

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Estados quânticos de bósons de spin 1 em poços duplos

David William Sabino Carvalho

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Miguel Gusmão e da Profa. Angela Foerster, apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre
2014

Este trabalho é dedicado

aos meus pais pela intensa dedicação e a incessante
motivação ao longo da minha vida.

Agradecimentos

★ Ao orientador Miguel A. C. Gusmão, por estar sempre disposto a conversar, por ter cedido diversas opiniões e ajudas que contribuíram na construção deste trabalho.

★ À coorientadora Angela Foerster, por ter sanado inúmeras dúvidas, pela dedicação e paciência demonstrada durante este período.

★ Aos meus amigos, pelas conversas, festas, palavras que motivaram e ajudaram durante o período de desenvolvimento deste trabalho, bem como a compreensão pelos diversos “não” aos convites que fizeram.

★ À minha família, por apoiar e dar suporte às minhas escolhas.

Muito Obrigado.

Resumo

Neste trabalho investigamos os diferentes estados de um sistema de bósons de spin 1 em dois poços de potencial conectados por tunelamento, com interação dependente de spin. O modelo utiliza o conhecido hamiltoniano de Bose-Hubbard, adicionando um termo de interação local que depende do módulo do spin total em um poço, podendo favorecer um estado de alto ou baixo spin para diferentes sinais da constante de acoplamento. Empregamos o conceito de *fidelidade* para detectar valores críticos dos parâmetros do modelo para os quais o estado fundamental sofre mudanças significativas. A natureza dos estados é investigada através do cálculo de números médios de ocupação nos poços e correlações de spin. A análise mais detalhada é feita para um sistema de duas partículas, mas alguns exemplos para números maiores são também apresentados.

Abstract

In this work we investigate the different states of a system of spin-1 bosons in two potential wells connected by tunneling, with spin-dependent interaction. The model utilizes the well-known Bose-Hubbard Hamiltonian, adding a local interaction term that depends on the modulus of the total spin in a well, favoring a high- or low-spin state for different signs of the coupling constant. We employ the concept of *fidelity* to detect critical values of model parameters for which the ground state undergoes significant changes. The nature of the states is investigated through evaluation of average occupation numbers in the wells and of spin correlations. A more detailed analysis is done for a two-particle system, but some examples for larger numbers are also presented.

Sumário

1. Introdução	1
2. Bósons de spin 1 em poços duplos	5
2.1 Estados quânticos	7
3. Transições no sistema de dois poços	11
3.1 Análise das transições via fidelidade	13
3.1.1 Região $U_2 > 0$	13
3.1.2 Região $U_2 < 0$	16
3.2 Correlação de Spin	18
3.2.1 Região $U_2 > 0$	18
3.2.2 Região $U_2 < 0$	21
3.3 “Fases” para $N_t = 2$	21
4. Conclusões	26
Apêndice	28
Referências Bibliográficas	33

Lista de Figuras

1.1	Visualização esquemática das etapas na condensação de Bose-Einstein	2
1.2	Formação de um condensado de Bose-Einstein de ^{87}Rb	4
3.1	Curvas de energia para $N_t = 2$	12
3.2	Fidelidade e número de ocupação para $N_t = 2$	14
3.3	Fidelidade para diferentes valores de N_t , com $U_2 = 0.1$	15
3.4	Fidelidade e número de ocupação para $U_2 = 0.8$	16
3.5	Linhas de mínimos da fidelidade para $N_t = 3$ na região $U_2 < 0$	17
3.6	Fidelidade para $N_t = 3$ em função de ϵ e U_2	18
3.7	Correlação e número de ocupação para $N_t = 2$	19
3.8	Correlação e número de ocupação para $N_t = 3$	20
3.9	Correlação e número de ocupação para diferentes valores de N_t	20
3.10	Correlação para $U_2 < 0$	22
3.11	Correlação em função de ϵ e U_2	23
3.12	Transições para $N_t = 2$	23
3.13	Números médios para $N_t = 2$ em função de ϵ e U_2	24
3.14	Correlação para $N_t = 2$ em função de ϵ e U_2	25
3.15	Linhas de mínimos da fidelidade via variação de U_2	25

Lista de Tabelas

A.1	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 0$	29
A.2	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 1$	30
A.3	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 2$	30
A.4	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 3$	31

Capítulo 1

Introdução

Há décadas, fenômenos que ocorrem a baixa temperatura intrigam e motivam inúmeros pesquisadores devido à possibilidade de visualizar a manifestação macroscópica da natureza quântica da matéria. Este fato está diretamente relacionado a descoberta de uma nova fase denominada *Condensado de Bose-Einstein* (CBE), predito teoricamente em 1925 por A. Einstein ([1], [2]) nos artigos que generalizaram, para partículas massivas, a ideia S. N. Bose sobre a estatística quântica de fótons [3], posteriormente intitulada de *Estatística de Bose-Einstein* (EBE). Einstein mostrou que ao resfriar um conjunto de partículas (que satisfizessem a EBE) abaixo de uma temperatura crítica (T_c), uma grande parcela dessas partículas passa a ocupar o estado quântico de menor energia acessível ao sistema, comportamento que caracteriza essa fase.

Podemos descrever a condensação de Bose-Einstein para um gás de átomos utilizando um argumento simples apresentado por W. Ketterle [4]. Para altas temperaturas, os átomos fracamente interagentes do gás comportam-se como partículas clássicas que se chocam. Ao diminuir a temperatura, os átomos podem ser tratados como pacotes de onda com comprimentos de onda de de Broglie λ_{dB} . À medida que resfriamos o gás, o comprimento de onda de de Broglie aumenta. Quando se atinge a temperatura crítica $T = T_c$ o comprimento de onda de de Broglie fica da ordem da distância média entre as partículas. Dessa forma as funções de onda de uma grande parcela de átomos se entrelaçam, formando o CBE. Reduzindo ainda mais a temperatura, próximo do zero absoluto, as partículas mais energéticas saem do sistema, restando um CBE puro, como ilustra a Fig. 1.1.

Embora esse fenômeno tenha sido predito no início do século XX, sua realização experimental só foi possível em 1995, devido à dificuldade em arrefecer gases até temperaturas tão baixas, da ordem de $10^{-6} K$. Os primeiros pesquisadores que obtiveram um CBE, com vapores, foram Cornell, Wieman e Ketterle [5, 6, 7], através do resfriamento de átomos utilizando técnicas experimentais sofisticadas. Na Fig. 1.2 apresentamos a formação de um

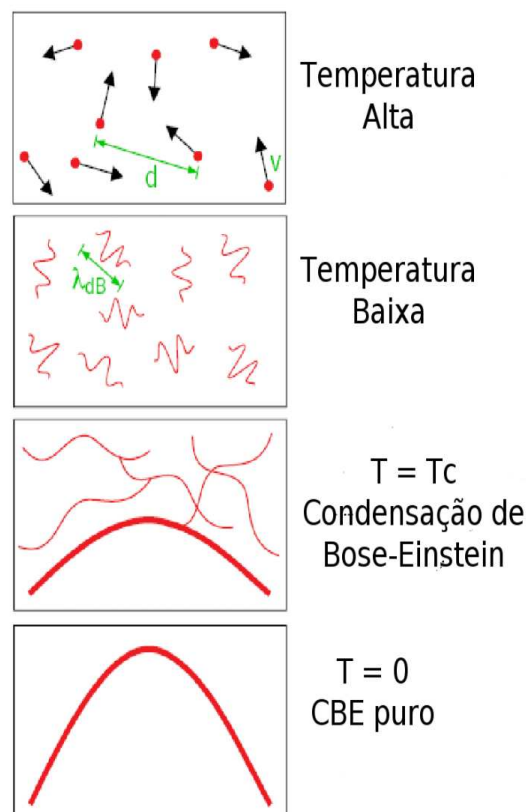


Fig. 1.1: *Visualização esquemática das etapas na condensação de Bose-Einstein. Alta temperatura: os átomos se comportam como partículas clássicas. Baixando a temperatura: os átomos podem ser considerados como pacotes de onda, com comprimento de onda de de Broglie λ_{dB} . Na temperatura crítica $T = T_c$, o comprimento de onda torna-se da ordem de grandeza da distância média entre as partículas, as funções de onda se entrelaçam, formando o CBE. Próximo ao zero absoluto: o CBE é puro, pois as demais partículas “evaporaram”. Figura extraída de [4].*

CBE de ^{87}Rb , como obtido pelo grupo de Cornell [7].

Após a obtenção dos primeiros CBE's, inúmeros experimentos de sucesso foram realizados [8, 9, 10]. Entre eles, podemos citar a comprovação experimental de tunelamento e auto-aprisionamento de átomos de ^{87}Rb entre dois CBE's [11]. Esse experimento pode ser explicado qualitativamente através de um modelo que descreve dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson, descrito pelo seguinte hamiltoniano [12]

$$H = U_1 N_1^2 + U_2 N_2^2 + U_{12} N_1 N_2 + \mu_1 N_1 + \mu_2 N_2 - \frac{t}{2} \left(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 \right), \quad (1.1)$$

onde U_j , para $j = 1, 2$, é um parâmetro que denota a interação de átomos no condensado j e U_{12} está ligado à interação entre átomos em diferentes condensados, t é a amplitude de tunelamento de átomos entre os condensados e os μ_j 's são potenciais externos. A notação utilizada é padrão, isto é, a_i^\dagger e a_i são operadores de criação e aniquilação de átomos, respectivamente, no i -ésimo condensado ($i = 1, 2$) e $N_i = a_i^\dagger a_i$ é o número de átomos no condensado i . Este modelo, apesar de muito simples, captura aspectos físicos importantes como a existência de uma fase deslocalizada e outra localizada. Além disso, o modelo foi utilizado para explicar experimentos recentes sobre emaranhamento e bifurcações [13, 14]. Neste cenário, outro experimento importante foi a criação de um condensado molecular através da ressonância de Feshbach [15, 16, 17, 18, 19].

Do ponto de vista teórico, existem muitos modelos e técnicas para descrever os diferentes fenômenos associados aos condensados de Bose-Einstein. Podemos citar, por exemplo, as equações de Gross-Pitaevskii [20] e aproximação de campo médio [21], além de métodos numéricos para sistemas de tamanho finito.

As primeiras técnicas utilizadas para aprisionar os átomos, como a armadilha magnética, congelavam os graus de liberdade associados aos spins das partículas, e assim elas se comportavam como partículas sem spin. Com o avanço tecnológico, conseguiu-se utilizar armadilhas ópticas, permitindo que esses graus de liberdade continuassem a existir e pudessem ser experimentalmente ajustados para ter um papel relevante nas interações entre os átomos [22]. As redes ópticas são criadas por feixes de laser contra-propagantes, com um arranjo de frequências e direções apropriado para formar uma onda estacionária. Devido à precisão com que podem ser controladas as amplitudes e frequências, este processo torna-se um ótimo método para investigar diferentes fases do sistema e suas características [23, 24, 25, 26]. Além disso, permite reproduzir vários fenômenos já observados no caso sem spin, como a superfluidade e o isolante de Mott [27, 28].

No caso em que o grau relacionado ao spin é livre, a fase abaixo da temperatura crítica é

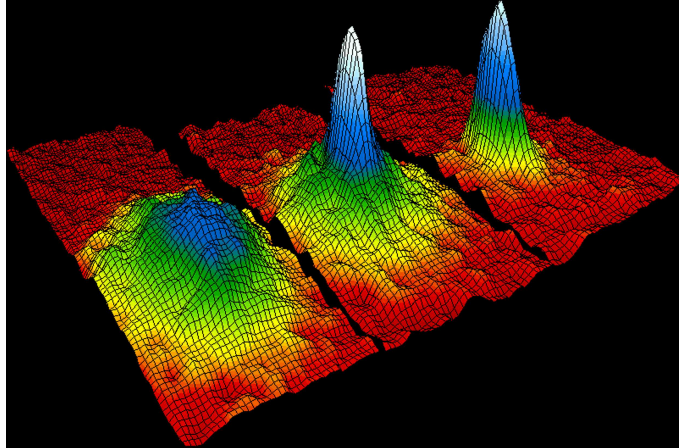


Fig. 1.2: Formação de um condensado de Bose-Einstein composto por átomos de ^{87}Rb . À esquerda, temos o gás acima da temperatura crítica. Ao centro, próximo à temperatura de transição nota-se a formação do condensado, caracterizado por um pico na densidade de átomos. À direita, já a uma temperatura menor que T_c , somente os átomos menos energéticos ficaram na amostra, formando assim um condensado quase puro. Figura extraída de [7]

chamada de condensado de Bose-Einstein espinorial, cujas propriedades foram investigadas por vários pesquisadores [29, 30, 31, 32], tendo sido detectadas diferentes ordens magnéticas, como antiferromagnética para o ^{23}Na e ferromagnética para ^{87}Rb . Em casos mais exóticos, foi relatada também a existência de *skyrmions* [33].

Nesta dissertação vamos estudar um sistema de tamanho finito que pode ser visto como a menor unidade de um CBE espinorial em uma rede óptica. Nosso sistema será constituído por poucos bósons de spin 1 em um poço de potencial duplo. As partículas apresentam uma interação repulsiva do tipo Hubbard e uma interação atrativa dependente de spin, que pode favorecer o estabelecimento de uma estado de alto ou baixo spin total em um dos poços, dependendo do sinal do parâmetro que caracteriza essa interação. O objetivo básico é estudar mudanças nas características do estado fundamental induzidas por variações dos parâmetros do modelo.

A dissertação está organizada da seguinte forma: no Capítulo 2 apresentamos em detalhe o modelo, que é uma variante do modelo de Bose-Hubbard acrescido de uma interação dependente de spin na forma proposta na Ref. [34]. Aí também discutimos a diagonalização do hamiltoniano e o cálculo das quantidades que serão utilizadas para obter informações sobre o estado fundamental. Os resultados para vários casos típicos são apresentados no Capítulo 3. O Capítulo 4 apresenta nossas conclusões e possíveis desdobramentos do trabalho.

Capítulo 2

Bósons de spin 1 em poços duplos

Neste trabalho iremos estudar o modelo que descreve um sistema de bósons de spin 1 em dois poços de potencial com uma barreira finita entre eles. O aspecto mais interessante de ter partículas com spin não nulo é poder incluir uma interação dependente das orientações de spin das partículas, além da repulsão usual que é parte do hamiltoniano de Bose-Hubbard. Assim, seguindo a Ref. [34], escrevemos uma variante desse hamiltoniano com a forma

$$H = \epsilon(n_L - n_R) - t \sum_{\sigma} (L_{\sigma}^{\dagger} R_{\sigma} + R_{\sigma}^{\dagger} L_{\sigma}) + \frac{U_0}{2} \sum_{i=L,R} n_i(n_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_{i=L,R} (\mathbf{S}_i^2 - 2n_i), \quad (2.1)$$

onde L_{σ} e R_{σ} (L_{σ}^{\dagger} e R_{σ}^{\dagger}) são os operadores de aniquilação (criação) de um bóson nos poços esquerdo e direito, respectivamente, no estado de spin $\sigma = \{-1, 0, 1\}$; n_i e \mathbf{S}_i são os operadores associados ao número de bósons e spin total no poço $i = L, R$; ϵ é um parâmetro de assimetria, pois $2|\epsilon|$ caracteriza a diferença entre os níveis de energia dos dois poços no limite de tunelamento nulo (o modelo considera um único nível por poço); t é a amplitude de tunelamento; U_0 é a interação de Hubbard usual (repulsiva) e U_2 descreve a parte da interação que é dependente de spin. Deve-se notar que os termos de interação só contribuem quando há mais de uma partícula em um mesmo poço. Neste caso, o último termo favorece estados correspondentes a um spin local com módulo baixo se $U_2 > 0$ e alto se $U_2 < 0$.

Por ser um sistema bosônico, valem as relações canônicas de comutação para os operadores de criação e aniquilação, isto é,

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= 0, & [L_i, L_j^{\dagger}] &= \delta_{ij}, \\ [R_i, R_j] &= 0, & [R_i, R_j^{\dagger}] &= \delta_{ij}, \\ [L_i, R_j] &= 0, & [R_i, L_j^{\dagger}] &= 0, \end{aligned} \quad (2.2)$$

além das relações obtidas a partir delas por conjugação complexa. Os operadores número de partículas e spin total de cada poço podem ser escritos em termos dos operadores de criação e aniquilação da seguinte forma

$$n_L = \sum_{\sigma} L_{\sigma}^{\dagger} L_{\sigma} \quad (2.3)$$

$$n_R = \sum_{\sigma} R_{\sigma}^{\dagger} R_{\sigma} \quad (2.4)$$

$$\mathbf{S}_L = \sum_{\sigma\sigma'} L_{\sigma}^{\dagger} \mathbf{T}_{\sigma\sigma'} L_{\sigma'} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{S}_R = \sum_{\sigma\sigma'} R_{\sigma}^{\dagger} \mathbf{T}_{\sigma\sigma'} R_{\sigma'} , \quad (2.6)$$

sendo $\mathbf{T} = T_x \hat{\mathbf{x}} + T_y \hat{\mathbf{y}} + T_z \hat{\mathbf{z}}$, em termos das matrizes usuais da álgebra de spin 1.

O hamiltoniano (2.1) comuta com o número total de partículas ($n_t = n_L + n_R$), com o spin total do sistema ($\mathbf{S}_t = \mathbf{S}_L + \mathbf{S}_R$) e com sua projeção no eixo z, isto é,

$$\begin{aligned} [H, n_t] &= 0 , \\ [H, \mathbf{S}_t^2] &= 0 , \\ [H, S_t^z] &= 0 . \end{aligned} \quad (2.7)$$

Logo, os autovalores (N_t , s_t e s_t^z) associados a esses operadores também são grandezas conservadas. Além disto, é possível estimar um valor máximo para as quantidades s_L , s_R e s_t , usando o fato que o sistema é formado por partículas de spin 1,

$$s_i \leq N_i \quad \forall \quad i \in \{L, R, t\} , \quad (2.8)$$

onde s_L e s_R são os números quânticos relacionados aos autovalor de \mathbf{S}_L^2 e \mathbf{S}_R^2 . Além disso, por se tratar de um sistema de bósons, as funções de onda devem ser simétricas com relação à troca de qualquer par de partículas. Isto gera uma condição restritiva sobre o valor do spin total de cada poço, que pode ser escrita como [22]

$$s_i + N_i = 2k \quad \forall \quad i \in \{L, R\} , \quad (2.9)$$

onde k é um número pertencente ao conjunto dos números naturais (\mathbb{N}). Ou seja, a soma do valor do spin com o número de partículas em um dado poço deve ser uma quantidade par. Essas são importantes na elaboração de uma base adequada para a descrição do sistema, o

que será feito na próxima seção.

Todo o trabalho terá por base o hamiltoniano (2.1). Escolhemos a repulsão coulombiana local U_0 como o parâmetro que define a escala de energias, isto é, fixamos $U_0 = 1$ nos cálculos numéricos, ficando implícito que qualquer parâmetro com dimensão de energia é expresso em unidades de U_0 .

2.1 Estados quânticos

Nosso estudo das propriedades de sistemas de bósons de spin 1 em poços duplos será feito através da diagonalização exata do hamiltoniano (2.1), com diferentes números de partículas e diferentes conjuntos de parâmetros do modelo. Para isso, é preciso construir uma base conveniente para a representação dos estados possíveis. Para um dado número de partículas, o espaço de Hilbert (\mathcal{H}) associado a este modelo pode ser dividido em subespaços de spin total definido, isto é,

$$\begin{aligned}
 N_t = 2 & : \mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_t=0} \oplus \mathcal{H}_{s_t=1} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2} , \\
 N_t = 3 & : \mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_t=1} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2} \oplus \mathcal{H}_{s_t=3} , \\
 N_t = 4 & : \mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_t=0} \oplus \mathcal{H}_{s_t=1} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2} \oplus \mathcal{H}_{s_t=3} \oplus \mathcal{H}_{s_t=4} , \\
 N_t = 5 & : \mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_t=1} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2} \oplus \mathcal{H}_{s_t=3} \oplus \mathcal{H}_{s_t=4} \oplus \mathcal{H}_{s_t=5} , \\
 & \vdots \\
 N_t = 2k & : \mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_t=0} \oplus \mathcal{H}_{s_t=1} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{s_t=2k-1} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2k} , \\
 N_t = 2k + 1 & : \mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_t=1} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{s_t=2k} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2k+1} ,
 \end{aligned}$$

onde k é qualquer número pertencente ao conjunto dos naturais (\mathbb{N}). Isto é possível devido às relações de comutação (2.7) e implica em que a matriz de representação seja diagonal por blocos.

Os estados da base são construídos a partir das possíveis distribuições das partículas nos dois poços e das possíveis configurações de spin, respeitadas as condições (2.8) e (2.9).

Utilizamos a notação

$$|\{N_L, N_R\}, \{s_L, s_R\}, s_T\rangle , \tag{2.10}$$

na qual se especificam os números de ocupação de cada poço, os números quânticos de spin total de cada poço e o spin total do sistema. Essa descrição é degenerada em relação à projeção do spin total sobre um eixo, pois o hamiltoniano comuta com \mathbf{S}_i^z .

No caso em que $N_t = 2$, a base é composta por sete vetores [22],

$$\begin{aligned}
 |E_1\rangle &= |\{0, 2\}, \{0, 0\}, 0\rangle, \\
 |E_2\rangle &= |\{1, 1\}, \{1, 1\}, 0\rangle, \\
 |E_3\rangle &= |\{2, 0\}, \{0, 0\}, 0\rangle, \\
 |E_4\rangle &= |\{1, 1\}, \{1, 1\}, 1\rangle, \\
 |E_5\rangle &= |\{0, 2\}, \{0, 2\}, 2\rangle, \\
 |E_6\rangle &= |\{1, 1\}, \{1, 1\}, 2\rangle, \\
 |E_7\rangle &= |\{2, 0\}, \{2, 0\}, 2\rangle.
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Como o hamiltoniano envolve operadores de criação e aniquilação de partículas em poços definidos e com estado de spin definido, é conveniente decompor os vetores da base em termos de vetores do tipo

$$|N_L^0, N_L^1, N_L^{-1}; N_R^0, N_R^1, N_R^{-1}\rangle, \tag{2.12}$$

que especificam os números de ocupação de cada estado de spin em cada poço (ver apêndice A).

Pelas equações (2.2), sabemos que cada operador atua em um único poço e estado de spin, de acordo com as relações

$$L_\sigma^\dagger |N_L^\sigma\rangle = \sqrt{N_L^\sigma + 1} |N_L^\sigma + 1\rangle, \tag{2.13}$$

$$L_\sigma |N_L^\sigma\rangle = \sqrt{N_L^\sigma} |N_L^\sigma - 1\rangle, \tag{2.14}$$

$$R_\sigma^\dagger |N_R^\sigma\rangle = \sqrt{N_R^\sigma + 1} |N_R^\sigma + 1\rangle, \tag{2.15}$$

$$R_\sigma |N_R^\sigma\rangle = \sqrt{N_R^\sigma} |N_R^\sigma - 1\rangle. \tag{2.16}$$

Para exemplificar, apresentamos a decomposição de três dos estados da Eq. (2.11). Escolhendo o subespaço com $s_t^z = 0$, temos

$$|E_1\rangle = |\{0, 2\}, \{0, 0\}, 0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |0, 0, 0; 0, 1, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 0, 0; 2, 0, 0\rangle, \tag{2.17}$$

$$|E_4\rangle = |\{1, 1\}, \{1, 1\}, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0, 1, 0; 0, 0, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |0, 0, 1; 0, 1, 0\rangle, \tag{2.18}$$

$$|E_5\rangle = |\{0, 2\}, \{0, 2\}, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 0, 0; 0, 1, 1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0, 0, 0; 2, 0, 0\rangle. \tag{2.19}$$

Dessa forma, podemos encontrar facilmente os elementos de matriz do hamiltoniano na base (2.11), $\langle E_i | H | E_j \rangle$ (i associado às linhas e j às colunas). Vamos trabalhar sempre no subespaço de $s_t^z = 0$, no qual o hamiltoniano é representado pela matriz

$$\begin{pmatrix} 2\epsilon + U_0 - 2U_2 & -2\sqrt{2}t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2\sqrt{2}t & 0 & -2\sqrt{2}t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\sqrt{2}t & -2\epsilon + U_0 - 2U_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\epsilon + U_0 + U_2 & -2\sqrt{2}t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2\sqrt{2}t & 0 & -2\sqrt{2}t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\sqrt{2}t & -2\epsilon + U_0 + U_2 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

sendo possível verificar a forma diagonal por blocos mencionada anteriormente. É interessante notar que existe um bloco unidimensional no qual o hamiltoniano é representado por uma “matriz” nula para valores genéricos dos parâmetros. Isto indica que o estado correspondente não pertence ao espaço de Hilbert. Trata-se do vetor $|E_4\rangle$, que é antissimétrico frente à troca das duas partículas, como pode ser visto na Eq. (2.17), e, portanto, não pode ser um estado de bósons. Daí se deduz que a condição (2.9), proposta na Ref. [22], não é suficiente para garantir a simetria de troca.

No caso de $N_t = 3$, a base tem dimensão 12 e é composta pelos seguintes vetores:

$$\begin{aligned} |E_1\rangle &= |\{0, 3\}, \{0, 1\}, 1\rangle, \\ |E_2\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 0\}, 1\rangle, \\ |E_3\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 2\}, 1\rangle, \\ |E_4\rangle &= |\{2, 1\}, \{0, 1\}, 1\rangle, \\ |E_5\rangle &= |\{2, 1\}, \{2, 1\}, 1\rangle, \\ |E_6\rangle &= |\{3, 0\}, \{1, 0\}, 1\rangle, \\ |E_7\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 2\}, 2\rangle, \\ |E_8\rangle &= |\{2, 1\}, \{2, 1\}, 2\rangle, \\ |E_9\rangle &= |\{0, 3\}, \{0, 3\}, 3\rangle, \\ |E_{10}\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 2\}, 3\rangle, \\ |E_{11}\rangle &= |\{2, 1\}, \{2, 1\}, 3\rangle, \\ |E_{12}\rangle &= |\{3, 0\}, \{3, 0\}, 3\rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Pela dificuldade de organização na página, não apresentaremos a matriz do hamiltoniano

neste caso, nem nos casos com maior número de partículas que serão analisados.

Capítulo 3

Transições no sistema de dois poços

Neste capítulo apresentamos um estudo sistemático dos autoestados do hamiltoniano (2.1), com ênfase nas mudanças do estado fundamental quando são variados os parâmetros do modelo. Toda a análise está baseada na diagonalização da matriz do hamiltoniano no subespaço relevante, o que é feito numericamente. Lembramos que todos os valores numéricos de energias são expressos em unidades de U_0 , a interação repulsiva local, e que focalizamos o subespaço $s_i^z = 0$.

Para exemplificar, a Fig. 3.1 apresenta, para o sistema com duas partículas, as variações dos dois estados de mais baixa energia para cada valor do spin total em função da variação do parâmetro de assimetria ϵ , em uma situação de tunelamento fraco ($t = 0.05$) e para dois valores bastante distintos de U_2 . Cabe lembrar que os níveis de energia locais são ϵ e $-\epsilon$ para os poços do lado esquerdo (L) e direito (R), respectivamente, que podem ser correlacionados às profundidades dos poços. Então, $\epsilon < 0$ significa que o poço L é “mais profundo” que o poço R . Pela forma escolhida no modelo, existe uma simetria de inversão em torno de $\epsilon = 0$, que é observada nos gráficos da Fig. 3.1. Em ambos os casos, é clara a existência de ponto(s) em que o estado fundamental se altera – a natureza dessa mudança pode ser identificada a partir do comportamento de valores esperados de quantidades físicas. Esses pontos seriam cruzamentos de níveis locais na ausência de tunelamento, e o afastamento entre as curvas torna-se maior à medida que o tunelamento aumenta.

Tais mudanças no estado fundamental de um sistema de tamanho finito (e poucas partículas) podem ser vistas como correspondentes (ou precursoras) de mudanças que, em um sistema macroscópico, caracterizariam uma *transição de fase quântica* (TFQ). Transições desse tipo, ao contrário das transições de fase termodinâmicas, ocorrem em temperatura nula e são caracterizadas por uma mudança abrupta nas propriedades do estado fundamental sob a variação de algum parâmetro [35, 36, 37].

Dentre as técnicas usuais para a detecção de TFQ's, destacamos a que pode ser utilizada

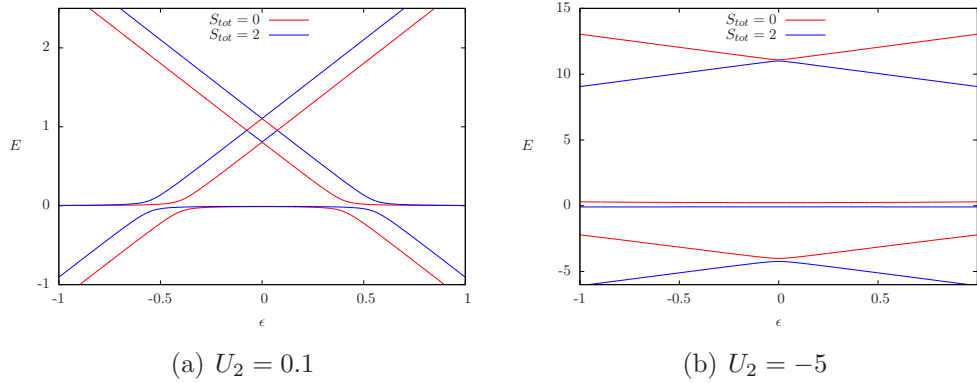


Fig. 3.1: *Curvas de energia para $N_t = 2$ em função de ϵ , para $t = 0.05$ e dois valores de U_2 . As curvas vermelhas representam os estados com $s_t = 0$, e as azuis com $s_t = 2$. Na figura da esquerda, temos a aproximação entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado para $\epsilon \approx -0.4$ e $\epsilon \approx 0.4$, no qual, definem dois possíveis pontos críticos. Já na figura da direita, temos apenas um ponto localizado em $\epsilon \approx 0$.*

sem ambiguidades para sistemas de tamanho finito, que é o cálculo da *fidelidade*. Trata-se de um conceito oriundo de teorias de informação quântica, que mede a similaridade entre dois estados quânticos. Embora existam definições mais gerais [38], a definição mais simples, e que serve aos nossos propósitos, é

$$F(\psi, \phi) = |\langle \psi | \phi \rangle|, \quad (3.1)$$

que caracteriza a fidelidade entre dois estados quaisquer do espaço de Hilbert, definindo-a simplesmente como o módulo do seu produto escalar. Para estados normalizados, $0 \leq F \leq 1$.

A utilização da fidelidade para o estudo de mudanças significativas nas propriedades de um sistema envolve o cálculo dessa quantidade entre os estados fundamentais de dois sistemas idênticos exceto por uma variação arbitrariamente pequena de um dos parâmetros do hamiltoniano. Dentro de um mesmo regime, os estados fundamentais são muito similares e $F \rightarrow 1$. Apenas nas imediações de uma mudança de regime teremos estados fundamentais bastante distintos, gerando um mínimo da fidelidade no valor “crítico” do parâmetro que está sendo variado.

Como estamos tratando de partículas com spin não nulo, também é interessante calcular correlações de spins, que são essencialmente o valor esperado do produto escalar entre os spins de duas partículas. Essas quantidades são muito usuais em descrições teóricas de sólidos magnéticos, pois estão diretamente associadas à susceptibilidade magnética, que não apenas

descreve a resposta a um campo aplicado, mas serve de indicador do estabelecimento de ordem magnética. O conceito de ordem magnética não faz sentido para o sistema que estamos estudando, devido ao seu tamanho. Porém, as correlações de spins podem dar informações relevantes sobre a natureza do estado fundamental quanto às orientações relativas dos spins das partículas.

No que segue, faremos uma análise detalhada das propriedades do sistema de bósons de spin 1 utilizando a fidelidade, a correlação de spins e o número médio de partículas em um dado poço, que também dá informações importantes sobre a natureza dos estados.

3.1 Análise das transições via fidelidade

Considerando que o objetivo principal é investigar os efeitos de uma interação dependente de spin, vamos fixar a interação repulsiva U_0 , que, como já mencionamos, será a nossa unidade de energia. Para uma dada amplitude de tunelamento t , a eficiência do tunelamento em misturar os estados dos dois poços é controlada pelo parâmetro de assimetria, sendo obviamente máxima para um sistema simétrico ($\epsilon = 0$). Para cada escolha do número total de partículas N_t , analisaremos as possíveis transições, isto é, mudanças no estado fundamental para diferentes valores de U_2 e utilizando ϵ como o parâmetro de controle.

A escolha apropriada para a fidelidade é, portanto,

$$F(\epsilon; N_t, t, U_2) = | \langle \epsilon - \delta; N_t, t, U_2 | \epsilon + \delta; N_t, t, U_2 \rangle |, \quad (3.2)$$

onde δ é uma quantidade pequena na escala de valores de ϵ , que, a exemplo da Fig. 3.1, será variada em intervalos simétricos com extremos da ordem da unidade de energia.

Inicialmente, apresentaremos separadamente os resultados para $U_2 > 0$ e $U_2 < 0$.

3.1.1 Região $U_2 > 0$

Este é o regime no qual a interação dependente de spin favorece estados com baixo spin em um poço que contenha mais de uma partícula.

Como um primeiro exemplo, a Fig. 3.2(a) apresenta a fidelidade e o número médio de partículas no poço do lado direito (R) para $N_t = 2$, em função do parâmetro ϵ , com um tunelamento alto, $t = 0.5$, e com $U_2 = 0.1$. Devido ao tunelamento alto, podemos notar uma evolução suave do número médio de partículas no poço R . Mesmo assim, temos a presença de dois mínimos, indicando pontos críticos de mudança do estado fundamental para esse

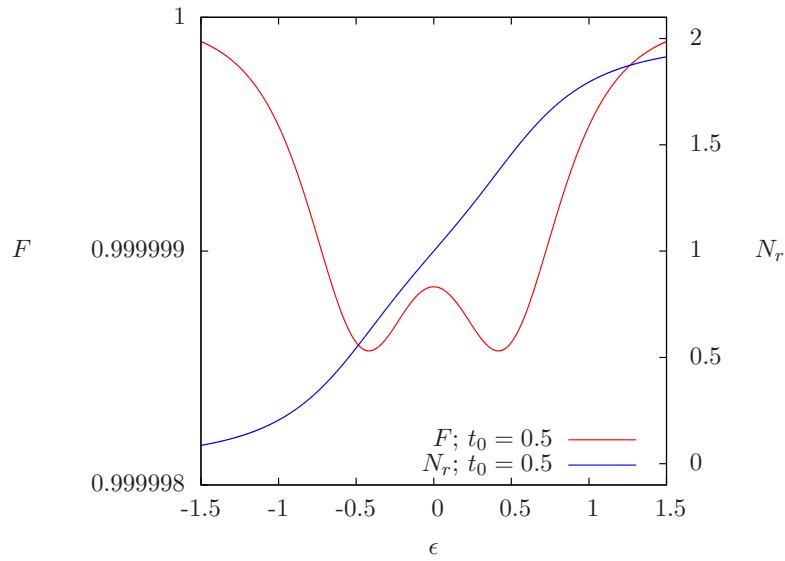
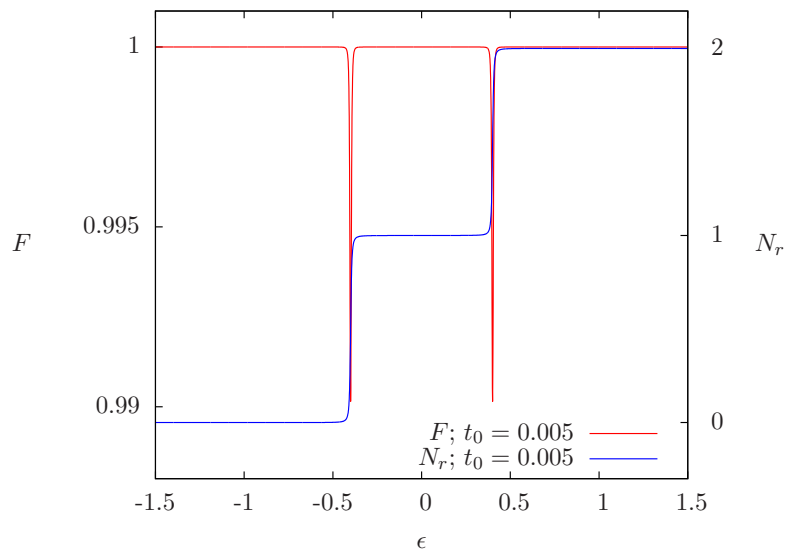

 (a) $t = 0.5$

 (b) $t = 0.005$

Fig. 3.2: Fidelidade (F) e número de partículas no poço da direita (N_R) em função de ϵ , para $N_t = 2$, $U_2 = 0.1$ e dois valores bastante distintos da amplitude de tunelamento. Podemos observar dois mínimos, localizados em $\epsilon \approx \pm 0.4$, que são muito mais definidos quando o tunelamento é fraco. Também se observa a evolução suave de N_R para tunelamento alto (a) e abrupto (em “degraus”) para tunelamento fraco (b).

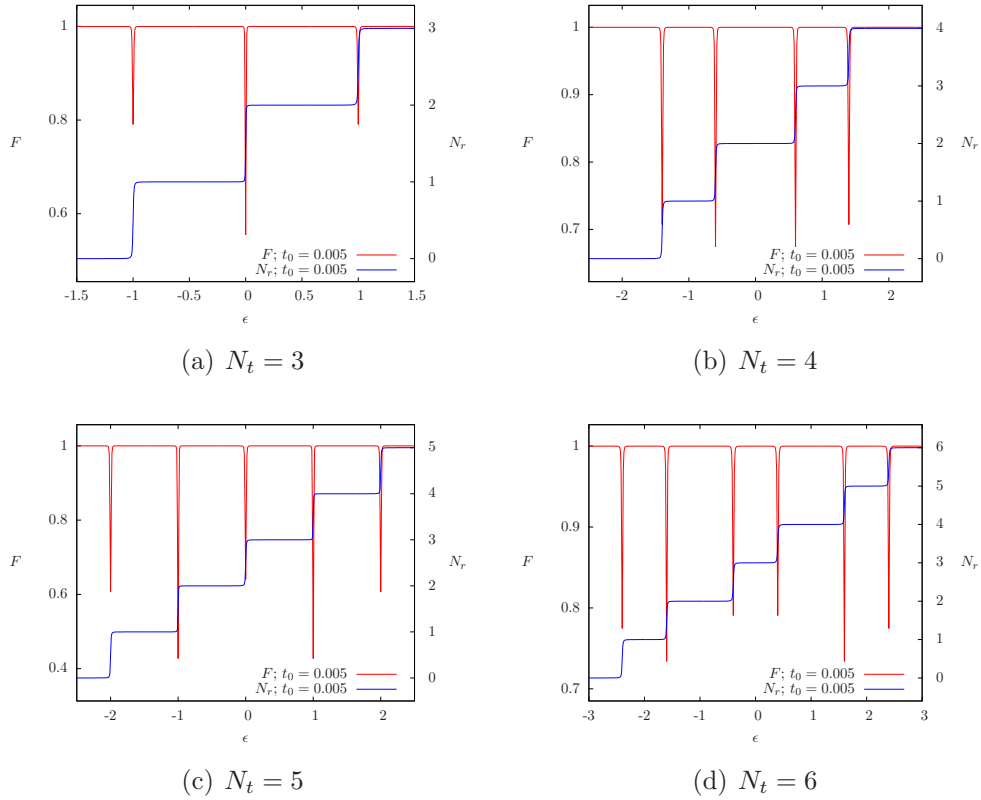


Fig. 3.3: Fidelidade para diferentes valores de N_t com $t = 0.005$ e $U_2 = 0.1$. Nelas podemos notar os mínimos da fidelidade indicando os pontos críticos do sistema e o comportamento tipo escada do número médio de partículas no lado direito.

conjunto de parâmetros. Os mínimos tornam-se muito mais definidos com a redução da amplitude de tunelamento, como é mostrado na Fig. 3.2(b), similar ao caso anterior mas com menor tunelamento. Aqui fica claro que existem duas transições, e a observação do comportamento de N_R deixa claro que essas transições estão associadas à passagem de um estado com as duas partículas no poço L para um estado com uma em cada poço na região de baixa assimetria, voltando a ter duas partículas no mesmo poço, agora o poço R , quando a assimetria inicial se inverte.

Se aumentarmos o número de partículas no sistema, observamos um comportamento similar ao caso $N_t = 2$, com o número médio de ocupação do poço R aumentando em “degraus” de uma unidade, como é mostrado na Fig. 3.3 para os casos de $N_t = 3, 4, 5, 6$.

O comportamento para N_t ímpar é diferente do caso par, apresentando uma transição em $\epsilon = 0$. Para N_t par existe um platô central, que corresponde a ocupações iguais nos dois poços, sendo estável quando a assimetria entre os poços é baixa. Essa situação é estabilizada

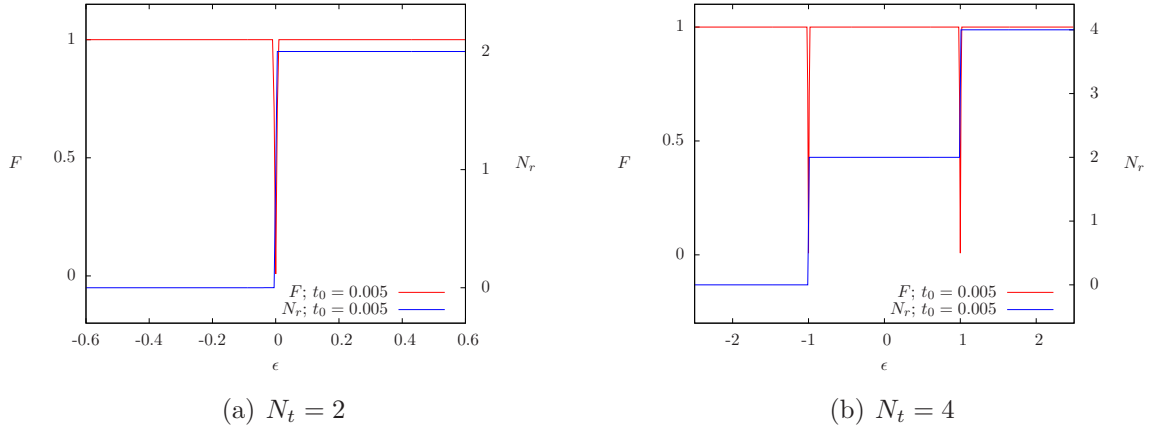


Fig. 3.4: Fidelidade e número de partículas no poço R em função de ϵ para $U_2 = 0.8$ e dois valores (pares) de N_t .

pela interação repulsiva U_0 , que faz com que a energia seja minimizada se as partículas se encontram em poços diferentes. Isso, obviamente, não pode ocorrer para N_t ímpar, quando a partícula adicional tende a ficar no poço mais profundo.

Os resultados apresentados correspondem ao regime de U_2 fraco. A situação muda quando U_2 ultrapassa um valor crítico $U_2^c = 0.5$, quando a formação de pares de spin nulo em cada poço é favorecida, pois o efeito atrativo de U_2 compensa a repulsão U_0 . Isto é exemplificado para $N_t = 2$ na Fig. 3.4(a), onde se nota o desaparecimento da região com uma partícula em cada poço, presente na Fig. 3.2(b), e para $N_t = 4$ na Fig. 3.4(b), onde também é evidente o desaparecimento dos estados de ocupação ímpar em um poço, presentes na Fig. 3.3(b).

3.1.2 Região $U_2 < 0$

De acordo com o que já comentamos na apresentação do modelo, nesta região a interação dependente de spin tende a maximizar o spin total em um poço que esteja ocupado com mais de uma partícula.

A análise através da fidelidade continua indicando a existência de valores críticos do parâmetro de assimetria ϵ , que tendem aos mesmos valores do caso anterior quando $U_2 \rightarrow 0$, mas variam linearmente com o U_2 na região $U_2 < 0$, em concordância com o que é descrito na Ref. [22].

Esse comportamento é exemplificado na Fig. 3.5 para $N_t = 3$. A figura mostra o plano (ϵ, U_2) , com os valores da fidelidade indicados pela escala de cores. Podemos notar “linhas”

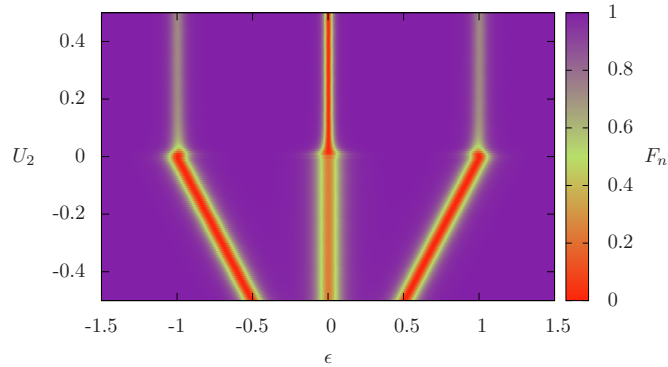


Fig. 3.5: Fidelidade normalizada (F_n) em função do parâmetro de assimetria ϵ e da interação dependente de spin U_2 , para $N_t = 3$ e $t = 0.01$. As linhas de mínimos da fidelidade variam linearmente com U_2 na região $U_2 < 0$.

de transição, provenientes dos mínimos de F (cujos valores foram normalizados de forma a ter $F_n = 0$ no mínimo mais profundo ao longo de uma linha de U_2 constante). As linhas na região $U_2 > 0$ são verticais, indicando que os valores críticos de ϵ não dependem de U_2 nessa região. Isto é uma característica dos sistemas com N_t ímpar, pois já observamos anteriormente que existe variação no caso de N_t par. Voltaremos a discutir essas características após a análise de correlações de spins.

Estendendo a análise para maiores valores absolutos de U_2 observa-se que as linhas convergentes da Fig. 3.5 se encontram no ponto $(\epsilon = 0, U_2 = -1)$. A partir daí, a transição passa a ser única, independente do valor de U_2 , como é mostrado na Fig. 3.6, que apresenta um gráfico de superfície da fidelidade (normalizada na forma já referida) em função de ϵ e U_2 . A redução a uma única transição ocorre de forma semelhante ao que vimos par $U_2 > 0$, isto é, a energia atrativa associada ao termo em U_2 supera a repulsão U_0 , favorecendo uma configuração na qual as três partículas (neste caso, com spins paralelos) ocupam o poço mais profundo.

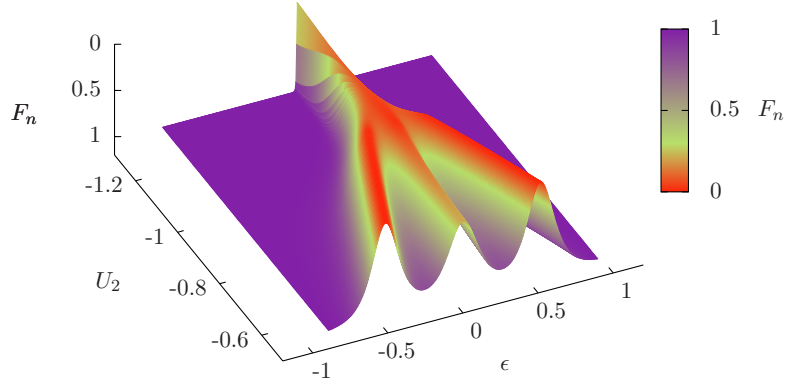


Fig. 3.6: Fidelidade (normalizada) para $N_t = 3$ em função de ϵ e U_2 , com $t = 0.1$. Note a inversão do eixo vertical, para facilitar a visualização. As regiões de cor mais próxima do vermelho representam os mínimos da fidelidade. Podemos observar a mudança de comportamento para $U_2 < -1$, onde desaparecem os estados intermediários - ($\langle n_L \rangle = 1, \langle n_R \rangle = 2$) e ($\langle n_L \rangle = 2, \langle n_R \rangle = 1$).

3.2 Correlação de Spin

Passamos à caracterização dos regimes observados através da correlação de spin entre as partículas em poços distintos. Essa correlação é dada pela quantidade C , definida como o valor esperado do operador $S_l \cdot S_r$ no estado fundamental,

$$C(\epsilon, t, U_2) = \langle (\epsilon, t, U_2) | S_l \cdot S_r | \epsilon, t, U_2 \rangle. \quad (3.3)$$

Aqui também analisaremos separadamente as regiões de diferentes sinais do parâmetro U_2 .

3.2.1 Região $U_2 > 0$

No caso de $N_t = 2$, para $U_2 < 0.5$, o cálculo da fidelidade mostrou a existência de dois pontos críticos, para $\epsilon \approx \pm 0.4$, como vimos na Fig. 3.2. Observando a Fig. 3.7, vemos que as três regiões definidas por esses pontos apresentam diferentes valores da correlação de spins entre os dois poços.

- Na parte central, com uma ocupação média de uma partícula em cada poço, a cor-

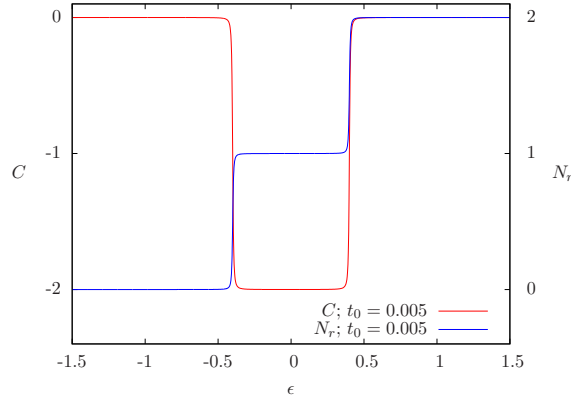


Fig. 3.7: Correlação (C) e número de partículas no poço R em função de ϵ , para $t = 0.005$ e $U_2 = 0.1$ no caso $N_t = 2$. A correlação de spins entre os poços só é significativamente diferente de zero (e, neste caso, negativa) na parte central, correspondente a uma ocupação média de uma partícula em cada poço.

relação aproxima-se de $C = -2$, indicando que os spins nos dois poços tendem a ser opostos. Isto se deve às flutuações causadas pelo tunelamento, que geram estados intermediários nos quais as duas partículas se encontram no mesmo poço, minimizando a energia na configuração de mínimo spin total.

- Nos extremos, temos $C \approx 0$, pois a ocupação média de um dos poços tende a se anular, o mesmo acontecendo com o seu spin. Embora as flutuações devidas ao tunelamento introduzam o estado intermediário (virtual) com uma partícula por sítio, a correlação não é significativamente alterada no regime de tunelamento fraco.

Entretanto, a correlação comporta-se diferentemente para N_t ímpar. No exemplo apresentado na Fig. 3.8, para o caso de três partículas, vemos que a correlação apresenta pequenas variações perto dos pontos críticos, mas é praticamente nula em todas as regiões.

Isso pode ser entendido se observarmos que, quando não temos um poço vazio, existe um par de partículas em um dos poços. A interação $U_2 > 0$ favorece o estado de spin nulo para esse par, o que nos remete a uma situação similar à das regiões extremas, nas quais o spin nulo se deve à ocupação nula.

Os desvios, embora pequenos, são mais notáveis próximo aos pontos críticos, onde a mistura de estados aumenta as flutuações de spin.

Para sistemas com maior número de partículas, o comportamento é similar aos dois casos que foram apresentados, fato que pode ser visualizado para $N_t = 4, 5, 6$ na Fig. 3.9.

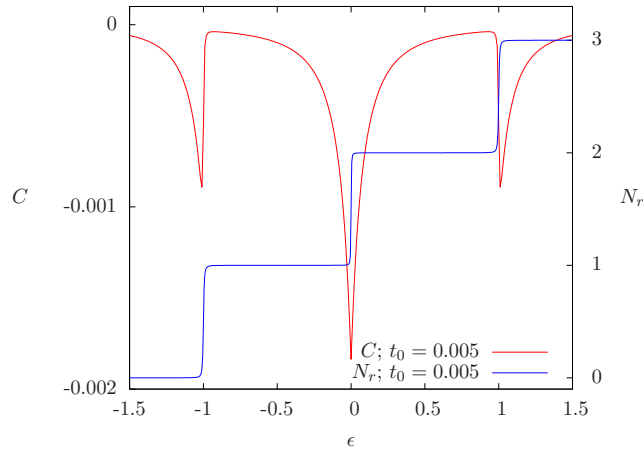


Fig. 3.8: Correlação (C) e número de partículas na direita (N_R) em função de ϵ , para $t = 0.005$ e $U_2 = 0.1$. As transições, caracterizadas por alterações do número médio, são acompanhadas por pequenas variações na correlação (note a escala do eixo vertical).

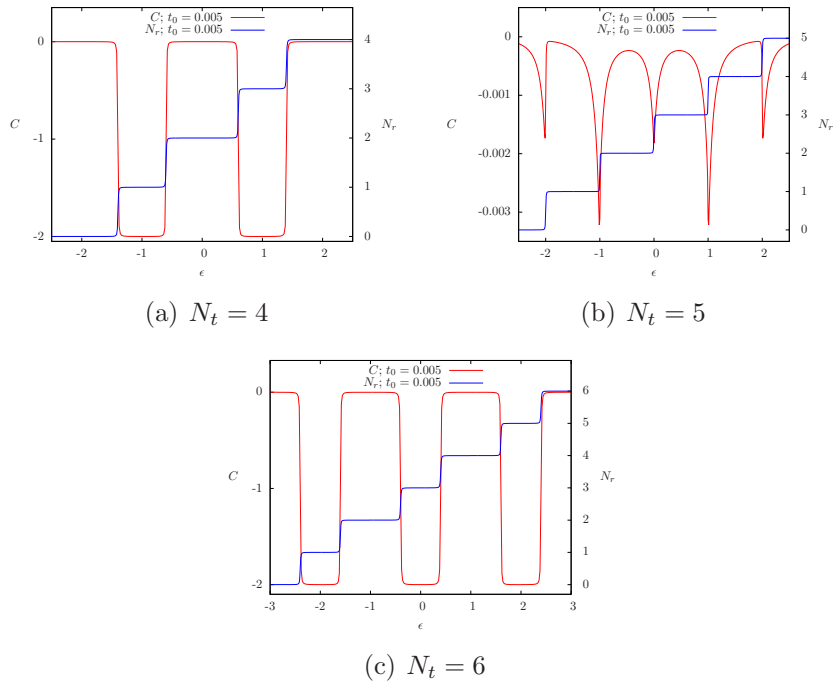


Fig. 3.9: Correlação (C) e número médio de partículas no lado direito (N_r) para diferentes valores de N_t com $t = 0.005$ e $U_2 = 0.1$. Esses casos, são similares a situações com $N_t = 2, 3$; isto é, os pontos críticos delimitam as diferentes configurações de spin.

3.2.2 Região $U_2 < 0$

Para um sistema de dois bósons, a correlação de spins apresenta essencialmente o mesmo comportamento visto para $U_2 > 0$ na Fig. 3.7, exceto pela inversão do sinal de C , uma vez que as flutuações de dupla ocupação, agora, são favorecidas para configurações de máximo spin, o que é possível a partir de spins paralelos nos dois poços. Nas regiões em que um dos poços tem dupla ocupação a correlação continua sendo essencialmente nula porque o outro poço está vazio.

A fidelidade, para este caso, não apresentou modificações com a troca de sinal do parâmetro ligado a dependência no spin. Entretanto, é através da correlação que vemos significativa mudança no estado fundamental, uma vez que o último termo do hamiltoniano (2.1) favorece estados correspondentes a um spin local com módulo baixo, no caso $U_2 > 0$, ou alto, para $U_2 < 0$.

A Fig. 3.10 mostra os casos de 3 e 4 partículas, incluindo as curvas do caso $U_2 < 0$ para fins de comparação. As diferenças observadas (além do sinal das correlações) devem-se ao fato de que não existe aqui a formação de pares de spin nulo, pois os spins locais são maximizados, de forma que as correlações de spin são não nulas (e positivas) sempre que ambos os poços tenham ocupações médias não nulas.

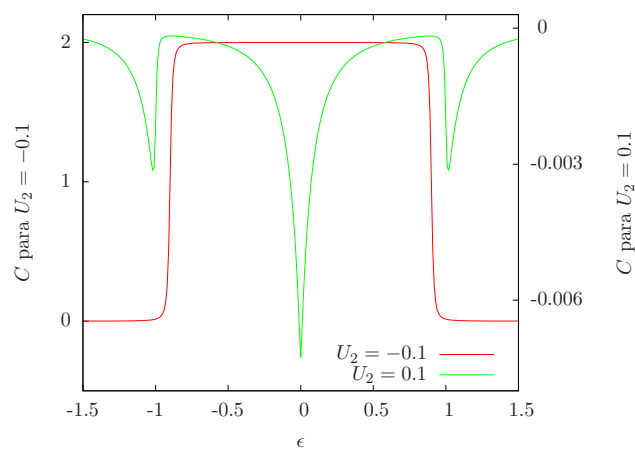
A redução a uma única transição para $U_2 < -1$ no sistema com três partículas, que observamos através da fidelidade (Fig. 3.6), também pode ser visualizada através da correlação de spins, como é mostrado na Fig. 3.11. O desaparecimento da correlação nessa região deve-se ao fato de que ocorre preferencialmente a concentração de todas as partículas em um único poço. Embora o spin do poço ocupado seja alto, o outro poço está vazio, levando a uma correlação nula.

3.3 “Fases” para $N_t = 2$

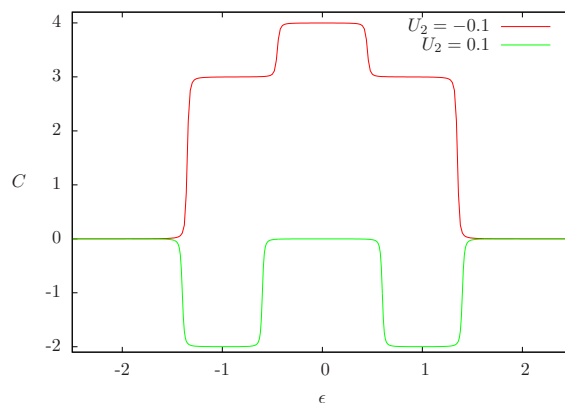
É interessante mostrar um panorama completo do caso $N_t = 2$, que apresenta uma certa riqueza situações.

A Fig. 3.12 apresenta as linhas de transição obtidas a partir da fidelidade em ϵ , isto é, usando o parâmetro de assimetria como referência para detectar mudanças significativas no estado fundamental. Essas linhas são definidas pelas posições dos mínimos da fidelidade no espaço (ϵ, U_2) .

A natureza dos estados nas diversas regiões é revelada pela ocupação média de cada poço, apresentada na Fig. 3.13, e pela correlação entre os spins totais dos poços esquerdo e direito,



(a) $N_t = 3$



(b) $N_t = 4$

Fig. 3.10: Correlação (C) e número médio de partículas no poço R para $N_t = 3$ (a) e 4 (b), com $t = 0.01$. As curvas vermelhas representam o caso $U_2 = -0.1$. Para comparação, incluímos as curvas correspondentes no caso $U_2 = 0.1$ (verdes). Note a diferença de escala das duas curvas para $N_t = 3$.

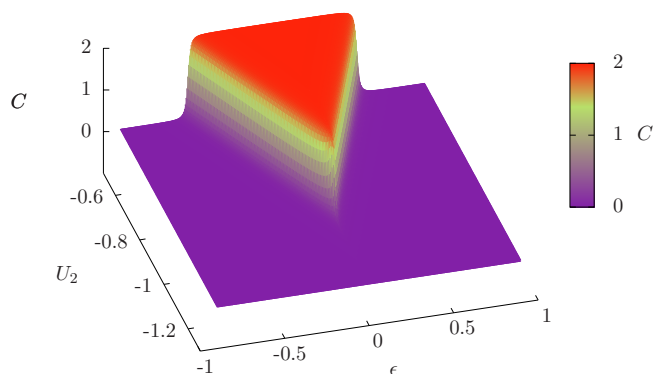


Fig. 3.11: Correlação (C) entre os spins dos dois poços em função do parâmetro de assimetria ϵ e da interação dependente de spin U_2 . A região de $C \approx 0$ corresponde a estados nos quais as três partículas se encontram, em média, no mesmo poço.

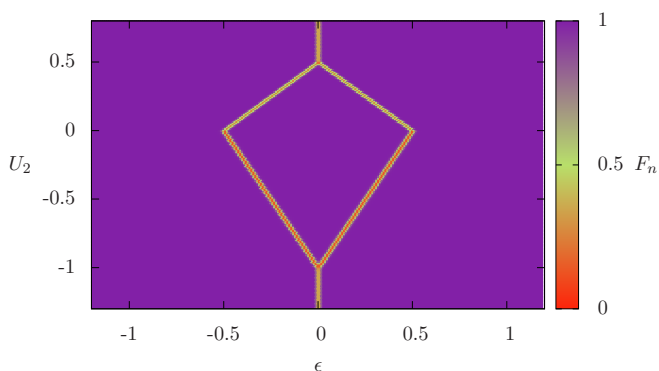


Fig. 3.12: Visão geral das transições observados para $N_t = 2$. As linhas de transição foram obtidas pelos mínimos da fidelidade relativa ao parâmetro ϵ .

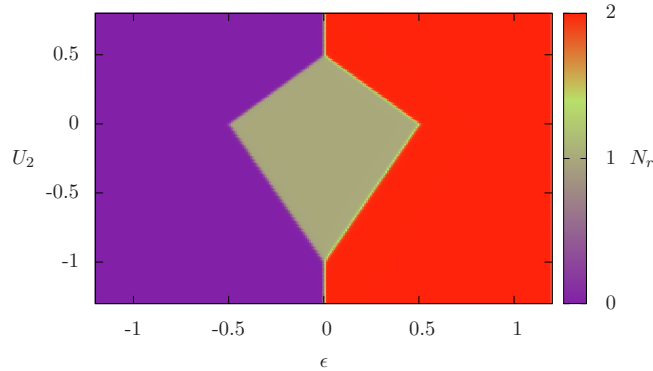


Fig. 3.13: *Regiões correspondentes a diferentes números médios de ocupação para $N_t = 2$. As regiões mais externas identificam dupla ocupação do poço correspondente (esquerdo ou direito), enquanto no interior do polígono central ambos os poços têm ocupação média de uma partícula.*

mostrada na Fig. 3.14. Fica claro que as linhas de mínimos da fidelidade delimitam as regiões de diferentes números médios de ocupação de cada poço: poço esquerdo duplamente ocupado e poço direito vazio na região externa com $\epsilon < 0$, poço direito duplamente ocupado e poço esquerdo vazio na região externa com $\epsilon > 0$, e poços igualmente ocupados na região central. A correlação de spins complementa esta informação, dividindo a região central em duas, com correlação negativa (“antiferromagnética”) na parte correspondente a $U_2 > 0$ e positiva (“ferromagnética”) para $U_2 < 0$.

Cabe perguntar por que a fidelidade não detecta a transição entre as duas partes da região central. Isso ocorre pela escolha de ϵ como o parâmetro de controle, pois a linha demarca uma mudança que ocorre pela variação do parâmetro U_2 . Nada impede que se calcule a fidelidade fazendo variar este último parâmetro, para ϵ fixo, isto é, varrendo o espaço (ϵ, U_2) em linhas verticais em vez de horizontais. O resultado é apresentado na Fig. 3.15. Pode-se observar que a linha horizontal em $U_2 = 0$ existe mesmo nas regiões laterais. Nessas regiões, temos um par de bósons em um dos poços enquanto o outro está vazio. A diferença é que o spin do par é nulo para $U_2 > 0$ e máximo (igual a 2) para $U_2 < 0$.

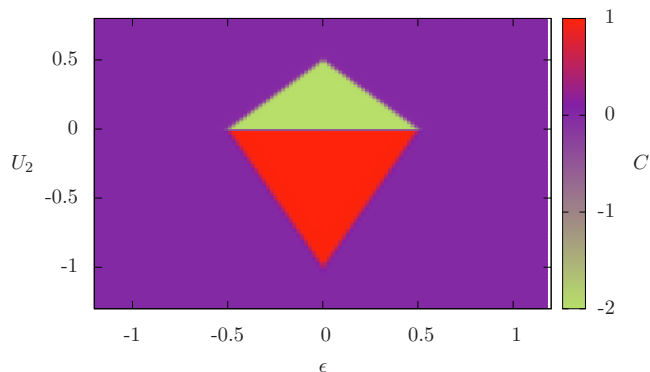


Fig. 3.14: *Correlação entre os spins dos dois poços para $N_t = 2$. A correlação é essencialmente nula nas duas regiões externas e não nula no interior do polígono central. Esta última região é dividida, com correlação negativa (spins opostos) na parte superior e positiva (spins paralelos) na inferior.*

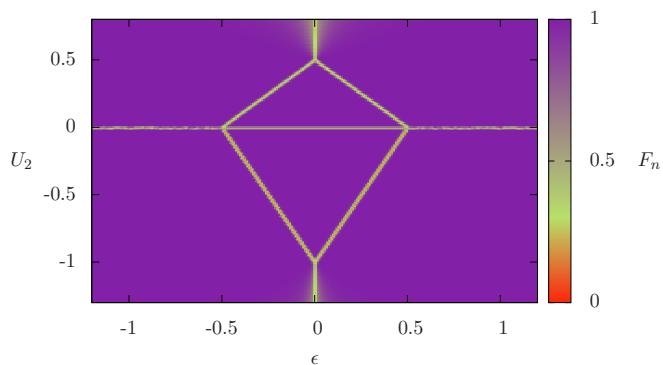


Fig. 3.15: *“Diagrama de fases” obtido através das linhas de mínimos da fidelidade usando U_2 como parâmetro de controle. Todas as regiões reveladas nas Figs. 3.12, 3.13 e 3.14 aparecem aqui, separadas por linhas de transição. Além disso, a separação entre as regiões externas com diferentes sinais de U_2 reflete o fato de que o par que ocupa um dos poços tem spin 0 (acima) ou 2 (abaixo).*

Capítulo 4

Conclusões

Neste trabalho, estudamos as características do estado fundamental de um sistema de bósons em um potencial de poço duplo. Tais sistemas servem de modelo para átomos frios em redes ópticas, para os quais podem ser controlados parâmetros como as profundidades dos poços, a amplitude de tunelamento entre eles e as interações entre as partículas. Focalizamos nossa análise em bósons de spin 1, com base no hamiltoniano de Bose-Hubbard usual, mas adicionando uma interação local dependente de spin, conforme proposto por Imambekov e colaboradores [34]. Dependendo do sinal da constante de acoplamento U_2 desse termo adicional, é favorecido um estado de alto ou baixo spin em um poço ocupado por mais de uma partícula.

Mesmo considerando diversos números totais de partículas, a restrição a dois poços permitiu diagonalizar exatamente a matriz do hamiltoniano nos subespaços relevantes e estudar as mudanças do estado fundamental induzidas por variações dos parâmetros do modelo. Nossa análise concentrou-se basicamente em um regime de tunelamento fraco em relação à interação repulsiva local (Hubbard), que foi mantida constante. Assim, os parâmetros variados foram a interação dependente de spin e a posição relativa dos níveis locais (considerando um único nível por poço), que pode ser vista como um parâmetro de assimetria entre os poços.

Mostramos que as mudanças de regime no sistema podem ser detectadas pelo cálculo da fidelidade entre estados fundamentais de dois sistemas idênticos exceto por uma diferença arbitrariamente pequena em um dos parâmetros do hamiltoniano. O comportamento da fidelidade, com mínimos muito localizados em valores críticos do parâmetro de controle, é similar ao que se observa em transições de fase quânticas em sistemas extensos, podendo-se considerar que as variações que observamos no sistema finito são precursoras de transições de fase quânticas se o tamanho do sistema for aumentado até o limite termodinâmico.

Embora a fidelidade detecte os parâmetros críticos para transições (mudanças significa-

tivas no estado fundamental), ela não permite visualizar a natureza dessas mudanças. Para obter essa informação, calculamos os valores médios do número de ocupação de um dos poços (o outro sendo automaticamente determinado pelo fato de se conhecer o número de partículas) e a correlação entre os spins totais dos dois poços.

Com isso, foi possível construir “diagramas de fases” em função dos parâmetros cujos valores foram variados. Por exemplo, para um número total de dois bósons, observamos fases de condensação das duas partículas em um mesmo poço para grandes diferenças entre os níveis de energia dos dois poços e/ou alto valor absoluto da interação dependente de spin, e fases com ocupação média de uma partícula por poço na região de baixa assimetria e baixo valor absoluto de U_2 . Neste último caso, observam-se correlações de spin positivas (“ferromagnéticas”) ou negativas (“antiferromagnéticas”) entre os spins dos dois poços dependendo do sinal do acoplamento U_2 . No regime de pares essa correlação é praticamente nula, pois um dos poços está essencialmente vazio, mas o par no poço ocupado pode ter spin total alto ou baixo (zero) também em função do sinal de U_2 .

Para números maiores de partículas estudamos apenas alguns exemplos específicos, pois as situações tendem a ser mais complexas, com características qualitativamente diferentes entre sistemas com número total de partículas ímpar e par.

Podemos concluir que os métodos escolhidos mostraram-se complementares na análise dos estados quânticos do modelo estudado. Vale ressaltar que alguns dos resultados que obtivemos através da fidelidade reproduzem os obtidos por Demler e colaboradores [22] utilizando cálculos de *emaranhamento* entre estados quânticos. Outros resultados, como os que obtivemos via correlação de spins e a análise de uma região mais ampla do espaço de parâmetros, são originais e serão submetidos a publicação oportunamente.

Considerando que o trabalho aqui apresentado restringiu-se a dois poços, uma extensão óbvia seria o aumento no número de poços. Como continuação natural desta dissertação, seria interessante fazer um estudo completo das transições no caso de três poços, a fim de mapear o espaço de fases e um possível comportamento do tipo transistor, generalizando o modelo apresentado em [39]. Outra possibilidade seria a investigação de uma possível transição do estado não correlacionado para o gás de Tonks-Girardeau no caso unidimensional [40, 41, 42], ambos com poucas partículas de spin 1. Além disso, o aumento do número de poços, embora seja necessário ter em conta as restrições práticas da diagonalização exata em sistemas com um grande número de estados, pode nos aproximar, através de variações das profundidades relativas dos poços, do problema da localização de Anderson [43], mas com partículas de spin 1 e, possivelmente, incluindo efeitos de interação dependente de spin.

Apêndice

Mudança de base

Neste apêndice, apresentamos em detalhe a transformação de base utilizada no Cap. 2, expressando os vetores do tipo (2.10) em termos de estados do tipo (2.12), para os quais a aplicação dos operadores criação e aniquilação de partículas pode ser feita diretamente.

O termo de tunelamento do hamiltoniano (2.1) já está explicitamente escrita em termos desses operadores, podendo-se dizer que o mesmo acontece com os termos em ϵ e U_0 , que dependem dos operadores número de ocupação. Precisamos, então, reescrever os operadores de spin, através das relações

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_L &= \sum_{\sigma\sigma'} L_\sigma^\dagger \mathbf{T}_{\sigma\sigma'} L_{\sigma'}, \\ \mathbf{S}_R &= \sum_{\sigma\sigma'} R_\sigma^\dagger \mathbf{T}_{\sigma\sigma'} R_{\sigma'},\end{aligned}\tag{A.1}$$

onde aparecem as matrizes de spin 1

$$T_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.\tag{A.2}$$

Podemos ainda utilizar as combinações $T_\pm = T_x \pm iT_y$, que assumem as formas

$$T_+ = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_- = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.\tag{A.3}$$

A partir da Eq. (A.1) e usando as matrizes (A.2), podemos escrever as componentes do operador de spin \mathbf{S}_L

$$\mathbf{S}_L^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(L_1^\dagger L_0 + L_{-1}^\dagger L_0 + L_0^\dagger L_1 + L_0^\dagger L_{-1} \right), \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{S}_L^y = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-L_1^\dagger L_0 + L_{-1}^\dagger L_0 + L_0^\dagger L_1 - L_0^\dagger L_{-1} \right), \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{S}_L^z = L_1^\dagger L_1 - L_{-1}^\dagger L_{-1}, \quad (\text{A.6})$$

e ainda

$$\mathbf{S}_L^+ = \sqrt{2} \left(L_1^\dagger L_0 + L_0^\dagger L_{-1} \right), \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{S}_L^- = \sqrt{2} \left(L_{-1}^\dagger L_0 + L_0^\dagger L_1 \right), \quad (\text{A.8})$$

com relações análogas para as componentes de \mathbf{S}_R .

Desta forma, podemos construir as matrizes de \mathbf{S}_L^2 na representação cujos vetores da base são $|N_L^0, N_L^1, N_L^{-1}\rangle$. Diagonalizando essas matrizes, encontramos os valores de s_L e s_L^z , e os respectivos autovetores, que denotaremos $B_L(N_L, s_L, s_L^z)$.

Para o caso em que $N_L = 0$ há um único possível estado, $|0, 0, 0\rangle$. Sendo assim, o único autovetor é apresentado na tabela (A.1).

Tab. A.1: Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 0$

s_L	s_L^z	Estado $B_L(N_L, s_L, s_L^z)$
0	0	$B_L(0, 0, 0) = 0, 0, 0\rangle$

Para o caso em que $N_L = 1$, a base tem três componentes,

$$|1, 0, 0\rangle, |0, 1, 0\rangle, |0, 0, 1\rangle; \quad (\text{A.9})$$

resultando na matriz cujos autovetores estão na tabela (A.2).

Quando $N_L = 2$, a base tem seis vetores,

$$|2, 0, 0\rangle, |1, 1, 0\rangle, |0, 2, 0\rangle, |0, 1, 1\rangle, |0, 0, 2\rangle, |1, 0, 1\rangle, \quad (\text{A.10})$$

e a diagonalização de \mathbf{S}_L^2 fornece os autovetores presentes na tabela (A.3).

Tab. A.2: Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 1$

s_L	s_{Lz}	Estado $B_L(N_L, s_L, s_{Lz})$
1	1	$B_L(1, 1, 1) = 0, 1, 0\rangle$
1	0	$B_L(1, 1, 0) = 1, 0, 0\rangle$
1	-1	$B_L(1, 1, -1) = 0, 0, 1\rangle$

Tab. A.3: Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 2$

s_L	s_{Lz}	Estado $B_L(N_L, s_L, s_{Lz})$
2	2	$B_L(2, 2, 2) = 0, 2, 0\rangle$
2	1	$B_L(2, 2, 1) = 1, 1, 0\rangle$
2	0	$B_L(2, 2, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} 0, 1, 1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} 2, 0, 0\rangle$
2	-1	$B_L(2, 2, -1) = 1, 0, 1\rangle$
2	-2	$B_L(2, 2, -2) = 0, 0, 2\rangle$
0	0	$B_L(2, 0, 0) = \sqrt{\frac{2}{3}} 0, 1, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} 2, 0, 0\rangle$

No último caso que apresentaremos aqui, $N_L = 3$, a base tem dez componentes,

$$|3, 0, 0\rangle, |2, 1, 0\rangle, |1, 2, 0\rangle, |0, 3, 0\rangle, |0, 2, 1\rangle, \quad (\text{A.11})$$

$$|0, 1, 2\rangle, |0, 0, 3\rangle, |1, 0, 2\rangle, |2, 0, 1\rangle, |1, 1, 1\rangle; \quad (\text{A.12})$$

resultando nas configurações apresentadas na tabela (A.4).

Para maiores números de partículas o processo é o mesmo. Vale ressaltar que os autovetores de \mathbf{S}_R^2 são idênticos aos apresentados nas tabelas frente a troca $L \rightarrow R$.

Uma vez que apresentamos os autoestados de \mathbf{S}_L^2 e \mathbf{S}_R^2 , podemos definir a transformação (Γ) que expande componentes da base $|\{N_L, N_R\}, \{s_L, s_R\}, s_t\rangle$ em termos dos vetores que descreve o número de partículas em cada projeção possível, $|N_L^0, N_L^1, N_L^{-1}; N_R^0, N_R^1, N_R^{-1}\rangle$, da seguinte forma:

$$\Gamma(|\{N_L, N_R\}, \{s_L, s_R\}, s_t\rangle, s_{tz}) = \sum_{i=-s_L}^{s_L} \sum_{j=-s_R}^{s_R} C_{s_L, i; s_R, j}^{s_t, s_{tz}} B_L(N_L, s_L, i) \otimes B_R(N_R, s_R, j). \quad (\text{A.13})$$

Tab. A.4: Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 3$

s_L	s_{Lz}	Estado $B_L(N_L, s_L, s_{Lz})$
3	3	$B_L(3, 3, 3) = 0, 3, 0\rangle$
3	2	$B_L(3, 3, 2) = 1, 2, 0\rangle$
3	1	$B_L(3, 3, 1) = \frac{1}{\sqrt{5}} 0, 2, 1\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}} 2, 1, 0\rangle$
3	0	$B_L(3, 3, 0) = \sqrt{\frac{3}{5}} 1, 1, 1\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} 3, 0, 0\rangle$
3	-1	$B_L(3, 3, -1) = \frac{1}{\sqrt{5}} 0, 1, 2\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}} 2, 0, 1\rangle$
3	-2	$B_L(3, 3, -2) = 1, 0, 2\rangle$
3	-3	$B_L(3, 3, -3) = 0, 0, 3\rangle$
1	1	$B_L(3, 1, 1) = \frac{2}{\sqrt{5}} 0, 2, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{5}} 2, 1, 0\rangle$
1	0	$B_L(3, 1, 0) = \sqrt{\frac{2}{5}} 1, 1, 1\rangle - \sqrt{\frac{3}{5}} 3, 0, 0\rangle$
1	-1	$B_L(3, 1, -1) = \frac{2}{\sqrt{5}} 0, 1, 2\rangle - \frac{1}{\sqrt{5}} 2, 0, 1\rangle$

Onde $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M}$ são os coeficientes de Clebsch–Gordan¹ e “ \otimes ” o produto de Kronecker. Para exemplificar usaremos um caso de $N_t = 2$ descrito pelo estado $|E_2\rangle = \{|1, 1\rangle, \{1, 1\}, 0\rangle$, ou seja,

$$\begin{aligned}
\Gamma(|E_2\rangle, 0) &= \sum_{i=-1}^1 \sum_{j=-1}^1 C_{1, i; 1, j}^{0, 0} B_L(1, 1, i) \otimes B_R(1, 1, j) = \\
&= C_{1, -1; 1, 1}^{0, 0} B_L(1, 1, -1) \otimes B_R(1, 1, 1) + C_{1, 0; 1, 0}^{0, 0} B_L(1, 1, 0) \otimes B_R(1, 1, 0) \\
&+ C_{1, 1; 1, -1}^{0, 0} B_L(1, 1, 1) \otimes B_R(1, 1, -1) \tag{A.14}
\end{aligned}$$

Existem tabelas de Clebsch–Gordan na maioria dos livros-texto de Mecânica Quântica. De tais tabelas sabemos que $C_{1, -1; 1, 1}^{0, 0} = C_{1, 1; 1, -1}^{0, 0} = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $C_{1, 0; 1, 0}^{0, 0} = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ e obtendo os estados $B_L(1, 1, i)$ e $B_R(1, 1, j)$ da tabela A.2. Temos que

$$\Gamma(|E_2\rangle, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 1, 0; 0, 0, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, , 0; 1, 0, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 0, 1; 0, 1, 0\rangle. \tag{A.15}$$

Embora os cálculos para $N_t = 2$ não sejam muito complexos, encontrar todos os elementos e os respectivos autovalores e autovetores nos casos em que $N_t \geq 3$ é um trabalho de grandes

¹ Os coeficientes $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M}$ não existentes são considerados nulos.

proporções sem a ajuda de métodos computacionais. Sendo assim, escolhemos o programa *Wolfram Mathematica* ©, que juntamente com o pacote “Quantum Notation”, permite a utilização da notação de Dirac e implementação dos operadores. O algoritmo para obter os resultados segue a mesma lógica que apresentamos aqui, aumentando o número de partículas e conseqüentemente o número de estados da base conforme necessário.

Referências Bibliográficas

- [1] Albert Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse, Berlin*, 22:261–267, 1924.
- [2] Albert Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. *Zweite Abhandlung Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse, Berlin*, 1:3–14, 1925.
- [3] Satiendra Nath Bose. Gesetz und lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik, Berlin*, 26:171–181, 1924.
- [4] Wolfgang Ketterle. Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. *Rev. Mod. Phys.*, 74:1131–1151, Nov 2002.
- [5] E. A. Cornell and C. E. Wieman. Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. *Rev. Mod. Phys.*, 74:875–893, Aug 2002.
- [6] James R. Anglin and Wolfgang Ketterle. Bose-Einstein condensation of atomic gases. *Nature*, 416(6877):211–218, Mar 2002.
- [7] E. A. Cornell. Very cold indeed: the nanokelvin physics of Bose-Einstein condensation. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology, Washington*, 101(4):419–434, July, Aug 1996.
- [8] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1687–1690, Aug 1995.

- [9] R. Gati, M. Albiez, J. Fölling, B. Hemmerling, and M.K. Oberthaler. Realization of a single Josephson junction for Bose–Einstein condensates. *Applied Physics B*, 82(2):207–210, 2006.
- [10] FS Cataliotti, S Burger, C Fort, P Maddaloni, F Minardi, A Trombettoni, A Smerzi, and M Inguscio. Josephson junction arrays with Bose-Einstein condensates. *Science*, 293(5531):843–846, AUG 3 2001.
- [11] Michael Albiez, Rudolf Gati, Jonas Fölling, Stefan Hunsmann, Matteo Cristiani, and Markus K. Oberthaler. Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction. *Phys. Rev. Lett.*, 95:010402, Jun 2005.
- [12] J. Links, H.-Q. Zhou, R. H. McKenzie, and M. D. Gould. TOPICAL REVIEW: Algebraic Bethe ansatz method for the exact calculation of energy spectra and form factors: applications to models of Bose-Einstein condensates and metallic nanograins. *Journal of Physics A Mathematical General*, 36:63, May 2003.
- [13] J. Estève, C. Gross, A. Weller, S. Giovanazzi, and M. K. Oberthaler. Squeezing and entanglement in a Bose-Einstein condensate. *Nature*, 455:1216–1219, October 2008.
- [14] Q. Y. He, M. D. Reid, T. G. Vaughan, C. Gross, M. Oberthaler, and P. D. Drummond. Einstein-Podolsky-Rosen Entanglement Strategies in Two-Well Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 106:120405, Mar 2011.
- [15] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. *Nature*, 392(6672):151–154, Mar 1998.
- [16] Peter Zoller. Bose-Einstein condensation: Making it with molecules. *Nature*, 417(6888):493–494, May 2002.
- [17] Elizabeth A. Donley, Neil R. Claussen, Sarah T. Thompson, and Carl E. Wieman. Atom-molecule coherence in a Bose-Einstein condensate. *Nature*, 417(6888):529–533, May 2002.
- [18] Jens Herbig, Tobias Kraemer, Michael Mark, Tino Weber, Cheng Chin, Hanns-Christoph Nägerl, and Rudolf Grimm. Preparation of a pure molecular quantum gas. *Science*, 301(5639):1510–1513, 2003.

- [19] S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, S. Riedl, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm. Bose-Einstein Condensation of Molecules. *Science*, 302(5653):2101–2103, 2003.
- [20] J. Rogel-Salazar. The Gross-Pitaevskii equation and Bose-Einstein condensates. *European Journal of Physics*, 34:247, March 2013.
- [21] M. Mackie, K.-A. Suominen, and J. Javanainen. Mean-Field Theory of Feshbach-Resonant Interactions in ^{85}Rb Condensates. *Physical Review Letters*, 89(18):180403, October 2002.
- [22] A. Wagner, C. Bruder, and E. Demler. Spin-1 atoms in optical superlattices: Single-atom tunneling and entanglement. *Physical Review A*, 84(6):063636, December 2011.
- [23] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80:885–964, Jul 2008.
- [24] F. Gerbier, S. Trotzky, S. Fölling, U. Schnorrberger, J. D. Thompson, A. Widera, I. Bloch, L. Pollet, M. Troyer, B. Capogrosso-Sansone, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov. Expansion of a quantum gas released from an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 101:155303, Oct 2008.
- [25] P. Pedri, L. Pitaevskii, S. Stringari, C. Fort, S. Burger, F. S. Cataliotti, P. Maddaloni, F. Minardi, and M. Inguscio. Expansion of a Coherent Array of Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 87:220401, Nov 2001.
- [26] Jacob F. Sherson, Christof Weitenberg, Manuel Endres, Marc Cheneau, Immanuel Bloch, and Stefan Kuhr. Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator. *Nature*, 467(7311):68–72, Sep 2010.
- [27] D. Jaksch, V. Venturi, J. I. Cirac, C. J. Williams, and P. Zoller. Creation of a Molecular Condensate by Dynamically Melting a Mott Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 89:040402, Jul 2002.
- [28] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Hansch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, Jan 2002.
- [29] Tin-Lun Ho. Spinor Bose Condensates in Optical Traps. *Phys. Rev. Lett.*, 81:742–745, Jul 1998.

- [30] Tetsuo Ohmi and Kazushige Machida. Bose-Einstein Condensation with Internal Degrees of Freedom in Alkali Atom Gases. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67(6):1822–1825, 1998.
- [31] Tin-Lun Ho and Sung Kit Yip. Fragmented and Single Condensate Ground States of Spin-1 Bose Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 84:4031–4034, May 2000.
- [32] C. K. Law, H. Pu, and N. P. Bigelow. Quantum Spins Mixing in Spinor Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 81:5257–5261, Dec 1998.
- [33] Usama Al Khawaja and Henk Stoof. Skyrmions in a ferromagnetic Bose-Einstein condensate. *Nature*, 411(6840):918–920, Jun 2001.
- [34] Adilet Imambekov, Mikhail Lukin, and Eugene Demler. Spin-exchange interactions of spin-one bosons in optical lattices: Singlet, nematic, and dimerized phases. *Phys. Rev. A*, 68:063602, Dec 2003.
- [35] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011.
- [36] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature*, 416:608–610, April 2002.
- [37] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar. Continuous quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 69:315–333, Jan 1997.
- [38] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information (Cambridge Series on Information and the Natural Sciences)*. Cambridge University Press, January 2004.
- [39] James A. Stickney, Dana Z. Anderson, and Alex A. Zozulya. Transistorlike behavior of a Bose-Einstein condensate in a triple-well potential. *Phys. Rev. A*, 75:013608, Jan 2007.
- [40] Budhaditya Chatterjee, Ioannis Brouzos, Lushuai Cao, and Peter Schmelcher. Ultracold dipolar few-boson ensembles in a triple-well trap. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 46(8):085304, 2013.
- [41] I. Brouzos, S. Zöllner, and P. Schmelcher. Correlation versus commensurability effects for finite bosonic systems in one-dimensional lattices. *Phys. Rev. A*, 81(5):053613, May 2010.

-
- [42] Lushuai Cao, Ioannis Brouzos, Sascha Zöllner, and Peter Schmelcher. Interaction-driven interband tunneling of bosons in the triple well. *New Journal of Physics*, 13(3):033032, 2011.
- [43] J. C. C. Cestari, A. Foerster, and M. A. Gusmão. Finite-size effects in Anderson localization of one-dimensional Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 82:063634, Dec 2010.