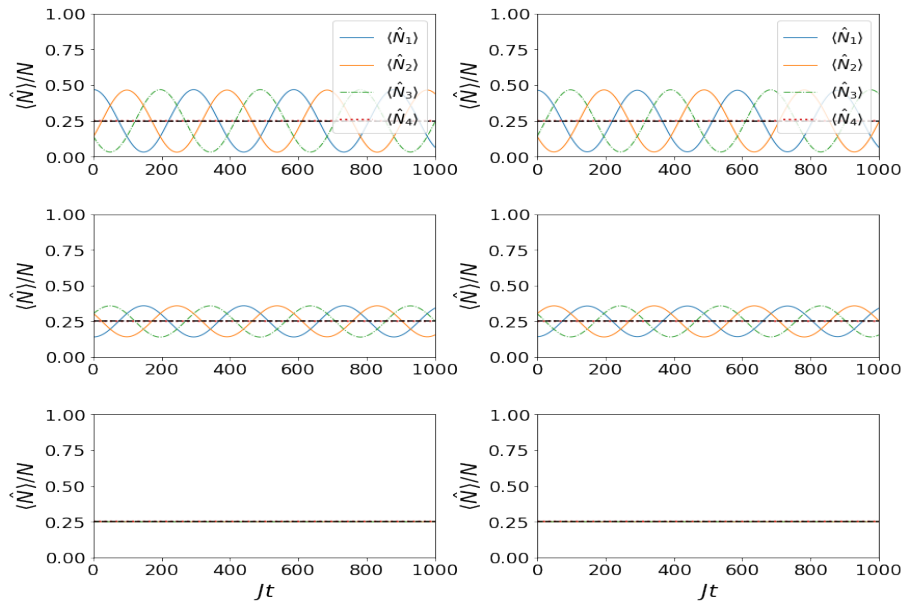


Figura 3.5: Dinâmicas para correntes no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ e no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ para um estado inicial de Fock $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, com $N_4 \neq 0$. Os gráficos dos protocolos numéricos são semelhantes aos da figura 3.4 e, portanto, foram omitidos. Os gráficos da coluna da esquerda correspondem a dinâmicas no sentido de circulação $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$; os gráficos da coluna da direita correspondem a dinâmicas no sentido de circulação $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$. Os gráficos da primeira linha correspondem a um estado inicial de Fock $|N - N_4, 0, 0, N_4\rangle$. Os gráficos centrais correspondem a um estado inicial de Fock $|0, (N - N_4)/2, (N - N_4)/2, N_4\rangle$. Os gráficos da última linha correspondem a um estado inicial de Fock $|(N - N_4)/3, (N - N_4)/3, (N - N_4)/3, N_4\rangle$. As linhas horizontais tracejadas pretas correspondem a $\langle \hat{N}_j \rangle / N = 0.25$. Parâmetros: $N = 8$, $N_4 = 2$, $U/J = -7$, $Jt_0 = 359$, $Jt_1 = 1$; $\mu/J = 3.33$, nos gráficos da esquerda; $\mu/J = 1.235$, nos gráficos da direita.

3.3 Operadores de corrente

Nesta seção serão apresentados observáveis que podem ser utilizados para analisar a presença de correntes no modelo de 3+1 poços no regime ressonante. Essa análise será posteriormente conduzida na seção 3.4.

Há extensa discussão na literatura sobre operadores de corrente em sistemas bosônicos de muitos corpos quânticos (p. ex., [45, 46, 47]). Esses operadores são úteis

⁴Ver Apêndice A.

para a compreensão do comportamento do modelo estudado e para se obter uma intuição física desse comportamento. Além disso, as expressões analíticas para as dinâmicas dos poços dependem de alguns desses operadores.

Para a definição desses operadores de corrente vamos usar o hamiltoniano efetivo (2.2). A principal razão para isso é que o hamiltoniano efetivo fornece definições de correntes que são mais naturais para a descrição do modelo no regime ressonante, facilitando a visualização dos fluxos de partículas e da relação desses fluxos com os valores esperados dos números de partículas nos poços 1, 2 e 3. Além disso, por meio do hamiltoniano efetivo é imediatamente claro que a equação da continuidade é obedecida entre os poços 1, 2 e 3 no regime ressonante. Obviamente, seria possível definir operadores de corrente pelo hamiltoniano geral integrável do modelo de 3+1 poços (2.1) e a descrição do sistema por meio de operadores de correntes definidos pelo hamiltoniano efetivo e por meio de operadores de correntes definidos pelo hamiltoniano geral integrável devem ser equivalentes no regime ressonante⁵.

No hamiltoniano efetivo não há termos de tunelamento envolvendo o poço 4, mas apenas termos de tunelamento entre os poços 1, 2 e 3. Sendo assim, no regime ressonante, o modelo integrável de 3+1 poços com tunelamento isotrópico pode ser representado por um circuito fechado, ou *loop* em anel, composto pelos poços 1, 2 e 3, com parâmetros de tunelamento efetivos também isotrópicos (J_{eff}) dados por (2.3). O poço 4 apenas influencia os valores dos parâmetros de tunelamento efetivos e, por conseguinte, também o período das dinâmicas, conforme (3.4).

Na notação que adotamos neste trabalho, os operadores de corrente se distinguem pela quantidade de índices: os operadores de corrente por sítio, que representam o fluxo total de partículas que entram em um determinado poço i , possuem apenas um índice ($\hat{\mathcal{J}}_i$); os operadores de corrente entre sítios, que representam o fluxo de partículas que entram em um poço i vindo de um poço j , possuem dois índices ($\hat{\mathcal{J}}_{ij}$); o operador de corrente circular efetiva, que representa o fluxo direcional de partículas em um circuito fechado entre os poços 1, 2 e 3 não possui índices ($\hat{\mathcal{J}}$).

⁵Ver Apêndice A.

3.3.1 Operadores de corrente por sítio ($\hat{\mathcal{J}}_i$) e entre dois sítios ($\hat{\mathcal{J}}_{ij}$)

O modo mais natural de se definir operadores de corrente em um modelo de tunelamento de vários poços é a partir da equação de Heisenberg:

$$\frac{d\hat{N}_i}{dt} = i[\hat{H}, \hat{N}_i] \quad (3.7)$$

Note-se que essa equação decorre do *picture* de Heisenberg, em que os operadores evoluem temporalmente em vez dos estados, mas o cálculo do comutador $[\hat{H}, \hat{N}_i]$ independe do *picture* considerado.

No regime ressonante do modelo de 3+1 poços pode-se usar o hamiltoniano efetivo 2.2, de modo que a equação de Heisenberg fornece⁶

$$\frac{d\hat{N}_i}{dt} = i[\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{N}_i] = -iJ_{\text{eff}} \left[\hat{a}_i^\dagger \left(\sum_{j \neq i}^3 \hat{a}_j \right) - \left(\sum_{j \neq i}^3 \hat{a}_j^\dagger \right) \hat{a}_i \right] \quad (3.8)$$

motivando a definição

$$\hat{\mathcal{J}}_i \stackrel{\text{def}}{=} i \left[\hat{a}_i^\dagger \left(\sum_{j \neq i}^3 \hat{a}_j \right) - \left(\sum_{j \neq i}^3 \hat{a}_j^\dagger \right) \hat{a}_i \right] \quad (3.9)$$

De (3.8), decorre que a equação da continuidade é obedecida entre os poços 1, 2 e 3 no regime ressonante:

$$\frac{d\hat{N}_1}{dt} + \frac{d\hat{N}_2}{dt} + \frac{d\hat{N}_3}{dt} = -J_{\text{eff}} \left(\hat{\mathcal{J}}_1 + \hat{\mathcal{J}}_2 + \hat{\mathcal{J}}_3 \right) = 0$$

o que significa que $N_1 + N_2 + N_3$ se mantém constante e que podemos considerar que os poços 1, 2 e 3 formam um circuito fechado nesse regime.

Segue-se naturalmente a definição dos operadores de corrente entre dois sítios $\hat{\mathcal{J}}_{ij}$:

$$\hat{\mathcal{J}}_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} i \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \right], \text{ com } i, j = 1, 2, 3 \text{ e } i \neq j. \quad (3.10)$$

Pela definição acima é fácil perceber que esses operadores são antissimétricos nos índices, i.e., $\hat{\mathcal{J}}_{ij} = -\hat{\mathcal{J}}_{ji}$. Os operadores $\hat{\mathcal{J}}_i$ podem então ser construídos a partir dos

⁶Uma derivação completa da equação (3.8) segue no Apêndice A.

operadores $\hat{\mathcal{J}}_{ij}$:

$$\hat{\mathcal{J}}_i = \sum_{j \neq i}^3 \hat{\mathcal{J}}_{ij}$$

A equação (3.8) fornece um meio de se interpretar fisicamente os operadores $\hat{\mathcal{J}}_i$ e $\hat{\mathcal{J}}_{ij}$:⁷

$$\frac{d\langle \hat{N}_i \rangle}{dt} = -J_{\text{eff}} \langle \hat{\mathcal{J}}_i \rangle = -J_{\text{eff}} \langle \hat{\mathcal{J}}_{ij} \rangle - J_{\text{eff}} \langle \hat{\mathcal{J}}_{ik} \rangle, \quad (3.11)$$

com $i, j, k = 1, 2, 3$ e $i \neq j \neq k$.

Portanto, $-J_{\text{eff}} \langle \hat{\mathcal{J}}_i \rangle$ pode ser interpretado como o fluxo médio de partículas que entra no poço i , vindo dos demais poços (exceto do poço 4). E de modo semelhante, $-J_{\text{eff}} \langle \hat{\mathcal{J}}_{ij} \rangle$ pode ser interpretado como o fluxo médio de partículas que entra no poço i , vindo do poço j .⁸

Um esquema ilustrativo dos operadores de corrente entre dois sítios $\hat{\mathcal{J}}_{ij}$ é mostrado na figura 3.6.

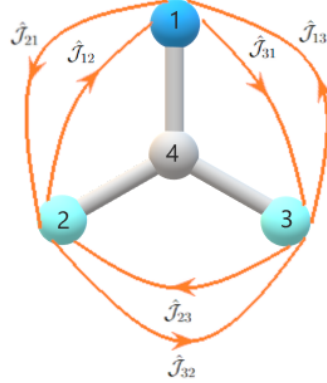


Figura 3.6: Esquema de correntes entre dois sítios no modelo de 3+1 poços. Note-se que os operadores de corrente entre dois sítios são antissimétricos nos índices ($\hat{\mathcal{J}}_{ij} = -\hat{\mathcal{J}}_{ji}$). O sentido das setas representa o sentido do fluxo para o qual $\langle \hat{\mathcal{J}}_{ij} \rangle > 0$, considerando $J_{\text{eff}} < 0$.

Como será visto adiante na seção 3.4, a amplitude e a fase da evolução temporal pelo hamiltoniano integrável dos valores esperados do número de partículas em cada poço no regime ressonante dependem dos operadores $\hat{\mathcal{J}}_i$. Um esquema ilustrativo desses operadores é mostrado na figura 3.7.

⁷O mesmo resultado pode ser obtido pelo teorema de Ehrenfest. Como os operadores \hat{N}_i não dependem explicitamente do tempo: $\frac{d\langle \hat{N}_i \rangle}{dt} = -i\langle [\hat{N}_i, \hat{H}] \rangle = -J_{\text{eff}} \langle \hat{\mathcal{J}}_i \rangle$.

⁸Se $J_{\text{eff}} > 0$, $\hat{\mathcal{J}}_{ji}$ representa o fluxo de partículas que entra no poço i , vindo do poço j ; se $J_{\text{eff}} < 0$, $\hat{\mathcal{J}}_{ij}$ representa o fluxo de partículas que entram no poço i , vindo do poço j . Neste trabalho, J_{eff} é sempre negativo, portanto, para simplificar, podemos dizer que $\hat{\mathcal{J}}_{ij}$ representa o fluxo de partículas que entram no poço i , vindo do poço j .

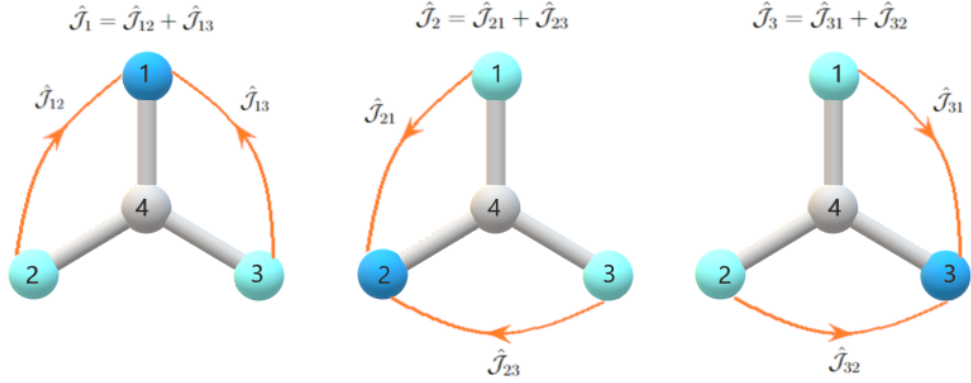


Figura 3.7: Esquema de correntes por sítio no modelo de 3+1 poços. O sentido das setas representa o sentido do fluxo para o qual $\langle \hat{\mathcal{J}}_{ij} \rangle > 0$, considerando $J_{\text{eff}} < 0$.

3.3.2 Operador de corrente circular efetiva ($\hat{\mathcal{J}}$)

Considere-se ainda o seguinte operador⁹, construído a partir dos operadores de corrente entre dois sítios (3.10):

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{J}} &= \sum_{i=1}^3 \hat{\mathcal{J}}_{i i+1} \quad [\text{com a condição periódica } i+1=1, \text{ se } i=3] \\
 &= \hat{\mathcal{J}}_{12} + \hat{\mathcal{J}}_{23} + \hat{\mathcal{J}}_{31} \\
 &= i \left[\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \right] - i \left[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2 \right] \\
 &= \hat{\mathcal{J}}_R - \hat{\mathcal{J}}_L
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

$\hat{\mathcal{J}}$ representa a corrente líquida (ou efetiva) que percorre o modelo no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ (sentido horário, por convenção). Essa corrente é dita “líquida” porque representa a diferença entre o fluxo de partículas que circula no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ ($\hat{\mathcal{J}}_R$) e o fluxo de partículas que circula no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ ($\hat{\mathcal{J}}_L$), mas também porque mesmo que, em uma situação hipotética, $\langle \hat{\mathcal{J}}_{12} \rangle = \langle \hat{\mathcal{J}}_{23} \rangle = 0$, se $\langle \hat{\mathcal{J}}_{31} \rangle > 0$, então $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle > 0$. Ou seja, mesmo que não haja um fluxo médio de partículas de sentido bem definido entre os poços 1 e 2 e entre os poços 2 e 3, um fluxo médio de partículas de sentido bem definido entre os poços 3 e 1 já garante que $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle \neq 0$. Um esquema ilustrativo desse operador de corrente é mostrado na figura 3.8.

O operador de corrente circular efetiva é uma quantidade conservada do sistema,

⁹Nas referências [45, 47] esse operador é chamado de operador de corrente “global” ou de corrente “quiral”.

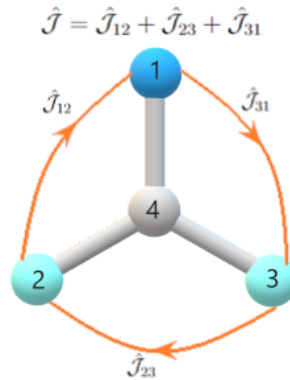


Figura 3.8: Esquema de corrente circular efetiva no modelo de 3+1 poços. O sentido das setas representa o sentido do fluxo para o qual $\langle \hat{\mathcal{J}}_{ij} \rangle > 0$, considerando $J_{\text{eff}} < 0$.

i.e., $[H, \hat{\mathcal{J}}] = [H_{\text{eff}}, \hat{\mathcal{J}}] = 0$ ¹⁰.

3.4 Análise das dinâmicas com corrente

Usando o hamiltoniano efetivo, fomos capazes de obter a seguinte expressão analítica para o valor esperado do operador de corrente circular efetiva ($\hat{\mathcal{J}}$), para um estado $|\Psi\rangle$, preparado conforme o protocolo descrito pelas expressões (3.3), para um estado inicial $|N, 0, 0, 0\rangle$ ¹¹:

$$\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle = N \left\{ \frac{2}{3} \sin(3\phi) \left[\cos(2\theta) - \cos(\theta) \right] - \frac{4}{9} \sin^2\left(\frac{3\phi}{2}\right) \left[\sin(2\theta) + \sin(\theta) \right] \right\}, \quad (3.13)$$

com $\phi = t_0 J_{\text{eff}}$ e $\theta = t_1 \mu$.

Na figura 3.9 são apresentados os gráficos numérico e analítico (pela equação 3.13) para $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle / N$ em função de μ / J . É possível observar uma boa concordância da expressão analítica (3.13) com o resultado numérico, o que mais uma vez justifica o uso do hamiltoniano efetivo na descrição do modelo no regime ressonante. Os valores dos parâmetros N , U , J , t_0 e t_1 são os mesmos dos gráficos das figuras 3.3 e 3.4.

Observa-se que a variação do parâmetro de quebra de integrabilidade μ tem como efeito uma alteração na dinâmica dos tunelamentos do sistema, causando uma circulação

¹⁰Ver Apêndice A.

¹¹Ver Apêndice B.

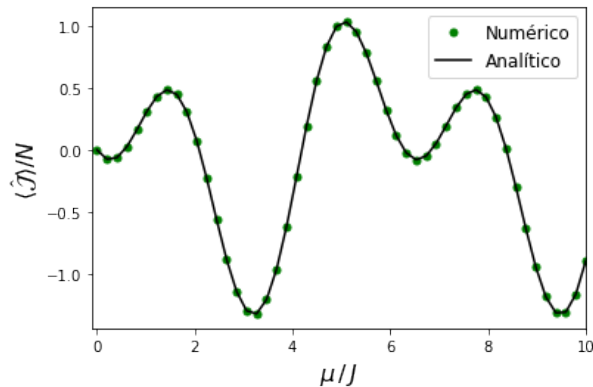


Figura 3.9: Comparação entre resultados numérico (pela diagonalização do hamiltoniano) e analítico (pela equação 3.13) para o gráfico de $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle / N \times \mu / J$. Parâmetros: $N = 6$, $U/J = -7$, $Jt_0 = 200$, $Jt_1 = 1$.

direcional de partículas no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ ou no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ quando $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle \neq 0$.

A figura 3.11 apresenta os gráficos das dinâmicas em cada poço e as evoluções temporais dos valores esperados dos operadores de corrente por sítio e do operador de corrente circular efetiva para alguns valores de μ/J do gráfico da figura 3.9. Nota-se que, como já esperado, o operador de corrente circular efetiva é uma quantidade conservada do sistema. Além disso, fica claro que os operadores de corrente por sítio estão relacionados aos operadores de número de partículas em cada poço por uma derivada temporal, i.e., $\frac{d}{dt} \langle \hat{N}_i(t) \rangle = -J_{\text{eff}} \langle \hat{\mathcal{J}}_i(t) \rangle$, como também seria esperado, já que os operadores de corrente por sítio foram definidos pela equação de Heisenberg. Em particular, os máximos e mínimos dos gráficos das dinâmicas em cada poço estão associados a pontos em que as evoluções temporais dos valores esperados dos operadores de corrente por sítio são iguais a zero. Percebe-se ainda que existe uma certa correlação entre o valor esperado do operador de corrente circular efetiva e o sentido de circulação, i.e., quando $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle > 0$, as partículas circulam no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$, quando $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle < 0$, as partículas circulam no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$.

Os gráficos na linha “f” da figura 3.11 mostram, porém, que a correlação entre o sentido de circulação e a condição $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle \neq 0$ não é perfeita. Embora, nesse caso, $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle$ seja maior do que zero, o valor esperado do número de partículas permanece aproximadamente constante em cada poço. Isso ocorre porque, para esse parâmetro de quebra, os valores esperados dos operadores de corrente entre dois sítios $\langle \hat{\mathcal{J}}_{31} \rangle$, $\langle \hat{\mathcal{J}}_{23} \rangle$ e $\langle \hat{\mathcal{J}}_{12} \rangle$ são todos constantes, positivos e aproximadamente iguais (ver figura 3.10), o que equivale a dizer que o fluxo médio de partículas que entra é aproximadamente igual ao fluxo médio de

partículas que sai de cada poço, ou seja, $\frac{d}{dt}\langle\hat{N}_i(t)\rangle \approx 0, \forall i$. Como se pode perceber, mesmo nesse caso há um fluxo de sentido bem definido de partículas, entretanto, como os fluxos entre os poços são iguais e de mesmo sentido, o valor esperado do número de partículas em cada poço não reflete o comportamento dos fluxos.

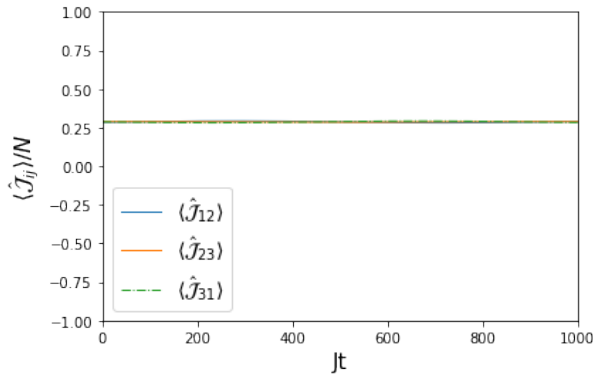


Figura 3.10: Gráfico da evolução temporal dos valores esperados dos operadores de corrente \hat{J}_{12} , \hat{J}_{23} e \hat{J}_{31} para o caso da linha “f” da figura 3.11.

Os gráficos nas linhas “c” e “e” da figura 3.11 são os mesmos já apresentados no canto superior direito das figuras 3.4 e 3.3, respectivamente. São reproduzidos aqui para que se note a consistência da circulação de partículas no sentido $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ e no sentido $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ com as condições $\langle\hat{J}\rangle > 0$ e $\langle\hat{J}\rangle < 0$. Esses gráficos não correspondem a máximos ou mínimos do valor esperado do operador de corrente circular efetiva, porém. Um exemplo de máximo é mostrado nos gráficos da linha “d”. Os gráficos da linha “b” ilustram o comportamento do sistema com parâmetro de quebra $\mu = 0$.

Com o uso do hamiltoniano efetivo também fomos capazes de encontrar expressões analíticas para as dinâmicas dos valores esperados dos números de partículas em cada poço para um estado $|\Psi\rangle$ preparado conforme o protocolo descrito pelas expressões (3.3), a partir de um estado inicial $|N, 0, 0, 0\rangle$:

$$\langle\hat{n}_k(t)\rangle = \langle\hat{n}_k\rangle_0 + A_k - \alpha_k \cos(3\varphi - \beta_k), \quad (3.14)$$

com $\hat{n}_k = \hat{N}_k/N$, $\langle\hat{n}_k\rangle_0$ sendo o valor esperado do número de partículas normalizado no poço k no tempo $t = 0$ (começo da evolução temporal integrável após o preparo do estado $|\Psi\rangle$), com $k=1, 2, 3$; e $\varphi = tJ_{\text{eff}}$. A dependência temporal está apenas no ângulo φ . Os termos α_k e β_k dependem dos respectivos valores esperados dos operadores de corrente por sítio no tempo $t = 0$, $\langle\hat{J}_k\rangle_0$, e dos termos A_k . Estes últimos dependem dos $\langle\hat{n}_k\rangle_0$ e dos valores esperados de alguns operadores de tunelamento no tempo $t = 0$. Os valores

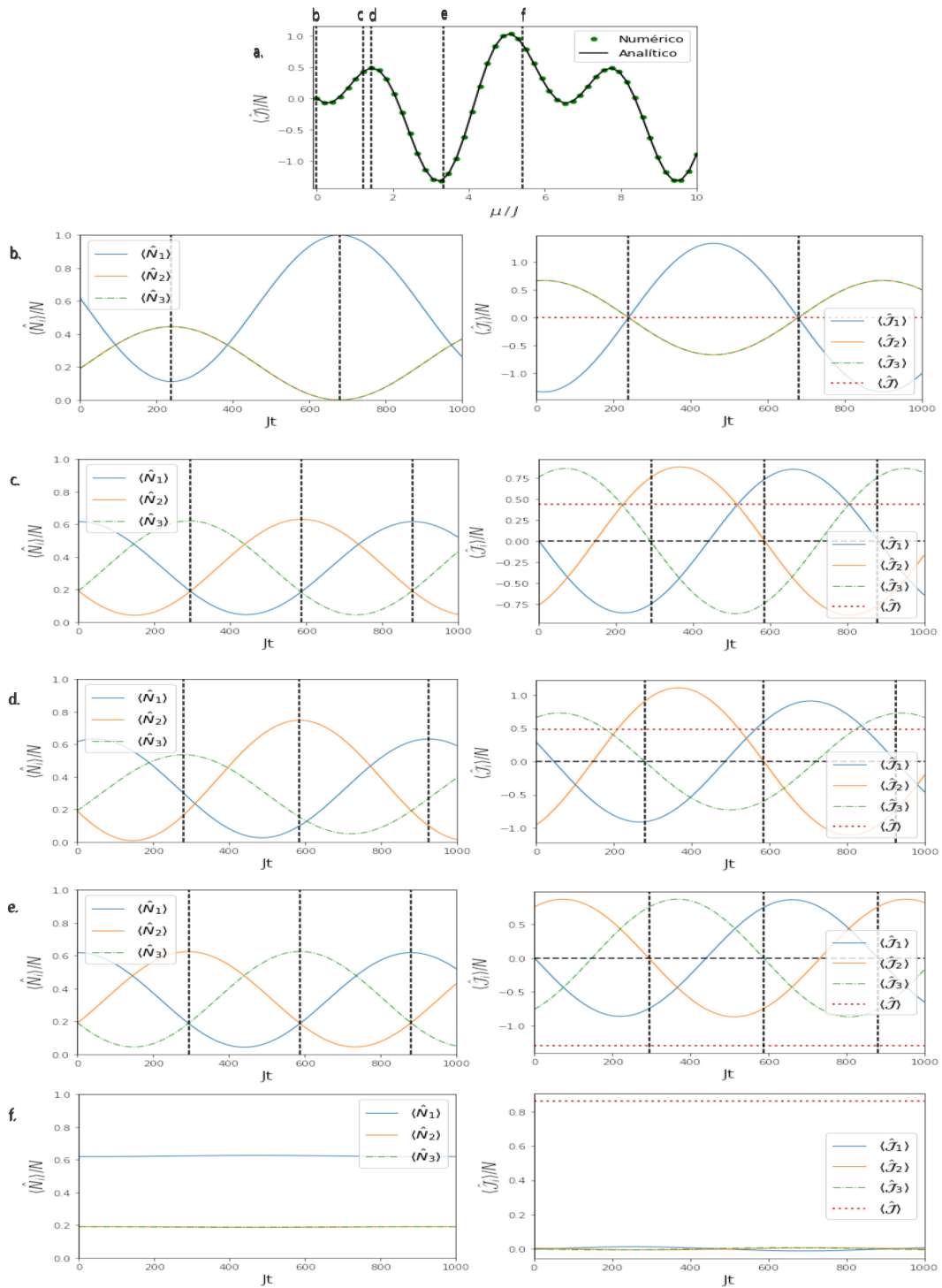


Figura 3.11: Gráficos de dinâmicas e de $\langle \hat{J}_i \rangle / N \times Jt$ para alguns valores do parâmetro de quebra de integrabilidade μ do gráfico da figura 3.9. As dinâmicas são mostradas nos gráficos da coluna da esquerda e os gráficos de $\langle \hat{J}_i \rangle / N \times Jt$ correspondentes são mostrados na coluna da direita. As linhas tracejadas pretas (nos tempos t_{m1} , t_{m2} e t_{m3} , da esquerda para a direita) indicam pontos de máximos e mínimos nas dinâmicas. Em “b”, $\mu/J = 0$, $Jt_{m1} \approx 238$ e $Jt_{m2} \approx 679$; em “c” e “e”, $\mu/J = 1.235$ e $\mu/J = 3.33$, respectivamente, com $Jt_{m1} = T$, $Jt_{m2} = 2T/3$ e $Jt_{m3} = T$; em “d”, $\mu/J = 1.428$, $Jt_{m1} \approx 279$, $Jt_{m2} \approx 585$ e $Jt_{m3} \approx 926$; em “f”, $\mu/J = 5.425$. Parâmetros: $N = 6$, $U/J = -7$, $Jt_0 = 200$, $Jt_1 = 1$.

esperados dos operadores no tempo $t = 0$ dependem em geral dos parâmetros t_0 , t_1 e/ou μ ¹².

Na figura 3.12 são apresentados os gráficos numéricos e analíticos (pela equação 3.14) para $\langle \hat{n}_1(t) \rangle$, $\langle \hat{n}_2(t) \rangle$ e $\langle \hat{n}_3(t) \rangle$, a partir de um estado inicial $|N, 0, 0, 0\rangle$, com $\mu/J = 1.235$. Observa-se uma boa concordância da expressão analítica (3.14) com o resultado numérico.

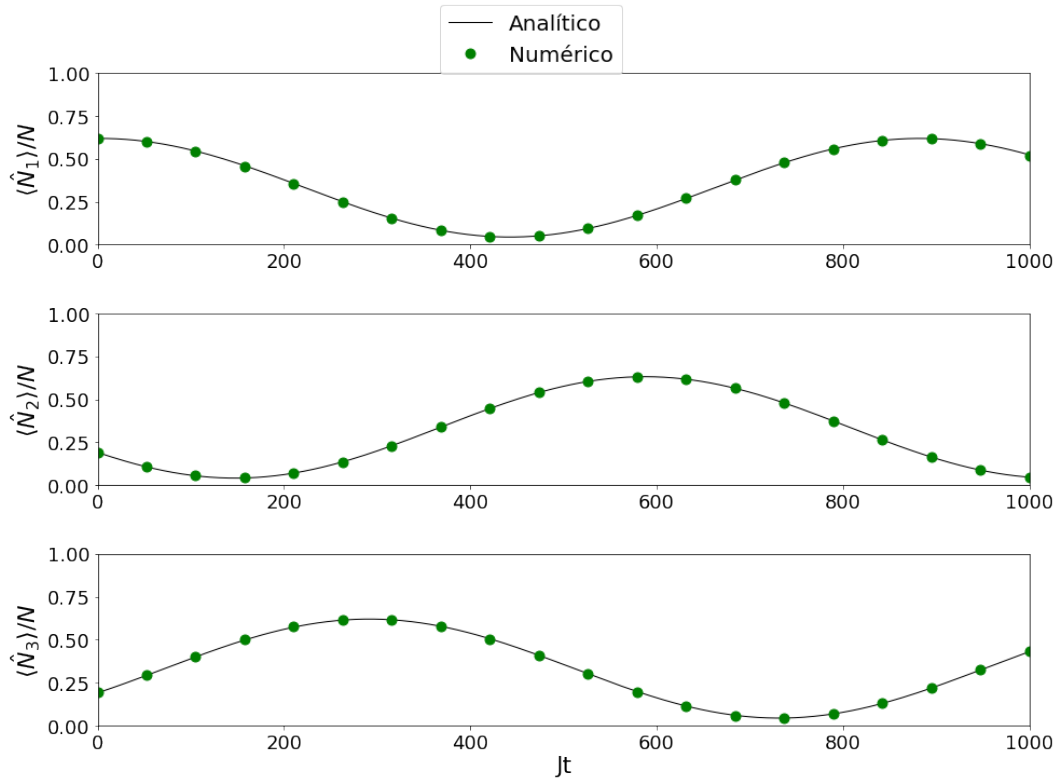


Figura 3.12: Comparação entre resultados numéricos (pela diagonalização do hamiltoniano) e analíticos (pela expressão analítica (3.14)) para a evolução temporal de $\langle \hat{N}_1 \rangle / N$ (gráfico de cima), $\langle \hat{N}_2 \rangle / N$ (gráfico do centro) e $\langle \hat{N}_3 \rangle / N$ (gráfico de baixo), a partir de um estado inicial $|N, 0, 0, 0\rangle$. Parâmetros: $N = 6$, $U/J = -7$, $Jt_0 = 200$, $Jt_1 = 1$, $\mu/J = 1.235$.

Da expressão 3.14, nota-se que o parâmetro de quebra de integrabilidade μ introduz fases β_k na evolução temporal integrável dos valores esperados dos números de partículas em cada poço k e as fases relativas $\beta_3 - \beta_2$ e $\beta_2 - \beta_1$ diferentes de zero correspondem ao efeito de geração de corrente entre os poços 1, 2 e 3. Essa corrente decorre do fato do modelo de 3+1 poços integrável poder ser representado por um hamiltoniano efetivo que apresenta apenas termos de tunelamento entre os poços 1, 2 e 3 no regime ressonante, ou seja, pode-se dizer que, de forma aproximada, a equação da continuidade é obedecida em um circuito fechado composto por esses três poços.

¹²Essas expressões são um pouco complicadas. Por essa razão, para maiores detalhes sobre cada um dos termos mostrados na equação (3.14), ver o Apêndice B.

Capítulo 4

Conclusão

Neste trabalho foi investigada a geração de corrente no modelo integrável de 3+1 poços. Para esse fim, inicialmente, no capítulo 2 foi feita uma revisão desse modelo, em que se apresentou o hamiltoniano geral e o hamiltoniano efetivo, as cargas conservadas e os diferentes regimes com as respectivas dinâmicas. Destacou-se o regime ressonante, que, para um estado inicial de Fock $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$, corresponde ao uso de parâmetros que obedecem à condição $|U(N - 2N_4)/J| \gg 1$. Nesse regime, mostrou-se que o hamiltoniano efetivo representa adequadamente as dinâmicas do modelo.

No capítulo 3, que se constitui em uma contribuição original, efetivamente mostrou-se como é possível gerar corrente, por meio de protocolo que insere um termo de quebra de integrabilidade no hamiltoniano, relacionado à aplicação de um campo externo que gera um parâmetro de quebra μ , de modo a preparar um estado em que o sistema passa a apresentar circulação de bósons entre os poços 1, 2 e 3, em um sentido bem determinado (horário ou anti-horário). Discutiu-se um protocolo numérico para identificar o valor do parâmetro μ capaz de gerar a dinâmica de interesse. Em seguida, conduziu-se uma análise pelos operadores de corrente definidos a partir do hamiltoniano efetivo. Mostrou-se que as dinâmicas obtidas são condizentes com a descrição do sistema com o uso desses operadores de corrente e que a equação da continuidade é obedecida no regime ressonante para os poços 1, 2 e 3. Obtiveram-se expressões analíticas para o valor esperado do número de partículas nos poços 1, 2 e 3, e para o operador de corrente circular efetiva, que foram deduzidas a partir do hamiltoniano efetivo. Mostrou-se que essas expressões analíticas concordam muito bem com os resultados numéricos.

Conclui-se que a inserção do termo de quebra de integrabilidade proposto tem, em

geral, o efeito de causar essa circulação de bósons entre os poços 1, 2 e 3, associada à condição $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle \neq 0$, com o surgimento de uma fase relativa entre as dinâmicas dos valores esperados de números de partículas em cada poço (\hat{N}_k) que depende, por sua vez, do respectivo valor esperado do operador de corrente por sítio ($\hat{\mathcal{J}}_k$).

Este trabalho se tratou essencialmente de um estudo do modelo integrável de 3+1 poços e da possibilidade de gerar corrente. Acredita-se que o objetivo foi alcançado. Agora que foi verificada a geração de corrente, tem-se a perspectiva futura de investigar aplicações, examinar a implementação experimental com o uso de átomos dipolares ultrafrios (ver, p. ex., [48, 49]) e estabelecer parâmetros otimizados.

No decorrer deste trabalho já foram ponderadas algumas dessas aplicações. Entre as quais, destacamos a possibilidade de usar o modelo integrável de 3+1 poços para implementar um dispositivo de comutação rotacional (*rotational switching device*), em que a corrente que entra em um dos poços, por exemplo, no poço 1, pode ser conduzida ao poço 2 ou ao poço 3, de acordo com o controle propiciado por uma quebra de integrabilidade adequada. Um dispositivo semelhante foi sugerido, p. ex., em [50]. Também é interessante mencionar que há exemplos na literatura, na área de nanotecnologia, do uso de rotação unidirecional de moléculas (no sentido horário ou anti-horário), para a implementação de máquinas artificiais moleculares, como, p. ex., um “motor” molecular [51, 52]. Dado que a geometria do sistema de 3+1 poços é equivalente à geometria trigonal plana de algumas moléculas, esse sistema pode ser útil na simulação de dinâmicas moleculares.

Uma outra questão interessante, que pode ser tratada em momento posterior, diz respeito à investigação do caos quântico no modelo de 3+1 poços com a adição de termo de quebra de integrabilidade, para valores dos parâmetros de tunelamento e interação que mantenham esse sistema fora do regime ressonante, especialmente na região do gráfico da figura 2.3 em que $0 < |UN/J| < 1$.¹

¹Para o modelo de 2+1 poços, mostrou-se que, mesmo em regiões do espectro de energias em que se observa comportamento caótico introduzido por quebra de integrabilidade, o sistema ainda exhibe traços de não-caoticidade que podem ser observados na distribuição dos autoestados [36]. Deixou-se em aberto a possibilidade de que sistemas de mais poços, como é o caso do modelo de 3+1 poços, possam exibir comportamento completamente caótico.

Referências Bibliográficas

- [1] Bose, S. N.. A lei de Planck e a hipótese dos quanta de luz. *Revista Brasileira de Ensino de Física* [online], v. 27, n. 3 [Acessado 30 Agosto 2022], p. 463-465, 2005. <https://doi.org/10.1590/S1806-11172005000300024>.
- [2] Einstein, A. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preußische Akademie der Wissenschaften*, p. 261-267, 1924.
- [3] Einstein, A. Teoria quântica do gás ideal monoatômico: segundo tratado. *Revista Brasileira de Ensino de Física* [online], v. 27, n. 1 [Acessado 30 Agosto 2022], p. 113-120, 2005. <https://doi.org/10.1590/S0102-47442005000100014>.
- [4] Anderson, M. H. *et al.* Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995. <https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198>.
- [5] Durfee, D. S.; Ketterle, W. Experimental studies of Bose-Einstein condensation. *Optics Express*, v. 2, n. 8, p. 299-313, 1998.
- [6] Ketterle, W. Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. *Reviews of Modern Physics*, v. 74, n. 4, p. 1131-1151, 2002. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.74.1131>.
- [7] Albiez, M. *et al.* Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction. *Physical Review Letters*, v. 95, n. 1, 010402, 2005. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.010402>.
- [8] Bethe, H. Zur theorie der Metalle. *Zeitschrift für Physik*, v. 71, n. 3, p. 205-226, 1931. <https://doi.org/10.1007/BF01341708>.

- [9] Baxter, R. J. Eight-vertex model in lattice statistics. *Physical Review Letters*, v. 26, n. 14, p. 832-833, 1971. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.26.832>.
- [10] Baxter, R. J. Exactly solved models in statistical mechanics. **In:** *Integrable systems in statistical mechanics*. World Scientific, 1985.
- [11] Faddeev, L.D. Algebraic aspects of the Bethe Ansatz. *International Journal of Modern Physics A*, v. 10, n. 13, p. 1845–1878, 1995. <https://doi.org/10.1142/S0217751X95000905>.
- [12] Lieb, E. H. Exact solution of the problem of the entropy of twodimensional ice. *Physical Review Letters*, v. 18, n. 17, p. 692–694, 1967. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.18.692>.
- [13] Yang, C.N. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. *Physical Review Letters*, v. 19, n. 23, p. 1312-1315, 1967. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.19.1312>.
- [14] Korepin, V. E.; Essler, F. H. L. Exactly solvable models of strongly correlated electrons. *World Scientific*, 1994.
- [15] Foerster, A.; Karowski, M. Algebraic properties of the Bethe ansatz for an $sp(2,1)$ - supersymmetric t-j model. *Nuclear Physics B*, v. 396, n. 2-3, p. 611-638, 1993. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90665-C](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90665-C).
- [16] Links, J.; Foerster, A. Solution of a two-leg spin ladder system. *Physical Review B*, v. 62, n. 1, p. 65-68, 2000. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.65>.
- [17] Babujian, H. M.; Foerster, A.; Karowski, M. Exact form factors of the $SU(N)$ Gross–Neveu model and $1/N$ expansion. *Nuclear Physics B*, v. 825, n. 3, p. 396-425, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2009.09.023>.
- [18] Belitsky, A.V.; Braun, V.M.; Gorsky, A.S.; Korchemsky, G.P. Integrability in QCD and beyond. *International Journal of Modern Physics A*, v. 19, n. 28, p. 4715-4788, 2004. <https://doi.org/10.1142/S0217751X04019895>.
- [19] Santos, G.; Tonel, A.P.; Foerster, A.; Links, J. Classical and quantum dynamics of a model for atomic-molecular bose-einstein condensates. *Physical Review A*, v. 73, n. 2, 023609, 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.023609>.

- [20] Santos, G.; Foerster, A.; Links, J.; Mattei, E.; Dahmen, S. R. Quantum phase transitions in an interacting atom-molecule boson model. *Physical Review A*, v. 81, n. 6, 063621, 2010. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.063621>.
- [21] Duncan, M.; Foerster, A.; Links, J.; Mattei, E.; Oelkers, N.; Tonel, A. Emergent quantum phases in a heteronuclear molecular Bose–Einstein condensate model. *Nuclear Physics B*, v. 767, n. 3, p. 227–249, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2006.12.015>.
- [22] Rubeni, D.; Foerster, A.; Mattei, E.; Roditi, I. Quantum phase transitions in Bose–Einstein condensates from a Bethe *Ansatz* perspective. *Nuclear Physics B*, v. 856, n. 3, p. 698–715, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2011.11.021>.
- [23] Batchelor, M.T.; Foerster, A. Yang–baxter integrable models in experiments: from condensed matter to ultracold atoms. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 49, n. 17, 173001, 2016. <https://doi.org/10.1088/1751-8113/49/17/173001>.
- [24] Tonel, A.P.; Links, J.; Foerster, A. Quantum dynamics of a model for two josephson-coupled bose–einstein condensates. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38, n. 6, p. 1235–1245, 2005. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/38/6/004>.
- [25] Tonel, A.P.; Links, J.; Foerster, A. Behaviour of the energy gap in a model of Josephson coupled Bose–Einstein condensates. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38, n. 31, p. 6879–6891, 2005. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/38/31/002>.
- [26] Links, J.; Foerster, A.; Tonel, A. P.; Santos, G. The two-site bose-hubbard model. *Annales Henri Poincaré*, v. 7, n. 7-8, p. 1591–1600, 2006. <https://doi.org/10.1007/s00023-006-0295-3>.
- [27] Foerster, A.; Ragoucy, E. Exactly solvable models in atomic and molecular physics. *Nuclear Physics B*, v. 777, n. 3, p. 373–403, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2007.03.039>.
- [28] Santos Filho, G. N. *Modelos de Condensados de Bose Einstein exatamente solúveis*.

- 106f. Porto Alegre, 2007. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- [29] Oelkers, N.; Links, J. Ground-state properties of the attractive one-dimensional Bose-Hubbard model. *Physical Review B*, v. 75, n. 11, 115119, 2007. <https://doi.org/10.1103/physrevb.75.115119>.
- [30] Tonel, A. P.; Ymai, L.H.; Foerster, A.; Links, J. Integrable model of bosons in a four-well ring with anisotropic tunneling. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 48, n. 49, 494001, 2015. <https://doi.org/10.1088/1751-8113/48/49/494001>.
- [31] Ymai, L.H.; Tonel, A. P.; Foerster, A.; Links, J. Quantum integrable multi-well tunneling models. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 50, n. 26, 264001, 2017. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/aa7227>.
- [32] Pepino, R.A. *et al.* Atomtronic Circuits of Diodes and Transistors. *Physical Review Letters*, v. 103, n. 14, 140405, 2009. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.140405>.
- [33] Amico, L. *et al.* Roadmap on Atomtronics: State of the art and perspective. *AVS Quantum Science*, v. 3, 039201, 2021. <https://doi.org/10.1116/5.0026178>.
- [34] Wilsmann, K.W.; Ymai, L. H.; Tonel, A. P.; Links, J.; Foerster, A. Control of tunneling in an atomtronic switching device. *Communications Physics* 1, 91 (2018). <https://doi.org/10.1038/s42005-018-0089-1>.
- [35] Tonel, A.P.; Ymai, L. H.; Wilsmann, K.W.; Foerster, A.; Links, J. Entangled states of dipolar bosons generated in a triple-well potential. *SciPost Physics Core*, v. 2, n. 1, 2020. <https://doi.org/10.21468/scipostphyscore.2.1.003>.
- [36] Wilsmann, K.W.; Castro, E. R.; Foerster, A.; Santos, L. F. Interacting bosons in a triple well: Preface of many-body quantum chaos. *Physical Review E*, v. 105, n. 3, 034204, 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.105.034204>.
- [37] Grün, D. S. *Design of Integrable Quantum Devices*. 116 f. Porto Alegre, 2021. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

- [38] Grün, D. S.; Ymai, L.H.; Wilsmann, K. W.; Tonel, A.P.; Foerster, A.; Links, J. Integrable atomtronic interferometry. *Physical Review Letters*, v. 129, n. 2, 020401, 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.129.020401>.
- [39] Grün, D. S.; Wittmann, K. W.; Ymai, L. H.; Links, J.; Foerster, A. Protocol designs for NOON states. *Communications Physics*, 5, 36 (2022). <https://doi.org/10.1038/s42005-022-00812-7>.
- [40] Soares, E. C. G. *Four-well quantum tunneling models for interferometry*. 47 f. Porto Alegre, 2021. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Física) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- [41] Grün, D. S. *Integrabilidade em Modelos de Tunelamento Quântico*. 61 f. Porto Alegre, 2018. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Física) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- [42] Caux, J. S.; Mossel, J. Remarks on the notion of quantum integrability. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2011, n. 2, 02023, 2011. <https://doi.org/10.1088%2F1742-5468%2F2011%2F02%2Fp02023>.
- [43] Leggett, A. J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts. *Reviews of Modern Physics*, v. 73, n. 2, p. 307-356, 2001. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.307>.
- [44] Rubeni, D.; Links, J.; Isaac, P. S.; Foerster, A. Two-site Bose-Hubbard model with nonlinear tunneling: Classical and quantum analysis. *Physical Review A*, v. 95, n. 4, 043607, 2017. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.043607>.
- [45] Downing, C. A.; Zueco, D.; Martín-Moreno, L. Chiral Current Circulation and \mathcal{PT} Symmetry in a Trimer of Oscillators. *ACS Photonics*, v. 7, n. 12, p. 3401-3414, 2020. <https://doi.org/10.1021%2Facsphotonics.0c01208>.
- [46] Keßler, S. *Quantum many-body dynamics of ultracold atoms in optical lattices*. 143 f. Erlangen-Nürnberg, 2014. Tese (Doutorado em Física) - Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg.

- [47] Roushan, P. *et al.* Chiral ground-state currents of interacting photons in a synthetic magnetic field. *Nature Physics*, v. 13, n. 2, p. 146-151, 2016. <https://doi.org/10.1038%2Fnpphys3930>.
- [48] Lahaye, T.; Menotti, C.; Santos, L.; Lewenstein, M.; Pfau, T. The physics of dipolar bosonic quantum gases. *Reports on Progress in Physics*, v. 72, n. 12, 126401, 2009. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/72/12/126401>.
- [49] Góral, K.; Santos, L.; Lewenstein, M. Quantum phases of dipolar bosons in optical lattices. *Physical Review Letters*, v. 88, n. 17, 170406, 2002. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.88.170406>.
- [50] Lau, J. W. Z. *et al.* Atomtronic multi-terminal Aharonov-Bohm interferometer. *arXiv*, 2022. <https://arxiv.org/abs/2205.01636>.
- [51] Perera, U. G. E. *et al.* Controlled clockwise and anticlockwise rotational switching of a molecular motor. *Nature Nanotechnology*, v. 8, n. 1, 46-51, 2013. <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.218>.
- [52] Zhang, Y. *et al.* A chiral molecular propeller designed for unidirectional rotations on a surface. *Nature Communications*, 10, 3742 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-11737-1>.
- [53] Brouzos, I.; Foerster, A. Trace of broken integrability in stationary correlation properties. *Physical Review A*, v. 89, n. 5, 053623, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.053623>.
- [54] Jung, P.; Helmes, R.W.; Rosch, A. Transport in Almost Integrable Models: Perturbed Heisenberg Chains. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 6, 067202, 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.067202>.
- [55] Wilson, B.; Foerster, A.; Kuhn, C.C.N.; Roditi, I.; Rubeni, D. A geometric wave function for a few interacting bosons in a harmonic trap. *Physical Letters A*, v. 378, n. 16-17, p. 1065-1070, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2014.02.009>.

Apêndice A

Operadores de corrente

Neste apêndice será mostrado como se podem definir os operadores de corrente a partir do hamiltoniano efetivo (2.2) e demonstrado que, pela equação de Heisenberg, se segue necessariamente que a equação da continuidade é obedecida para os poços 1, 2 e 3 quando o sistema está no regime ressonante (subseção A.1). Em seguida, na subseção A.2, serão apresentados os resultados e operadores de correntes que são obtidos quando cálculos semelhantes são feitos com o uso do hamiltoniano geral integrável (2.1). Finalmente, na subseção A.3 será mostrado que a descrição do sistema pelos operadores de corrente com o uso do hamiltoniano efetivo podem ser consideradas aproximadamente equivalentes à descrição pelos operadores de corrente com o uso do hamiltoniano geral integrável quando o sistema está no regime ressonante.

A.1 Pelo hamiltoniano efetivo (2.2)

Os operadores de corrente por sítio são definidos a partir da equação de Heisenberg, que será novamente reproduzida aqui:

$$\frac{d\hat{N}_k}{dt} = i[\hat{H}, \hat{N}_k] \quad (3.7)$$

Para o hamiltoniano efetivo:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = J_{\text{eff}} \left(\hat{T}_{12} + \hat{T}_{23} + \hat{T}_{13} \right) \quad (A.1)$$

com os operadores de tunelamento dados por:

$$\hat{T}_{ij} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i$$

obtêm-se as seguintes expressões, usando (3.7), para os poços 1, 2 e 3:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{N}_1}{dt} &= i[\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{N}_1] \\ \frac{d\hat{N}_2}{dt} &= i[\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{N}_2] \\ \frac{d\hat{N}_3}{dt} &= i[\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{N}_3]\end{aligned}$$

Lembrando que os operadores de número de bósons em cada poço são escritos a partir dos operadores de criação e aniquilação de bósons ($\hat{N}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$).

Para calcular os comutadores acima, pode-se usar as propriedades:

$$[\alpha \hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \alpha \hat{B}] = \alpha [\hat{A}, \hat{B}] \quad (\text{A.2})$$

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \quad (\text{A.3})$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{A.4})$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (\text{A.5})$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \quad (\text{A.6})$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (\text{A.7})$$

em conjunção com os seguintes resultados para os comutadores dos operadores de criação e aniquilação de bósons:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (\text{A.8})$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad \forall i, j \quad (\text{A.9})$$

Por exemplo, para o poço 1:

$$\frac{d\hat{N}_1}{dt} = iJ_{\text{eff}} \left([\hat{T}_{12}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{T}_{23}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{T}_{13}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] \right) \quad (\text{A.10})$$

Calculando cada comutador separadamente:

$$\begin{aligned}
[\hat{T}_{12}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] &= [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] \\
&= \hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_2, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger [\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{a}_2^\dagger, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] \hat{a}_1 \\
&= \hat{a}_1^\dagger \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_2, \hat{a}_1] + [\hat{a}_2, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) + \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1] + [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) \hat{a}_2 \\
&\quad + \hat{a}_2^\dagger \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_1, \hat{a}_1] + [\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) + \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_2^\dagger, \hat{a}_1] + [\hat{a}_2^\dagger, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) \hat{a}_1 \\
\therefore [\hat{T}_{12}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] &= \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \tag{A.11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{T}_{13}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] &= [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] \\
&= \hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_3, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger [\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] + [\hat{a}_3^\dagger, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] \hat{a}_1 \\
&= \hat{a}_1^\dagger \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_3, \hat{a}_1] + [\hat{a}_3, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) + \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1] + [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) \hat{a}_3 \\
&\quad + \hat{a}_3^\dagger \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_1, \hat{a}_1] + [\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) + \left(\hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_3^\dagger, \hat{a}_1] + [\hat{a}_3^\dagger, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_1 \right) \hat{a}_1 \\
\therefore [\hat{T}_{13}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] &= \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 \tag{A.12}
\end{aligned}$$

$$\therefore [\hat{T}_{23}, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1] = 0 \quad [\text{por (A.8) e (A.9)}] \tag{A.13}$$

Substituindo (A.11), (A.12), (A.13) em (A.10):

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{N}_1}{dt} &= -iJ_{\text{eff}} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 - \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 \right) \\
&= -iJ_{\text{eff}} \left[\hat{a}_1^\dagger (\hat{a}_2 + \hat{a}_3) - (\hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger) \hat{a}_1 \right] \tag{A.14}
\end{aligned}$$

De modo semelhante é possível mostrar, para os poços 2 e 3, que:

$$\frac{d\hat{N}_2}{dt} = -iJ_{\text{eff}} \left[\hat{a}_2^\dagger (\hat{a}_3 + \hat{a}_1) - (\hat{a}_3^\dagger + \hat{a}_1^\dagger) \hat{a}_2 \right] \tag{A.15}$$

$$\frac{d\hat{N}_3}{dt} = -iJ_{\text{eff}} \left[\hat{a}_3^\dagger (\hat{a}_1 + \hat{a}_2) - (\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger) \hat{a}_3 \right] \tag{A.16}$$

Esses resultados motivam as definições das correntes que foram adotadas no pre-

sente trabalho:

$$\hat{\mathcal{J}}_1 \stackrel{\text{def}}{=} i \left[\hat{a}_1^\dagger (\hat{a}_2 + \hat{a}_3) - (\hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger) \hat{a}_1 \right] \quad (\text{A.17})$$

$$\hat{\mathcal{J}}_2 \stackrel{\text{def}}{=} i \left[\hat{a}_2^\dagger (\hat{a}_3 + \hat{a}_1) - (\hat{a}_3^\dagger + \hat{a}_1^\dagger) \hat{a}_2 \right] \quad (\text{A.18})$$

$$\hat{\mathcal{J}}_3 \stackrel{\text{def}}{=} i \left[\hat{a}_3^\dagger (\hat{a}_1 + \hat{a}_2) - (\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger) \hat{a}_3 \right] \quad (\text{A.19})$$

E das definições (A.17), (A.18), (A.19) decorre imediatamente que a equação da continuidade é obedecida entre os poços 1, 2 e 3 no regime ressonante:

$$\frac{d\hat{N}_1}{dt} + \frac{d\hat{N}_2}{dt} + \frac{d\hat{N}_3}{dt} = -J_{\text{eff}} \left(\hat{\mathcal{J}}_1 + \hat{\mathcal{J}}_2 + \hat{\mathcal{J}}_3 \right) = 0$$

A.2 Pelo hamiltoniano geral integrável (2.1)

Por cálculos semelhantes aos efetuados em A.1, mas usando o hamiltoniano (2.1), é possível mostrar que

$$\frac{d\hat{N}_1}{dt} = i[\hat{H}, \hat{N}_1] = \frac{J}{\sqrt{3}} \hat{\mathcal{J}}_{14} \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{d\hat{N}_2}{dt} = i[\hat{H}, \hat{N}_2] = \frac{J}{\sqrt{3}} \hat{\mathcal{J}}_{24} \quad (\text{A.21})$$

$$\frac{d\hat{N}_3}{dt} = i[\hat{H}, \hat{N}_3] = \frac{J}{\sqrt{3}} \hat{\mathcal{J}}_{34} \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{d\hat{N}_4}{dt} = i[\hat{H}, \hat{N}_4] = -\frac{J}{\sqrt{3}} \left(\hat{\mathcal{J}}_{14} + \hat{\mathcal{J}}_{24} + \hat{\mathcal{J}}_{34} \right) \quad (\text{A.23})$$

em que os operadores $\hat{\mathcal{J}}_{i4}$, com $i = 1, 2, 3$, são definidos de forma equivalente aos operadores de corrente entre dois sítios $\hat{\mathcal{J}}_{ij}$ usando o hamiltoniano efetivo, mas generalizados de modo a incluir o poço 4, ou seja, $\hat{\mathcal{J}}_{i4} \stackrel{\text{def}}{=} i \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_4 - \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_i \right)$.

Essas expressões são mais gerais e descrevem o comportamento do modelo de 3+1 poços integrável em qualquer regime. Segue-se imediatamente dessas expressões que a equação da continuidade é obedecida para os poços 1, 2, 3 e 4, i.e.,

$$\frac{d\hat{N}_1}{dt} + \frac{d\hat{N}_2}{dt} + \frac{d\hat{N}_3}{dt} + \frac{d\hat{N}_4}{dt} = 0.$$

A.3 Comparação entre as descrições pelo hamiltoniano efetivo e pelo hamiltoniano geral integrável

Afirmamos que o hamiltoniano efetivo representa adequadamente (de forma aproximada) as dinâmicas do hamiltoniano geral integrável no regime ressonante. O que queremos dizer com isso é que a descrição matemática das dinâmicas do modelo pelo hamiltoniano efetivo deve ser aproximadamente igual à descrição matemática das dinâmicas do modelo pelo hamiltoniano geral integrável no regime ressonante. Se isso for verdade, então, no regime ressonante, devemos ter

$$\frac{d\langle\hat{N}_1\rangle}{dt} = -\frac{J}{\sqrt{3}}\langle\hat{\mathcal{J}}_{14}\rangle \approx -J_{\text{eff}}\langle\hat{\mathcal{J}}_1\rangle \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{d\langle\hat{N}_2\rangle}{dt} = -\frac{J}{\sqrt{3}}\langle\hat{\mathcal{J}}_{24}\rangle \approx -J_{\text{eff}}\langle\hat{\mathcal{J}}_2\rangle \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{d\langle\hat{N}_3\rangle}{dt} = -\frac{J}{\sqrt{3}}\langle\hat{\mathcal{J}}_{34}\rangle \approx -J_{\text{eff}}\langle\hat{\mathcal{J}}_3\rangle \quad (\text{A.26})$$

$$\frac{d\langle\hat{N}_4\rangle}{dt} = \frac{J}{\sqrt{3}}\left(\langle\hat{\mathcal{J}}_{14}\rangle + \langle\hat{\mathcal{J}}_{24}\rangle + \langle\hat{\mathcal{J}}_{34}\rangle\right) \approx 0 \quad (\text{A.27})$$

conforme equações (A.14), (A.15), (A.16), (A.20), (A.21), (A.22) e (A.23).

Embora não seja simples mostrar analiticamente que as equações (A.24), (A.25), (A.26) e (A.27) estão corretas, podemos verificá-las numericamente. Fizemos isso para todos os parâmetros e condições iniciais usados neste trabalho. Em todos os casos, verificamos boa concordância dessas equações. Um exemplo é mostrado no painel da figura A.1.

Com o que foi exposto e em vista da consistente boa concordância entre expressões analíticas obtidas com o uso do hamiltoniano efetivo e por métodos numéricos (p. ex., equações (3.13) e (3.14), figuras 3.9 e 3.12), bem como em vista da boa concordância obtida entre as dinâmicas pela diagonalização do hamiltoniano geral integrável (2.1) e pela diagonalização do hamiltoniano efetivo (2.2) (p. ex., figuras 2.4 e 2.5), parece razoável supor que, no regime ressonante, o modelo é de fato bem descrito pelo hamiltoniano efetivo. Nesse caso, segue-se que, no regime ressonante, os operadores de correntes definidos pelo hamiltoniano efetivo descrevem adequadamente o comportamento do modelo e a equação da continuidade é aproximadamente obedecida para os poços 1, 2 e 3 nesse regime.

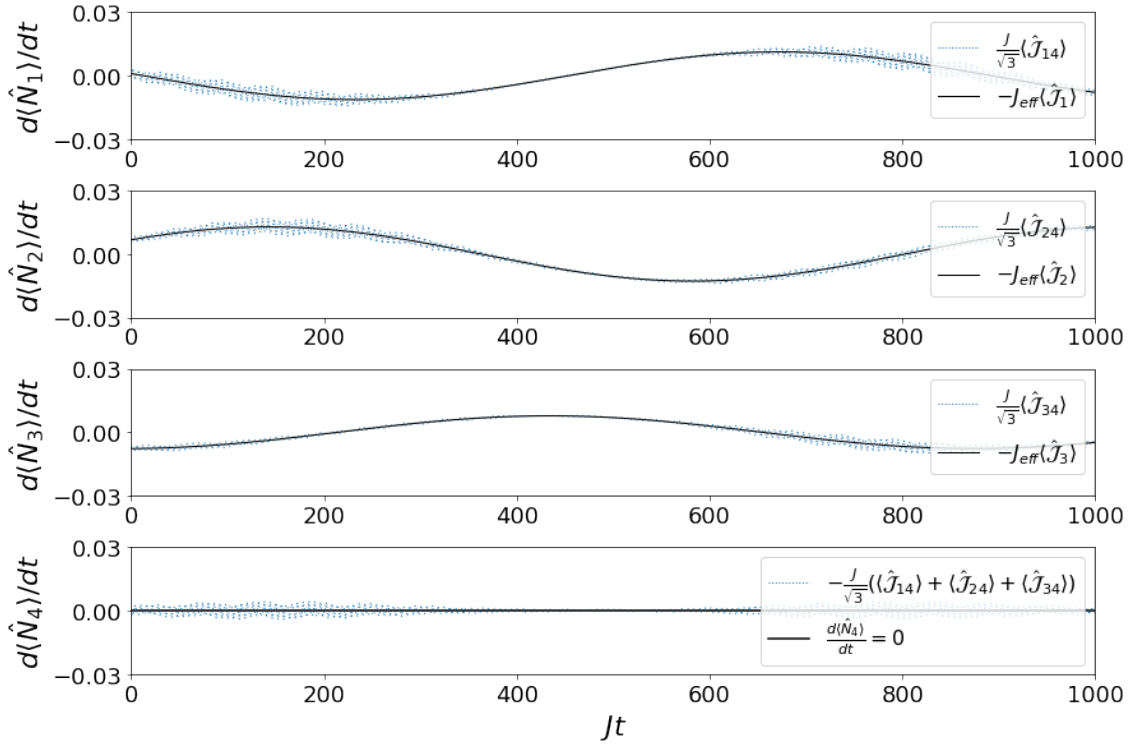


Figura A.1: Gráficos de $\frac{d\langle\hat{N}_i\rangle}{dt} \times t$ no regime ressonante - Comparação entre expressões obtidas pelo hamiltoniano (2.1) (linhas pontilhadas azuis) e pelo hamiltoniano efetivo (2.2) (linhas sólidas pretas). Esses gráficos verificam as expressões (A.24), (A.25), (A.26) e (A.27), mostrando que a descrição do modelo de 3+1 poços no regime ressonante pelo hamiltoniano efetivo (2.2) é aproximadamente equivalente à descrição do modelo pelo hamiltoniano geral integrável (2.1). Decorre disso que a equação da continuidade é obedecida entre os poços 1, 2 e 3 no regime ressonante. Esses gráficos são calculados numericamente pela diagonalização do hamiltoniano geral integrável (2.1), para um estado $|\Psi\rangle$ preparado conforme o protocolo (3.3). Parâmetros: $N = 6$, $U/J = -7$, $\mu/J = 3.33$, $Jt_0 = 200$, $Jt_1 = 1$.

Apêndice B

Expressões analíticas

Neste apêndice será mostrado como algumas expressões analíticas podem ser obtidas a partir do hamiltoniano efetivo (2.2).

Após estabelecidas algumas definições (subseção B.1), relações e identidades úteis (subseção B.2), na subseção B.3 será deduzida a expressão analítica para o valor esperado do operador de corrente circular efetiva (3.13) e na subseção B.4 serão mostrados maiores detalhes sobre a expressão analítica para os valores esperados dos números de partículas em cada poço (3.14). Essas expressões analíticas foram apresentadas na seção (3.4), para um estado $|\Psi\rangle$ preparado pelo protocolo (3.3), a partir de um estado inicial de Fock do tipo $|N, 0, 0, 0\rangle$. Pela expressão obtida se pode verificar analiticamente que o período da dinâmica do modelo de 3+1 poços no regime ressonante é dado pela expressão (3.4) após a quebra de integrabilidade¹. Na subseção B.5 será mostrada uma expressão analítica para a dinâmica a partir de um estado inicial de Fock no regime ressonante, como mostrado na última linha dos painéis nas figuras 2.4 e 2.5.

¹É interessante observar que a quebra da integrabilidade também foi discutida em outros cenários físicos (ver, por exemplo, [53, 54, 55]).

B.1 Definições

Considerem-se os seguintes operadores:

$$\hat{T} = (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) + (\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2) + (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3) \quad (\text{B.1})$$

$$\hat{\mathcal{U}} = e^{-i\varphi \hat{T}} \quad (\text{B.2})$$

$$\hat{\mathcal{Y}} = e^{-i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} e^{-i\phi \hat{T}} \quad (\text{B.3})$$

com $\varphi = tJ_{\text{eff}}$, $\phi = t_0 J_{\text{eff}}$ e $\theta = t_1 \mu$.

Note-se que, pelo protocolo (3.3), os operadores $\hat{\mathcal{U}}$ e $\hat{\mathcal{Y}}$ definidos acima estão associados ao operador de evolução temporal (2.7) do seguinte modo:

$$\hat{\mathcal{U}} \approx \hat{\mathcal{U}}(t, 0)$$

$$\hat{\mathcal{Y}} \approx \hat{\mathcal{U}}(t_1, \mu) \hat{\mathcal{U}}(t_0, 0)$$

Considerando $t_1 \ll t_0$ e que, no regime ressonante, para um estado inicial $|N, 0, 0, 0\rangle$, o hamiltoniano (2.1) é aproximadamente representado pelo hamiltoniano efetivo:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = J_{\text{eff}} \hat{T}, \text{ com } J_{\text{eff}} = \frac{J^2}{12U(N-1)}.$$

Também vamos definir, por conveniência, o seguinte operador:

$$\hat{A}_{ij} = (\hat{a}_i + \hat{a}_j)/2, \quad (\text{B.4})$$

com $i, j = 1, 2, 3$ e $i \neq j$.

B.2 Relações e identidades

Sejam dois operadores \hat{A} e \hat{B} :

$$\begin{aligned} e^{\hat{B}} \hat{A} e^{-\hat{B}} &= \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{2!} [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \frac{1}{3!} [\hat{B}, [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]] + \dots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \text{Ad}_{\hat{B}}^k(\hat{A}) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Aqui, definiu-se $Ad_{\hat{B}}(\hat{A}) = [\hat{B}, \hat{A}]$, de modo que $Ad_{\hat{B}}^n(\hat{A}) = \underbrace{Ad_{\hat{B}} \circ \cdots \circ Ad_{\hat{B}}}_{n \text{ vezes}}(\hat{A})$.

Esse resultado não será demonstrado aqui, mas pode-se justificá-lo do seguinte modo.

Seja:

$$\hat{H}(\lambda) = e^{\lambda\hat{B}} \hat{A} e^{-\lambda\hat{B}}$$

com λ sendo um parâmetro escalar. Pode-se expandir $\hat{H}(\lambda)$ em uma série de Taylor em torno de 0, de modo que

$$\hat{H}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{H}^{(k)}(0)}{k!} \lambda^k \quad (\text{B.6})$$

Uma vez que os operadores \hat{B} e $e^{\pm\hat{B}}$ comutam entre si, tem-se:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)}(0) &= \hat{A} \\ \hat{H}^{(1)}(0) &= \left. \hat{B} e^{\lambda\hat{B}} \hat{A} e^{-\lambda\hat{B}} - e^{\lambda\hat{B}} \hat{A} \hat{B} e^{-\lambda\hat{B}} \right|_{\lambda=0} = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = [\hat{B}, \hat{A}] \\ \hat{H}^{(2)}(0) &= \left. e^{\lambda\hat{B}} \hat{B} \hat{B} \hat{A} e^{-\lambda\hat{B}} - e^{\lambda\hat{B}} \hat{B} \hat{A} \hat{B} e^{-\lambda\hat{B}} - e^{\lambda\hat{B}} \hat{B} \hat{A} \hat{B} e^{-\lambda\hat{B}} + e^{\lambda\hat{B}} \hat{A} \hat{B} \hat{B} e^{-\lambda\hat{B}} \right|_{\lambda=0} \\ &= \hat{B}[\hat{B}, \hat{A}] - [\hat{B}, \hat{A}]\hat{B} = [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] \\ &\vdots \end{aligned}$$

Substituindo em (B.6) e fazendo $\lambda = 1$, obtém-se (B.5).

Tem-se ainda que:

$$\begin{aligned} [\hat{T}, \hat{a}_1^\dagger] &= \left[(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) + (\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2) + (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3), \hat{a}_1^\dagger \right] \\ &= \left[\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \right] + \left[\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \right] \\ &= \hat{a}_2^\dagger \left[\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \right] + \hat{a}_3^\dagger \left[\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger \right] \\ &= \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger = 2\hat{A}_{23} \end{aligned}$$

E de modo semelhante:

$$\begin{aligned} [\hat{T}, \hat{a}_2^\dagger] &= \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_3^\dagger = 2\hat{A}_{13} \\ [\hat{T}, \hat{a}_3^\dagger] &= \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger = 2\hat{A}_{12} \end{aligned}$$

Logo:

$$[\hat{T}, \hat{a}_l^\dagger] = 2\hat{A}_{jk}^\dagger, \quad (\text{B.7})$$

para $j, k, l = 1, 2, 3$, com $j \neq k \neq l$.

Outro comutador de interesse é o seguinte:

$$\begin{aligned} [\hat{T}, \hat{A}_{23}^\dagger] &= \frac{1}{2} \left[(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) + (\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2) + (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3), \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{2} \left\{ [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger] + [\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger] + [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3, \hat{a}_3^\dagger] + [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3, \hat{a}_3^\dagger] \right\} \\ &= \hat{a}_1^\dagger + \hat{A}_{23}^\dagger \end{aligned}$$

E de modo semelhante:

$$\begin{aligned} [\hat{T}, \hat{A}_{12}^\dagger] &= \hat{a}_3^\dagger + \hat{A}_{12}^\dagger \\ [\hat{T}, \hat{A}_{13}^\dagger] &= \hat{a}_2^\dagger + \hat{A}_{13}^\dagger \end{aligned}$$

Logo:

$$[\hat{T}, \hat{A}_{jk}^\dagger] = \hat{a}_l^\dagger + \hat{A}_{jk}^\dagger, \quad (\text{B.8})$$

para $j, k, l = 1, 2, 3$, com $j \neq k \neq l$.

Usando (B.7) e (B.8), pode-se então verificar² que

$$Ad_{\hat{T}}^n(\hat{a}_l^\dagger) = h(n)\hat{a}_l^\dagger + h(n+1)\hat{A}_{jk}^\dagger \quad (\text{B.9})$$

com

$$h(n) = \frac{2^n}{3} - \frac{2^{(1-(-1)^n)/2}}{3} + \frac{1+(-1)^n}{2}.$$

Finalmente, pode-se ainda verificar que

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(iu)^n}{n!} h(n) = \frac{1}{3} e^{2iu} + \frac{2}{3} e^{-iu} = f(u) \quad (\text{B.10})$$

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(iu)^n}{n!} h(n+1) = \frac{2}{3} e^{2iu} - \frac{2}{3} e^{-iu} = g(u) \quad (\text{B.11})$$

Estamos prontos para estabelecer as relações mais importantes. Pelas equações

²É relativamente fácil mostrar isso por indução. Não farei isso aqui por economia de tempo e espaço.

(B.5), (B.9), (B.10) e (B.11), com $\hat{B} = iu\hat{T}$ e $\hat{A} = \hat{a}_l^\dagger$, tem-se, para $l, j, k = 1, 2, 3$, com $l \neq j \neq k$, que:

$$e^{iu\hat{T}} \hat{a}_l^\dagger e^{-iu\hat{T}} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(iu)^n}{n!} Ad_{\hat{T}}^n(\hat{a}_l^\dagger) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(iu)^n}{n!} h(n) \hat{a}_l^\dagger + \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(iu)^n}{n!} h(n+1) \hat{A}_{jk}^\dagger$$

$$\therefore e^{iu\hat{T}} \hat{a}_l^\dagger e^{-iu\hat{T}} = f(u) \hat{a}_l^\dagger + g(u) \hat{A}_{jk}^\dagger \quad (\text{B.12})$$

Aplicando o conjugado hermitiano nas equações (B.12), tem-se também:

$$\therefore e^{iu\hat{T}} \hat{a}_l e^{-iu\hat{T}} = f^*(u) \hat{a}_l + g^*(u) \hat{A}_{jk} \quad (\text{B.13})$$

De (B.5), com $\hat{B} = i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)$ e $\hat{A} = \hat{a}_1^\dagger$, segue-se que:

$$e^{i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} \hat{a}_1^\dagger e^{-i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} = \hat{a}_1^\dagger + i\theta[(\hat{N}_2 - \hat{N}_1), \hat{a}_1^\dagger] + \frac{(i\theta)^2}{2!} [(\hat{N}_2 - \hat{N}_1), [(\hat{N}_2 - \hat{N}_1), \hat{a}_1^\dagger]] + \dots$$

$$= \hat{a}_1^\dagger - i\theta \hat{a}_1^\dagger + \frac{(-i\theta)^2}{2!} \hat{a}_1^\dagger - \dots$$

$$= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i\theta)^n}{n!} \hat{a}_1^\dagger$$

$$\therefore e^{i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} \hat{a}_1^\dagger e^{-i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} = e^{-i\theta} \hat{a}_1^\dagger \quad (\text{B.14})$$

E, de modo semelhante:

$$\therefore e^{i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} \hat{a}_2^\dagger e^{-i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} = e^{i\theta} \hat{a}_2^\dagger \quad (\text{B.15})$$

$$\therefore e^{i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} \hat{a}_3^\dagger e^{-i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} = \hat{a}_3^\dagger \quad (\text{B.16})$$

B.3 Valor esperado do operador de corrente circular efetiva para estado $|\Psi\rangle$

Como $[\hat{H}, \hat{\mathcal{J}}] = 0$, $\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle$ não depende do tempo e podemos calculá-lo apenas no estado inicial, $|\Psi\rangle = \hat{\mathcal{Y}} |N, 0, 0, 0\rangle$ (ou seja, estamos calculando o valor esperado desse operador no tempo $t = 0$, logo após o preparo do estado $|\Psi\rangle$). Assim:

$$\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle = \langle N, 0, 0, 0 | \hat{\mathcal{Y}}^\dagger (\hat{\mathcal{J}}_R - \hat{\mathcal{J}}_L) \hat{\mathcal{Y}} | N, 0, 0, 0 \rangle \quad (\text{B.17})$$

com $\hat{\mathcal{J}}_R = i (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2)$ e $\hat{\mathcal{J}}_L = -\hat{\mathcal{J}}_R^\dagger$.

Vamos calcular termo a termo. Usando (B.12), (B.13), (B.14), (B.15) e (B.16)³:

$$\begin{aligned} \langle N, 0, 0, 0 | \hat{\mathcal{Y}}^\dagger i \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 \hat{\mathcal{Y}} | N, 0, 0, 0 \rangle &= i \langle N, 0, 0, 0 | e^{i\phi\hat{T}} e^{i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 e^{-i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} e^{-i\phi\hat{T}} | N, 0, 0, 0 \rangle \\ &= i e^{i\theta} \langle N, 0, 0, 0 | e^{i\phi\hat{T}} \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 e^{-i\phi\hat{T}} | N, 0, 0, 0 \rangle \\ &= \frac{i e^{i\theta}}{2} f^*(\phi) g(\phi) N \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Seguindo procedimento semelhante, encontramos:

$$\langle N, 0, 0, 0 | \hat{\mathcal{Y}}^\dagger i \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{\mathcal{Y}} | N, 0, 0, 0 \rangle = \frac{i e^{-2i\theta}}{2} f(\phi) g^*(\phi) N \quad (\text{B.19})$$

$$\langle N, 0, 0, 0 | \hat{\mathcal{Y}}^\dagger i \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{\mathcal{Y}} | N, 0, 0, 0 \rangle = \frac{i e^{i\theta}}{4} |g(\phi)|^2 N \quad (\text{B.20})$$

Pelos conjugados hermitianos de (B.18), (B.19) e (B.20), obtém-se que

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle &= \left(\frac{i e^{i\theta}}{2} f^*(\phi) g(\phi) N + \frac{i e^{-2i\theta}}{2} f(\phi) g^*(\phi) N + \frac{i e^{i\theta}}{4} |g(\phi)|^2 N \right) \\ &+ \left(\frac{i e^{i\theta}}{2} f^*(\phi) g(\phi) N + \frac{i e^{-2i\theta}}{2} f(\phi) g^*(\phi) N + \frac{i e^{i\theta}}{4} |g(\phi)|^2 N \right)^\dagger \\ &= \frac{Ni}{2} (e^{i\theta} f^*(\phi) g(\phi) - e^{-i\theta} f(\phi) g^*(\phi)) \\ &+ \frac{Ni}{2} (e^{-2i\theta} f(\phi) g^*(\phi) - e^{2i\theta} f^*(\phi) g(\phi)) \\ &- \frac{N}{2} |g(\phi)|^2 \sin \theta \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

$$\therefore \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle = \langle \hat{\mathcal{J}}_{31} \rangle_0 + \langle \hat{\mathcal{J}}_{12} \rangle_0 + \langle \hat{\mathcal{J}}_{23} \rangle_0$$

Com os valores esperados dos operadores de corrente entre dois sítios calculados

³Aqui também se está usando o seguinte artifício: $e^{\hat{B}} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k e^{-\hat{B}} = e^{\hat{B}} \hat{a}_j^\dagger e^{-\hat{B}} e^{\hat{B}} \hat{a}_k e^{-\hat{B}}$.

no tempo $t=0$:

$$\langle \hat{\mathcal{J}}_{31} \rangle_0 = \frac{Ni}{2} (e^{i\theta} f^*(\phi)g(\phi) - e^{-i\theta} f(\phi)g^*(\phi)) \quad (\text{B.22})$$

$$\langle \hat{\mathcal{J}}_{12} \rangle_0 = \frac{Ni}{2} (e^{-2i\theta} f(\phi)g^*(\phi) - e^{2i\theta} f^*(\phi)g(\phi)) \quad (\text{B.23})$$

$$\langle \hat{\mathcal{J}}_{23} \rangle_0 = -\frac{N}{2} |g(\phi)|^2 \sin \theta \quad (\text{B.24})$$

A partir dessas equações é apenas um exercício de álgebra e trigonometria mostrar que (B.21) equivale a

$$\langle \hat{\mathcal{J}} \rangle = N \left\{ \frac{2}{3} \sin(3\phi) [\cos(2\theta) - \cos(\theta)] - \frac{4}{9} \sin^2\left(\frac{3\phi}{2}\right) [\sin(2\theta) + \sin(\theta)] \right\}. \quad (\text{3.13})$$

B.4 Dinâmica dos valores esperados dos números de partículas em cada poço para estado $|\Psi\rangle$

Os procedimentos para se obter as expressões analíticas para a dinâmica dos valores esperados dos números de partículas em cada poço, a partir de um estado $|\Psi\rangle = \hat{\mathcal{Y}}|N, 0, 0, 0\rangle$, são semelhantes aos que foram realizados para o operador de corrente circular efetiva.

No entanto, os cálculos aqui são bem mais longos e tediosos porque há um operador de evolução temporal a mais que se precisa levar em consideração. A expressão geral de que se parte é a seguinte:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N}_k(t) \rangle &= \langle N, 0, 0, 0 | \hat{\mathcal{Y}}^\dagger \hat{\mathcal{U}}^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{\mathcal{U}} \hat{\mathcal{Y}} | N, 0, 0, 0 \rangle \\ &= \langle N, 0, 0, 0 | e^{i\phi\hat{T}} e^{i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} e^{i\varphi\hat{T}} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k e^{-i\varphi\hat{T}} e^{-i\theta(\hat{N}_2 - \hat{N}_1)} e^{-i\phi\hat{T}} | N, 0, 0, 0 \rangle \end{aligned}$$

A partir disso, considerando $\langle \hat{N}_k(t) \rangle / N = \langle \hat{n}_k(t) \rangle$, obtemos o seguinte resultado:

$$\langle \hat{n}_k(t) \rangle = \langle \hat{n}_k \rangle_0 + 2A_k \sin^2\left(\frac{3\varphi}{2}\right) - \frac{1}{3N} \langle \hat{\mathcal{J}}_k \rangle_0 \sin 3\varphi, \quad (\text{B.25})$$

Aqui:

- $\langle \hat{\mathcal{J}}_k \rangle_0$ são os valores esperados dos operadores de corrente por sítio no tempo $t = 0$ (imediatamente após o preparo do estado $|\Psi\rangle$) que podem ser construídos a partir dos resultados já obtidos para os operadores de corrente entre dois sítios (B.22), (B.23) e (B.24);
- $\langle \hat{n}_k \rangle_0$ são os valores esperados dos operadores de números de partículas normalizados, para os poços $k = 1, 2, 3$, no tempo $t = 0$, tais que:

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}_1 \rangle_0 &= |f_\phi|^2 \\ \langle \hat{n}_2 \rangle_0 &= \langle \hat{n}_3 \rangle_0 = \frac{1}{4}|g_\phi|^2\end{aligned}$$

- A_k é construído a partir dos $\langle \hat{n}_k \rangle_0$ e dos valores esperados dos operadores de tunelamento $\hat{\mathcal{T}}_{ij} = [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i]$, no tempo $t = 0$:

$$A_k = \frac{2}{9} \left(1 - 3\langle \hat{n}_k \rangle_0 + \frac{1}{N} \langle \hat{\mathcal{T}}_{ij} \rangle_0 - \frac{1}{2N} \langle \hat{\mathcal{T}}_{ki} + \hat{\mathcal{T}}_{kj} \rangle_0 \right),$$

para $i, j, k = 1, 2, 3$ e $i \neq j \neq k$, com:

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathcal{T}}_{12} \rangle_0 &= \frac{N}{2} (f_\phi g_\phi^* e^{2i\theta} + f_\phi^* g_\phi e^{-2i\theta}) \\ \langle \hat{\mathcal{T}}_{13} \rangle_0 &= \frac{N}{2} (f_\phi g_\phi^* e^{i\theta} + f_\phi^* g_\phi e^{-i\theta}) \\ \langle \hat{\mathcal{T}}_{23} \rangle_0 &= 2N \langle n_2 \rangle_0 \cos \theta\end{aligned}$$

Fazendo $A_k = \alpha_k \cos \beta_k$ e $\frac{1}{3N} \langle \hat{\mathcal{J}}_k \rangle_0 = \alpha_k \sin \beta_k$ e substituindo em (B.25), mostra-se que:

$$\langle \hat{n}_k(t) \rangle = \langle \hat{n}_k \rangle_0 + A_k - \alpha_k \cos(3\varphi - \beta_k), \quad (3.14)$$

com

$$\begin{aligned}\alpha_k &= \sqrt{A_k^2 + \frac{1}{9N^2} \langle \hat{\mathcal{J}}_k \rangle_0^2} \\ \beta_k &= \tan^{-1} \left(\frac{\langle \hat{\mathcal{J}}_k \rangle_0}{3NA_k} \right)\end{aligned}$$

Mostra-se então facilmente que o período das dinâmicas é

$$T = \frac{2\pi}{3|J_{\text{eff}}|} \quad (\text{B.26})$$

que é o mesmo período para as dinâmicas no regime ressonante para um estado de Fock, conforme será mostrado no apêndice B.5. Apenas as fases relativas entre as dinâmicas e as amplitudes são alteradas.

Note-se que o protocolo numérico para obtenção do parâmetro de quebra μ depende da expressão para o período das dinâmicas e que essa expressão foi obtida porque o modelo de 3+1 poços é integrável.

B.5 Dinâmicas no regime ressonante para estado de Fock

Vamos considerar um estado de Fock inicial $|N_1, N_2, N_3, N_4\rangle$ e calcular a evolução temporal a partir desse estado no regime ressonante (sem preparo do estado $|\Psi\rangle$). Para um poço l (com $l, j, k = 1, 2, 3$ e $l \neq j \neq k$), tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N}_l(t) \rangle &= \langle N_1, N_2, N_3, N_4 | e^{i\varphi\hat{T}} \hat{N}_l e^{-i\varphi\hat{T}} | N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \\ &= \langle N_1, N_2, N_3, N_4 | e^{i\varphi\hat{T}} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l e^{-i\varphi\hat{T}} | N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \\ &= \langle N_1, N_2, N_3, N_4 | \left[f(\varphi) \hat{a}_l^\dagger + \frac{1}{2} g(\varphi) (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_k^\dagger) \right] \times \\ &\quad \times \left[f^*(\varphi) \hat{a}_l + \frac{1}{2} g^*(\varphi) (\hat{a}_j + \hat{a}_k) \right] | N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \\ \\ \langle \hat{N}_l(t) \rangle &= |f(\varphi)|^2 \langle N_1, N_2, N_3, N_4 | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l | N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \\ &\quad + \frac{1}{4} |g(\varphi)|^2 \langle N_1, N_2, N_3, N_4 | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j | N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \\ &\quad + \frac{1}{4} |g(\varphi)|^2 \langle N_1, N_2, N_3, N_4 | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | N_1, N_2, N_3, N_4 \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

A partir das equações (B.10) e (B.11), pode-se mostrar que:

$$|f(\varphi)|^2 = 1 - \frac{8}{4} \sin^2\left(\frac{3\varphi}{2}\right) \quad (\text{B.28})$$

$$|g(\varphi)|^2 = \frac{16}{9} \sin^2\left(\frac{3\varphi}{2}\right) \quad (\text{B.29})$$

Substituindo (B.28) e (B.29) em (B.27), chegamos no seguinte resultado (lembrando que $l, j, k = 1, 2, 3$ e $l \neq j \neq k$):

$$\langle \hat{N}_l(t) \rangle = N_l \left[1 - \frac{8}{9} \sin^2\left(\frac{3\varphi}{2}\right) \right] + N_j \left[\frac{4}{9} \sin^2\left(\frac{3\varphi}{2}\right) \right] + N_k \left[\frac{4}{9} \sin^2\left(\frac{3\varphi}{2}\right) \right] \quad (\text{B.30})$$

Essa é a expressão analítica para as dinâmicas no regime ressonante mostradas na última linha dos painéis nas figuras 2.4 e 2.5. Agora, como $\varphi = tJ_{\text{eff}}$ e $\sin^2(3\varphi/2) = (1 - \cos(3\varphi))/2$, segue-se que, nesse caso, o período também é dado por

$$T = \frac{2\pi}{3|J_{\text{eff}}|} \quad (\text{B.31})$$

Apêndice C

Quantidades conservadas

Este apêndice apresenta discussões complementares sobre as quantidades conservadas do modelo de 3+1 poços e é dividido da seguinte forma. Na subseção C.1 será mostrado como são obtidas as quantidades conservadas \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 que foram apresentadas na seção 2.2. Em seguida, na subseção C.2, será demonstrado que o operador de corrente circular efetiva (3.12) é uma quantidade conservada do modelo de 3+1 poços. Finalmente, na subseção C.3, será mostrado que existe uma forma mais geral de descrever as quantidades conservadas do modelo de 3+1 poços e que tanto o operador de corrente circular efetiva $\hat{\mathcal{J}}$ quanto as quantidades conservadas \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 podem ser obtidas por uma escolha adequada de parâmetros, por transformações no grupo $SU(2)$, em termos de operadores generalizados de criação e aniquilação.

C.1 Operadores \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2

As quantidades conservadas do modelo de 3+1 poços foram apresentadas em [41], seguindo método descrito em [31]. Vamos mostrar de forma resumida como isso foi feito, usando notação e nomenclaturas semelhantes às do artigo [31].

Sejam os operadores bosônicos de aniquilação $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3$ que atuam nos poços do subespaço A (poços 1, 2 e 3) e $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1/\sqrt{3}$ as constantes de normalização do modelo de 3+1 poços com tunelamento isotrópico, definimos os seguintes vetores:

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, 1)$$

$$\mathbf{a} = (\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3)$$

Sejam agora os vetores $\boldsymbol{\mu}_1 = (\mu_{11}, \mu_{12}, \mu_{13})$ e $\boldsymbol{\mu}_2 = (\mu_{21}, \mu_{22}, \mu_{23})$, ortogonais ao vetor $\boldsymbol{\alpha}$ e ortonormais entre si, ou seja:

$$\langle \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\mu}_k \rangle = \delta_{jk}, \quad \langle \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\alpha} \rangle = 0, \quad j, k = 1, 2 \quad (\text{C.1})$$

com $\langle \dots \rangle$ sendo o produto escalar e δ_{jk} o delta de Kroenecker.

Então, os operadores $\hat{\Gamma}_1$ e $\hat{\Gamma}_2$, que definem o pseudovácuo do método de espalhamento quântico inverso estendido, são definidos por:

$$\hat{\Gamma}_1 = \langle \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\alpha} \rangle \quad (\text{C.2})$$

$$\hat{\Gamma}_2 = \langle \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\alpha} \rangle \quad (\text{C.3})$$

Para encontrar os operadores $\hat{\Gamma}_1$ e $\hat{\Gamma}_2$, precisamos primeiro encontrar os vetores $\boldsymbol{\mu}_1$ e $\boldsymbol{\mu}_2$. Esses vetores não são únicos. Seja, por exemplo, o vetor

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1, 0), \quad (\text{C.4})$$

já normalizado, que é claramente ortogonal ao vetor $\boldsymbol{\alpha}$. Um vetor $\boldsymbol{\mu}_2$ ortogonal a $\boldsymbol{\alpha}$ e ortogonal a $\boldsymbol{\mu}_1$ pode ser determinado pelo produto vetorial entre $\boldsymbol{\alpha}$ e $\boldsymbol{\mu}_1$, também normalizado:

$$\boldsymbol{\mu}_2 = \boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\mu}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, -2). \quad (\text{C.5})$$

Substituindo então (C.4) e (C.5) em (C.2) e (C.3), obtemos

$$\hat{\Gamma}_1 = \langle \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\alpha} \rangle = \frac{\hat{a}_1 - \hat{a}_2}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.6})$$

$$\hat{\Gamma}_2 = \langle \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\alpha} \rangle = \frac{\hat{a}_1 + \hat{a}_2 - 2\hat{a}_3}{\sqrt{6}} \quad (\text{C.7})$$

Os operadores $\hat{\Gamma}_1$, $\hat{\Gamma}_2$, $\hat{\Gamma}_1^\dagger$ e $\hat{\Gamma}_2^\dagger$ são como operadores de aniquilação e criação generalizados, obedecendo à mesma álgebra que os operadores de criação e aniquilação de bósons usuais. Então, as quantidades conservadas \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 são generalizações dos operadores de

números de partículas, tais que

$$\hat{Q}_1 = \hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_1 = \frac{1}{2} \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right) \quad (\text{C.8})$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}_2 = \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_2 = \frac{1}{6} \left[\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + 4\hat{N}_3 + (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \right. \\ \left. - 2(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1) - 2(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

usando (C.6) e (C.7).

C.2 Operador de corrente circular efetiva $\hat{\mathcal{J}}$

(O resultado apresentado nesta subseção pode ser obtido de modo mais simples, conforme subseção C.3 deste apêndice).¹

Reproduziremos aqui a expressão para o operador de corrente circular efetiva, por conveniência:

$$\hat{\mathcal{J}} = i \left[\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \right] - i \left[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2 \right] \quad (\text{3.12})$$

Usando as expressões (C.6) e (C.7) é possível reescrever (3.12) em termos dos operadores $\hat{\Gamma}_1$ e $\hat{\Gamma}_2$, com um pouco de álgebra, da seguinte forma:

$$\hat{\mathcal{J}} = i \left(\hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2 - \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1 \right) \quad (\text{C.10})$$

Mostraremos agora que $\hat{\mathcal{J}}$ também é uma quantidade conservada do modelo de 3+1 poços. Para isso, precisamos calcular o comutador $[\hat{H}, \hat{\mathcal{J}}]$.

Definimos o operador

$$\hat{A} = \frac{\hat{a}_1 + \hat{a}_2 + \hat{a}_3}{\sqrt{3}}$$

para que possamos reescrever o hamiltoniano (2.1) de um modo mais compacto:

$$\hat{H} = U(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)^2 - J \left(\hat{A}^\dagger \hat{a}_4 + \hat{A} \hat{a}_4^\dagger \right). \quad (\text{C.11})$$

¹Ainda assim, optei por manter esta subseção porque foi concluída antes dos desenvolvimentos que levaram à subseção C.3.

Para simplificar a álgebra a seguir, apresentamos ainda os seguintes resultados, sem demonstrar:

$$\begin{aligned}
[\hat{\Gamma}_1, \hat{A}^\dagger] &= [\hat{\Gamma}_2, \hat{A}^\dagger] = 0 \\
[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_j^\dagger] &= \hat{\Gamma}_j^\dagger \\
[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_j] &= -\hat{\Gamma}_j, \text{ para } j = 1, 2.
\end{aligned} \tag{C.12}$$

Temos então:

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{J}}] = U[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)^2, \hat{\mathcal{J}}] - J[\hat{A}^\dagger \hat{a}_4, \hat{\mathcal{J}}] - J[\hat{A} \hat{a}_4^\dagger, \hat{\mathcal{J}}] \tag{C.13}$$

Usando as propriedades (A.2) a (A.9), as expressões (C.10), (C.11) e os resultados (C.12), calculamos agora cada comutador separadamente:

$$\begin{aligned}
U[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)^2, \hat{\mathcal{J}}] &= U i(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2 - \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1] \\
&\quad + U i[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2 - \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1](\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)
\end{aligned}$$

Mas,

$$\begin{aligned}
[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2] &= \hat{\Gamma}_1^\dagger [(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_2] \\
&\quad + [(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_1^\dagger] \hat{\Gamma}_2 = 0
\end{aligned}$$

Como $\hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2 = (\hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1)^\dagger$, decorre disso que

$$[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4), \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1] = 0.$$

Logo,

$$\therefore U[(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 - \hat{N}_4)^2, \hat{\mathcal{J}}] = 0. \tag{C.14}$$

Continuando:

$$\begin{aligned}
-J[\hat{A}^\dagger \hat{a}_4, \hat{\mathcal{J}}] &= -J \hat{A}^\dagger [\hat{a}_4, \hat{\mathcal{J}}] - J[\hat{A}^\dagger, \hat{\mathcal{J}}] \hat{a}_4 \\
&= -J i[\hat{A}^\dagger, \hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2] \hat{a}_4 + J i[\hat{A}^\dagger, \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1] \hat{a}_4
\end{aligned}$$

Mas,

$$\begin{aligned} -Ji[\hat{A}^\dagger, \hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2] \hat{a}_4 &= -Ji \hat{\Gamma}_1^\dagger [\hat{A}^\dagger, \hat{\Gamma}_2] \hat{a}_4 \stackrel{=0}{=} -Ji [\hat{A}^\dagger, \hat{\Gamma}_1^\dagger] \hat{\Gamma}_2 \hat{a}_4 \stackrel{=0}{=} \\ &= 0 \end{aligned}$$

De modo semelhante, $Ji[\hat{A}^\dagger, \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1] \hat{a}_4 = 0$. Logo:

$$\therefore -J[\hat{A}^\dagger \hat{a}_4, \hat{\mathcal{J}}] = 0. \quad (\text{C.15})$$

E, finalmente, como $\hat{A}^\dagger \hat{a}_4 = (\hat{A} \hat{a}_4^\dagger)^\dagger$ (lembrando que \hat{a}_4 e \hat{A} comutam), de (C.15) decorre:

$$\therefore -J[\hat{A} \hat{a}_4^\dagger, \hat{\mathcal{J}}] \hat{a}_4 = 0. \quad (\text{C.16})$$

De (C.14), (C.15) e (C.16), conclui-se, por (C.13), que:

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{J}}] = 0.$$

Portanto, $\hat{\mathcal{J}}$ é uma quantidade conservada do modelo de 3+1 poços.

C.3 Uma nota final sobre as quantidades conservadas

De (C.8), (C.9) e (C.10) é fácil perceber que $\hat{\mathcal{J}}$ pode ser escrito em termos das quantidades conservadas \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 :

$$\hat{\mathcal{J}} = i \left(\hat{\Gamma}_1^\dagger \hat{\Gamma}_2 - \hat{\Gamma}_2^\dagger \hat{\Gamma}_1 \right) = \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2 - (\hat{\Gamma}_1^\dagger - i\hat{\Gamma}_2^\dagger)(\hat{\Gamma}_1 + i\hat{\Gamma}_2) \quad (\text{C.17})$$

Seria possível objetar então que o modelo de 3+1 poços não é integrável, mas seria talvez superintegrável, porque além das quantidades conservadas \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 há uma terceira quantidade conservada $\hat{\mathcal{J}}$ que não é uma simples combinação linear de \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 .

No entanto, note-se que qualquer combinação linear de $\hat{\Gamma}_1$ e $\hat{\Gamma}_2$ pode ser usada para gerar quantidades conservadas do modelo de 3+1 poços, por construção.

De forma mais geral, sejam os operadores $\hat{\Lambda}_1$ e $\hat{\Lambda}_2$, definidos por

$$\begin{pmatrix} \hat{\Lambda}_1 \\ \hat{\Lambda}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u & -v \\ v^* & u^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{\Gamma}_1 \\ \hat{\Gamma}_2 \end{pmatrix}$$

em que $u, v \in \mathbb{C}$ e $|u|^2 + |v|^2 = 1$. Então, as cargas conservadas mais gerais possíveis do modelo de 3+1 poços podem ser construídas do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \hat{Q}'_1 &= \hat{\Lambda}_1^\dagger \hat{\Lambda}_1 \\ \hat{Q}'_2 &= \hat{\Lambda}_2^\dagger \hat{\Lambda}_2 \end{aligned}$$

Isso significa que quaisquer conjuntos de duas quantidades conservadas adicionais do modelo de 3+1 poços diferem entre si por uma transformação do grupo $SU(2)$. Note-se que essa construção se segue diretamente de considerarmos que os vetores $\boldsymbol{\mu}_1$ e $\boldsymbol{\mu}_2$, das equações (C.2) e (C.3), podem ter componentes complexas.

Em geral, o problema de encontrar cargas conservadas no modelo se resume à escolha adequada de parâmetros livres α , β e θ , tais que $u = e^{i\alpha} \cos \theta$ e $v = e^{i\beta} \sin \theta$. Fazendo $u = 1$ e $v = 0$, obtemos $\hat{\Lambda}_1 = \hat{\Gamma}_1$ e $\hat{\Lambda}_2 = \hat{\Gamma}_2$, recuperando $\hat{Q}'_1 = \hat{Q}_1$ e $\hat{Q}'_2 = \hat{Q}_2$. Por outro lado, com a seguinte escolha:

$$\begin{pmatrix} \hat{\Lambda}_1 \\ \hat{\Lambda}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{\Gamma}_1 \\ \hat{\Gamma}_2 \end{pmatrix}$$

Então:

$$\begin{aligned} \hat{Q}'_1 &= \hat{\Lambda}_1^\dagger \hat{\Lambda}_1 = \frac{1}{2}(\hat{\Gamma}_1 + i\hat{\Gamma}_2)^\dagger (\hat{\Gamma}_1 + i\hat{\Gamma}_2) \\ \hat{Q}'_2 &= \hat{\Lambda}_2^\dagger \hat{\Lambda}_2 = \frac{1}{2}(i\hat{\Gamma}_1 + \hat{\Gamma}_2)^\dagger (i\hat{\Gamma}_1 + \hat{\Gamma}_2) \end{aligned}$$

Se, em vez de \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 , consideramos as quantidades conservadas \hat{Q}'_1 e \hat{Q}'_2 encontradas acima, vê-se então que o operador de corrente $\hat{\mathcal{J}}$ (C.17) pode ser escrito como uma combinação linear de \hat{Q}'_1 e \hat{Q}'_2 da seguinte forma:

$$\hat{\mathcal{J}} = \hat{Q}'_1 - \hat{Q}'_2,$$

com $\hat{Q}'_1 + \hat{Q}'_2 = \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2$.

Apêndice D

Implementação

A integrabilidade é uma característica atrativa do modelo de 3+1 poços por propiciar a obtenção de expressões analíticas (entre outras vantagens), como mostrado na seção 3.4 e no apêndice B. Ainda assim, mesmo sistemas integráveis são (em sua maioria) demasiadamente complexos. Não se pode prescindir de métodos numéricos. Esse é o caso aqui: alguns dos gráficos apresentados neste trabalho foram calculados numericamente, ou pela diagonalização do hamiltoniano geral do modelo de 3+1 poços, ou pela diagonalização do hamiltoniano efetivo.

Os programas a partir dos quais geraram-se os gráficos deste trabalho foram escritos em *Python*, na forma de *Notebooks*, na plataforma *Google Colab*. Todos foram criados por mim e podem ser consultados em <https://github.com/wallec/3plus1wells>¹.

¹A lógica usada para a representação matricial dos operadores segue trabalho anterior no modelo de 2+2 poços [37], disponibilizado em <https://github.com/danielsgrun/cfwell/tree/main/cfwell>.