

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE FÍSICA *Gleb Wataghin*

Transições de Fases Quânticas em Sistemas Bosônicos Fortemente Correlacionados

Jesús María Herazo Warnes

E-mail: jherazow@ifi.unicamp.br

Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado defendida pelo aluno Jesús María Herazo Warnes e aprovada pela Banca Examinadora.



Orientador: Prof. Dr. Eduardo Miranda

E-mail: emiranda@ifi.unicamp.br

Departamento de Física da Matéria Condensada

Campinas, 02 de setembro de 2011

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR
VALKÍRIA SUCCI VICENTE – CRB8/5398 - BIBLIOTECA DO IFGW
UNICAMP**

H413t Herazo Warnes, Jesús Maria, 1982-
Transições de fases quânticas em sistemas
bosônicos fortemente correlacionados / Jesús Maria
Herazo Warnes. -- Campinas, SP : [s.n.], 2011.

Orientador: Eduardo Miranda.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de
Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.

1. Transições de fase quânticas. 2. Redes de bósons
fortemente correlacionados. 3. Sistemas desordenados.
4. Bose-Hubbard, Modelo de. 5. Modelo de impureza
única de Anderson bosônico. I. Miranda, Eduardo.
II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física
“Gleb Wataghin”. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Quantum phase transitions in strongly correlated bosonic systems

Palavras-chave em inglês:

Quantum phase transitions

Strongly correlated lattice bosons

Disordered systems

Bose-Hubbard model

Bosonic single-impurity Anderson model

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Titulação: Doutor em Ciências

Banca Examinadora:

Eduardo Miranda [Orientador]

Silvio Antonio Sachetto Vitiello

Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Klaus Werner Capelle

Arnoldo Gammal

Data da Defesa: 02-09-2011

Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE JESÚS MARÍA HERAZO WARNES – RA 069811, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN” DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 02/09/2011.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Eduardo Miranda – DFMC/IFGW/UNICAMP
(Orientador do Candidato)

Prof. Dr. Silvio Antonio Sachetto Vitiello – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Klaus Werner Capelle – IF/UFABC

Prof. Dr. Arnaldo Gammal – IF/USP

Agradecimentos

Foram muito as pessoas que, de uma forma ou outra, tiveram significativa contribuição neste trabalho!

A Deus, que vejo refletido no amor de minha família. A motivação deles sempre é o meu sustento em meio as adversidades da vida.

Ao professor Eduardo, pela supervisão da tese. Suas idéias, cálculos e discussões foram determinantes no desenvolvimento do trabalho.

À Martha, pelas dicas em Fortran, indispensáveis na elaboração dos códigos numéricos. Além da sua companhia e incentivo constante durante o doutorado.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro.

Ao meu camarada Bruno, pela cuidadosa e crítica revisão do português da primeira versão da tese. Também contribuíram nesta primeira revisão Wyll e o Clóvis. A todos muito obrigado!

Aos meus colegas de grupo, Daniel, Éric e a Martha, pelas reuniões e discussões entorno aos projetos de pesquisa.

Aos professores Silvio A. Vitiello e Marcos C. de Oliveira, pela participação na banca dos seminários: exame de qualificação e pré-requisito de defesa de tese.

Ao Samir, meu parceiro e colega da sala 37. Comigo compartilhou muitos momentos bons e, com a mesma intensidade também as situações difíceis. Quando tudo parecia dar errado nesta luta de pesquisas, sempre encontrava uma mão amiga na sala 37. Muito obrigado Samir!

Ao João Paulo, pela amizade sincera. Foram muitos almoços enriquecidos e diversas conversas interessantes.

Ao meu amigo Wyll. Em todos os nossos cafezinhos de tarde, aprendi cada vez mais a olhar o lado bom em meio de situações difíceis. Valeu amigo!

Aos meus colegas Humberto, Karl e o Felype, pelo suporte técnico. Graças a eles meu compu-

tador (Ares) sempre esteve preparado para as árduas jornadas de trabalho.

Ao meu amigo Alexis, pelo apoio nesta última etapa do doutorado e colaboração com o formato em latex da tese. Obrigado Alexis!

Aos professores, Guillermo Cabrera, Karen Fonseca, Maurice de Koning, Marco Aurélio, Amir Caldeira e Eduardo Miranda, deles recebi as melhores aulas. Foram essenciais para minha formação acadêmica e profissional.

À senhora Dora e filhos, pelo recebimento caloroso em Bogotá, compartilhamos momentos muito agradáveis.

A todos os jogadores do Jacarezão. Com muito anelo eu esperava todas as sextas-feiras de futebol “arte”. O perfeito respiro no fim de uma jornada difícil de trabalho.

Com absoluta certeza existem mais pessoas a agradecer. Ressalto meus caros amigos: Luis, Zenner, Emanuel, Bartira, Lenilson, Olimpio, Daniela, Maria del Carmen,... Todos tiveram uma valiosa contribuição nesta etapa da minha vida.

A todos muchísimas gracias..!

Resumo

A questão da natureza das transições de fases de sistemas de redes de bósons tem se tornado cada vez mais urgente à vista da capacidade de carregamento de átomos ultrafrios em redes ópticas. Nesta tese, tentamos avançar este conhecimento através do estudo de 3 modelos básicos de redes de bósons interagentes.

Inicialmente, determinamos o diagrama de fases e as propriedades físicas do modelo bosônico de impureza única de Anderson. Este modelo é interessante tanto em si mesmo quanto por causa de sua relação com outras abordagens teóricas tais como a teoria dinâmica de campo médio bosônica. Usamos como estratégia a inclusão de um pequeno campo externo acoplado ao parâmetro de ordem superfluido, que quebra a simetria global de calibre do modelo. Desta forma, foi possível estudar a transição de condensação de Bose-Einstein através do critério de quebra espontânea de simetria global de calibre. Outras quantidades como a ocupação da impureza, o desvio padrão da ocupação e a susceptibilidade com respeito ao campo externo também foram calculadas, caracterizando a transição de fase do modelo. Alguns desses resultados foram comparados com aqueles já obtidos na literatura através do grupo de renormalização numérico. Encontramos bom acordo entre os dois métodos.

O segundo estudo realizado nesta tese refere-se ao comportamento crítico do modelo de Bose-Hubbard desordenado através da chamada teoria de campo médio estocástica. O objeto central dessa teoria de campo médio é a distribuição de parâmetros de ordem $P(\psi)$. Estudos numéricos estabelecem que perto da linha crítica que separa as fases superfluida e vidro de Bose do modelo, essa distribuição exhibe uma grande região com comportamento de lei de potência $P(\psi) \sim \psi^{-(1+\beta_c)}$, onde $\beta_c < 1$. Usando esse comportamento como tentativa, obtivemos analiticamente tanto a fronteira de fases quanto o valor do expoente crítico da lei de potência β_c , encontrando um razoável acordo com os resultados numéricos e avançando o entendimento

da natureza da transição de fase específica ao modelo desordenado.

Finalmente, o modelo de Bose-Hubbard desordenado para partículas de *spin*-1 foi estudado dentro da teoria de campo médio estocástica. As distribuições de probabilidade de várias quantidades físicas como o parâmetro de ordem superfluido, o desvio padrão da ocupação por sítio, a fração do condensado, o quadrado do operador de *spin*, bem como seus valores médios, foram determinados para as três fases do modelo, a saber, o superfluido polar, o isolante de Mott e o vidro de Bose. Uma completa caracterização das propriedades físicas dessas fases e das transições de fase entre elas foi estabelecida.

Abstract

The question of the nature of phase transitions of systems of lattice bosons has become increasingly more pressing in view of the capability of loading ultracold atoms in optical lattices. In this thesis we try to advance this understanding through the study of 3 basic models of interacting lattice bosons.

Initially, we determined the phase diagram and physical properties of the bosonic single-impurity Anderson model. This model is interesting both in its own right and because of its relation to other theoretical approaches such as the bosonic dynamical field theory method. We used as strategy the inclusion of a small external field coupled to the superfluid order parameter, which breaks the global gauge symmetry of the model. Thus, it was possible to study the Bose-Einstein condensation transition through the criterion of the onset of spontaneous broken global gauge symmetry. Other quantities such as the occupation of the impurity, the standard deviation of the occupation and the susceptibility with respect to the external field were calculated characterizing the phase transition in the model. Some of the results were compared with those already reported in the literature, obtained with the numerical renormalization group. We found good agreement between the two methods.

The second study carried out in this thesis concerned the critical behavior of the disordered Bose-Hubbard model within the so-called stochastic mean-field theory. The central object of this mean-field theory is the distribution of order parameters $P(\psi)$. Numerical studies establish that near the critical line separating the superfluid and Bose glass phases of this model, this distribution shows a wide region of power-law behavior $P(\psi) \sim \psi^{-(1+\beta_c)}$, where $\beta_c < 1$. Using this behavior as an Ansatz, we obtained analytically both the phase boundary and the value of the critical power-law exponent β_c , finding a reasonably good agreement with the numerical results and thus shedding new light on the nature of this phase transition specific to disordered

model.

Finally, the disordered Bose-Hubbard model for spin-1 particles was studied within the stochastic mean-field theory. The probability distributions of various physical quantities, such as the superfluid order parameter, the standard deviation of the occupation per site, the condensate fraction, the square of the spin operator, as well as their average values, were determined for the three phases of the model, namely, the polar superfluid, the Mott insulating and the Bose glass phases. A complete characterization of the physical properties of these phases and the phase transitions between them was then established.

Sumário

Lista de Abreviaturas	xiii
1 Introdução: Transição de Fase Superfluido-Isolante de Mott	1
1.1 Modelo de Bose-Hubbard	2
1.1.1 Limites do modelo de Bose-Hubbard	5
1.2 Evidência experimental da transição superfluido-isolante de Mott	7
1.3 Aproximação de Bogoliubov: limites de interações fracas	8
1.3.1 Método de Bogoliubov	10
1.3.2 Densidade do condensado	16
1.4 Teoria de campo médio estática	18
1.4.1 Diagrama de fases em teoria de campo médio estática	19
1.4.2 Parâmetro de ordem e ocupação	20
1.5 Diagrama de fases determinado por Monte Carlo quântico	21
1.6 Esquema geral	22
2 Fases Quânticas no Modelo de Impureza Única de Anderson	25
2.1 Introdução	25
2.2 Hamiltoniano do Modelo	27
2.3 Limite não interagente: $U = 0$	31
2.4 Resultados para o B-SIAM usando o NRG	34
2.5 Quebra espontânea de simetria	36
2.5.1 Analogia com o ferromagneto de Ising	37
2.6 O método de diagonalização exata	39

2.6.1	Parâmetro superfluido	40
2.7	Diagrama de fases	41
2.7.1	Susceptibilidade	42
2.7.2	Outros observáveis	43
2.8	Limitações do método	45
2.9	Conclusões	46
3	Efeitos de Desordem na Transição Superfluido-Isolante de Mott	48
3.1	Introdução	48
3.2	Hamiltoniano do modelo	50
3.3	Teoria Estocástica de Campo Médio	51
3.3.1	Algoritmo de solução da <i>SMFT</i>	53
3.3.2	Fases no DBHM	55
3.4	Solução perto do ponto crítico	56
3.4.1	Comportamento de $P(\psi)$ na região crítica	56
3.4.2	Equação de auto-consistência	58
3.4.3	Distribuição uniforme de desordem	61
3.5	Diagrama de fases	62
3.6	Conclusões	63
4	Modelo de Bose-Hubbard Desordenado com Spin-1: Tratamento mediante Teoria Estocástica de Campo Médio	66
4.1	Introdução	66
4.2	Hamiltoniano do Modelo	68
4.2.1	Propriedades magnéticas da fase superfluido	70
4.2.2	Aproximação de campo médio	72
4.3	Diagrama de fases: caso homogêneo	73
4.4	Efeitos da desordem: estudo mediante <i>SMFT</i>	76
4.4.1	Parâmetro superfluido	77

4.4.2	Compressibilidade	79
4.4.3	Fração do condensado	81
4.4.4	Desvio padrão da ocupação	83
4.4.5	Spin	85
4.5	Variando a desordem	87
4.6	Conclusões	87
5	Considerações Finais	90
A	Função de Green não interagente	93
A.1	Equações de movimento	98
B	BEC no B-SIAM	101
C	Transformação canônica	105
	Referências Bibliográficas	110

Lista de Abreviaturas

B-SIAM Modelo de impureza única de Anderson bosônica (*Bosonic single-impurity Anderson model*)

NRG Grupo de renormalização numérico (*Numerical renormalization group*)

BHM Modelo de Bose-Hubbard (*Bose-Hubbard model*)

SMFT Teoria estocástica de campo médio (*Stochastic mean-field theory*)

BEC Condensado de Bose-Einstein (*Bose-Einstein condensate*)

DBHM Modelo de Bose-Hubbard desordenado (*Disordered Bose-Hubbard model*)

BG vidro de Bose (Bose glass)

1

Introdução: Transição de Fase Superfluido-Isolante de Mott

Em uma mistura entre a física estatística e atômica nasceu a física de gases quânticos ultra-frios, onde o evento mais marcante foi a obtenção de condensados de Bose-Einstein (*BEC's*) [1–3]. O estudo dos gases atômicos ultra-frios iniciou-se com armadilhas ópticas ou magnéticas e atualmente conta com as chamadas redes ópticas [4], onde fatores como a intensidade das interações atômicas, a geometria da rede e o valor do *spin* dos átomos tem um alto grau de controle nos experimentos. Entre estes experimentos podem ser citados a interferência de dois condensados [5], coerência de fase de longo alcance [6], quantização e redes de vórtices [7–9], e condensados de moléculas com pares ligados de férmions [10–12]. Efeitos tais como correlações e interações são determinantes no estudo deste tipo de experimentos. No regime de fortes correlações foi provado que *BEC's* em uma rede óptica apresentam a transição de fase superfluido-isolante de Mott [13].

O modelo de Bose-Hubbard apresenta-se como o sistema mais simples onde esta transição de fases pode ser entendida em termos da competição entre energia cinética e interação entre os átomos [14–16]. O estado superfluido é presente quando as interações interatômicas são negligenciadas em relação aos processos de tunelamento (energia cinética) no modelo, obtendo-se assim uma ocupação macroscópica do estado de energia mais baixo no espaço dos momentos, com propriedades de coerência de fase. Por outro lado, o estado isolante de Mott é obtido no limite inverso, quando os processos de interação dominam em relação à energia cinética, dando origem à localização das partículas em cada sítio da rede e incoerência na fase.

Há ainda outro sistema, denominado modelo de impureza única de Anderson, que na sua

versão bosônica [17–20] apresenta também uma transição de fases com características similares à transição superfluido-isolante de Mott.

A adição de novos ingredientes nestes modelos, tais como desordem e *spin* não nulo, dão origem a interessantes fenômenos altamente não triviais, os quais constituem grande parte do objetivo central do presente trabalho.

1.1 Modelo de Bose-Hubbard

No formalismo de segunda quantização, o hamiltoniano para um sistema de átomos bosônicos interagentes aprisionados em uma combinação de um potencial óptico $V_{op}(\mathbf{r})$ e um potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$ é dado por:

$$H = \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{op}(\mathbf{x}) + V_{ext}(\mathbf{x}) \right) \Psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}), \quad (1.1)$$

onde $\Psi(\mathbf{x})$ e $\Psi^\dagger(\mathbf{x})$ são os operadores de campo que criam e aniquilam um átomo na posição \mathbf{x} , respectivamente. O potencial de interação entre os átomos é $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ e o potencial de confinamento da rede óptica $V_{op}(\mathbf{x})$ é criado experimentalmente pela sobreposição de dois ou mais lasers contra-propagantes que criam um padrão de onda estacionário que é utilizado para aprisionamento dos átomos (ver Fig. 1.1).

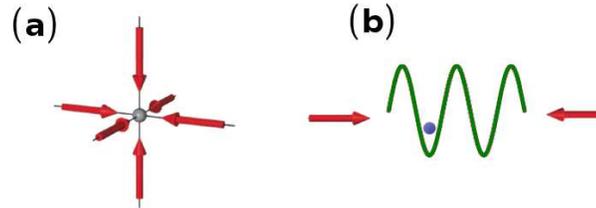


Figura 1.1 (a) Rede óptica criada pela sobreposição de um sistema de lasers contra-propagantes. (b) Padrão de onda estacionária que confina os átomos na rede óptica [13].

Os operadores de campo podem ser expandidos na base das funções de Wannier $w_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$,

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{i\alpha} a_{i\alpha} w_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i\alpha}), \quad \Psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{i\alpha} a_{i\alpha}^\dagger w_\alpha^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i\alpha}). \quad (1.2)$$

Aqui $a_{i\alpha}$, $a_{i\alpha}^\dagger$ denotam os operadores de aniquilação e criação nos modos α das funções de Wannier w_α e w_α^* respectivamente, localizadas no sítio i da rede.

Com o intuito de descrever fenômenos de baixas energias, restringe-se as funções de Wannier ao modo mais baixo ($\alpha = 0$). Assim, o hamiltoniano da Eq. (1.1) pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j \int d\mathbf{x} w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{op}(\mathbf{x}) + V_{ext}(\mathbf{x}) - \mu \right) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{i'j'} a_i^\dagger a_{i'}^\dagger a_j a_{j'} \\ & \times \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w_0^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{i'}) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') w_0(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{j'}). \end{aligned}$$

A expressão acima pode ser reescrita como

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_i (\epsilon_i - \mu) \hat{n}_i + H_{int}, \quad (1.3)$$

onde $\langle ij \rangle$ significa soma sobre primeiros vizinhos e t_{ij} é a amplitude de tunelamento,

$$t_{ij} = - \int d\mathbf{x} w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{op}(\mathbf{x}) + V_{ext}(\mathbf{x}) \right) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j). \quad (1.4)$$

As energias ϵ_i de cada sítio da rede são escritas como:

$$\epsilon_i = \int d\mathbf{x} w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{op}(\mathbf{x}) + V_{ext}(\mathbf{x}) \right) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \quad (1.5)$$

Observe que na Eq. (1.3) foi introduzido o potencial químico μ com vistas a futuras aplicações do ensemble grande-canônico. O termo de interação H_{int} da Eq. (1.3) pode ser simplificado substituindo o potencial de interação entre os átomos por um potencial de contato da forma

$$V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = g \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad g = \frac{4\pi a \hbar^2}{m}, \quad (1.6)$$

onde a é o comprimento de espalhamento de ondas s . Esta aproximação acima é válida no

limite de baixas energias ($k \rightarrow 0$), pois para um potencial qualquer $V(\mathbf{x})$ o deslocamento de fase da onda espalhada em um problema de espalhamento de dois corpos é $\delta_l(k) \sim k^{2l+1}$, onde l o momento angular. Para $k \rightarrow 0$, só ondas s ($l = 0$) devem ser consideradas no espalhamento e a expressão da Eq. (1.6) torna-se válida nesta aproximação [21].

O termo H_{int} pode-se escrever na forma,

$$\begin{aligned}
H_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{i'j'} a_i^\dagger a_{i'}^\dagger a_j a_{j'} \\
&\quad \times \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w_0^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{i'}) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') w_0(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{j'}). \\
&\approx \sum_i a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \int d\mathbf{x} |w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^4 \\
&= \frac{1}{2} \sum_i U_i a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i, \quad \text{onde,} \quad U_i = \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \int d\mathbf{x} |w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^4 \\
&= \frac{1}{2} \sum_i U_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1).
\end{aligned}$$

Assim o hamiltoniano de Bose-Hubbard pode ser escrito,

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_i (\epsilon_i - \mu) \hat{n}_i + \frac{1}{2} \sum_i U_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (1.7)$$

Os termos no hamiltoniano acima podem ser interpretados como segue. O primeiro termo é denominado de termo de *hopping* e descreve o tunelamento dos bósons entre sítios próximos. t_{ij} são os parâmetros de *hopping* e determinam a probabilidade com que essas partículas mudam de sítio. O segundo termo contém as energias ϵ_i de cada sítio da rede e o último termo do hamiltoniano representa a interação entre átomos no mesmo sítio da rede. Estes processos estão representados na Fig. 1.2.

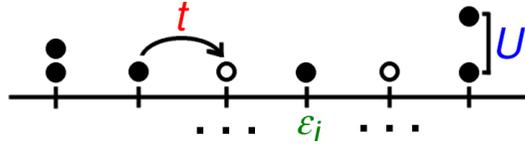


Figura 1.2 Modelo de Bose-Hubbard: o parâmetro de *hopping* t é a amplitude de tunelamento com que os bósons pulam de um sítio da rede para outro, ϵ_i são as energias associadas a cada um dos sítios e U representa a intensidade da interação entre as partículas de um mesmo sítio i da rede.

Note que os parâmetros t_{ij} e U_i no hamiltoniano da Eq. (1.7) dependem em forma geral dos sítios da rede mas no presente trabalho serão considerados constantes.

1.1.1 Limites do modelo de Bose-Hubbard

A transição de fase superfluido-isolante de Mott descrita pelo modelo de Bose-Hubbard pode ser entendida qualitativamente estudando dois limites principais do sistema homogêneo, que é a versão bosônica do modelo original introduzido por Hubbard para estudar a transição de fase metal-isolante de Mott em sistemas fermiônicos [22].

1.1.1.1 Fase superfluida : $t \gg U$

Este primeiro limite é obtido quando os processos de *hopping* são dominantes em relação aos processos de interação, ou seja $t \gg U$. Nesse caso, os átomos podem-se movimentar livremente por todos os sítios da rede e o estado fundamental do sistema é dado por:

$$\begin{aligned} |\Psi_N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_i a_i^\dagger \right)^N |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(a_{\mathbf{k}=0}^\dagger \right)^N |0\rangle, \end{aligned} \quad (1.8)$$

onde N é o número de bósons no estado fundamental e N_s o número de sítios da rede. Note que a segunda expressão da Eq. (1.8) está escrita no espaço recíproco, e o operador $a_{\mathbf{k}=0}^\dagger$ cria partículas no modo $\mathbf{k} = 0$. Este estado fundamental $|\Psi_N\rangle$ é um estado para um número fixo de partículas, e no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) ele fornece uma descrição equivalente a um estado coerente com a fase bem definida e portanto com incerteza no número de átomos por sítio. Ressalta-se que quando os processos de interação são totalmente desprezíveis em relação à energia cinética, o sistema forma um condensado de Bose-Einstein perfeito (*BEC*) onde o

estado de partícula única de mais baixa energia ($\mathbf{k} = 0$) é macroscopicamente ocupado.

1.1.1.2 Fase isolante de Mott: $t \ll U$

O outro limite, denominado isolante de Mott, é obtido quando há um número inteiro de átomos por sítios e os processos de interação são dominantes em relação à energia cinética no modelo de Bose-Hubbard ($t \ll U$). Neste caso, o estado fundamental é simplesmente dado por um produto de estados de Fock não emaranhados:

$$|\Psi_{N=N_s}\rangle = \left(\prod_i a_i^\dagger \right) |0\rangle. \quad (1.9)$$

No estado isolante de Mott não há coerência de fase, ao contrário da fase superfluida. Na Fig. 1.3 mostra-se um desenho esquemático das fases superfluida e isolante de Mott. Note que que na fase superfluida os átomos estão deslocalizados por todos os sítios da rede, mas na fase isolante de Mott os bósons estão localizados devido aos processos de interação.

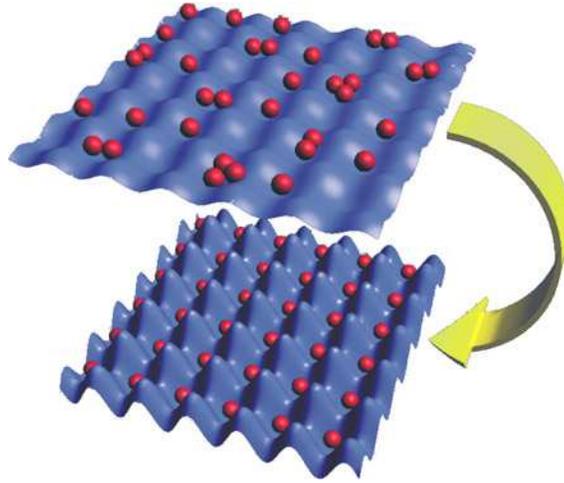


Figura 1.3 Transição de fase superfluido-isolante de Mott: a fase superfluida (*SF*) e caracterizada por ter coerência de fase e incerteza no número de átomos por sítios e a fase isolante de Mott (*MI*), que só existe para um número inteiro de átomos por sítio, não possui coerência de fase [13].

A transição de fase superfluido-isolante de Mott ocorre quando os processos tanto de interação e energia cinética são da mesma ordem no modelo. Assim, existe o valor crítico U_c/t no qual ela ocorre. Esta transição de fases foi observada experimentalmente pela primeira vez com

átomos super-frios utilizando-se a espécie atômica ^{87}Rb [13].

1.2 Evidência experimental da transição superfluido-isolante de Mott

Na Fig. 1.4 é mostrada uma série de imagens com a ocupação no espaço recíproco para vários valores da razão V/E_r , onde V é a profundidade da rede, que está relacionada com o parâmetro de interação U , e E_r é a energia cinética relacionada com o parâmetro de *hopping* t , em uma descrição através do hamiltoniano de Bose-Hubbard [16]. Na Fig. 1.4 (a), que corresponde ao condensado, o ponto de cor vermelha indica a ocupação do estado $\mathbf{k} = 0$. Quando é aumentada a profundidade da rede (ou equivalentemente U) começa a aparecer uma série de pontos ao redor do pico central, sinalizando a ocupação de outros estados com $\mathbf{k} \neq 0$. A transição de fase ocorre entre os padrões (e) e (f) da Fig. 1.4, e corresponde à razão $V/E_r \sim 13$. As imagens (g) – (h) estão associadas à fase isolante de Mott, onde desaparece a ocupação macroscópica.

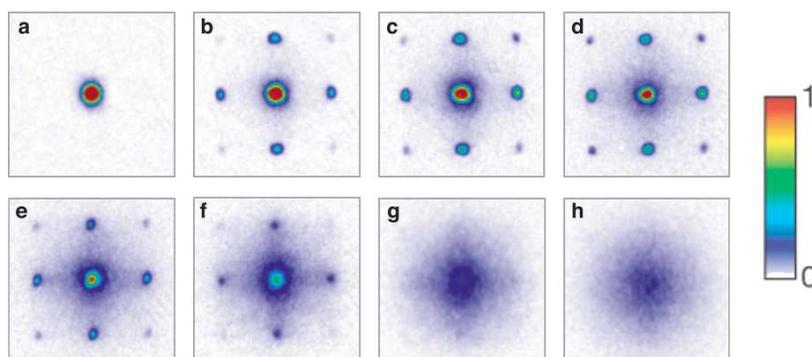


Figura 1.4 Comprovação experimental da transição de fase superfluido-isolante de Mott. A figura mostra uma série de padrões de interferência que dão ocupação dos estados de partícula única no espaço recíproco. A transição de fase ocorre entre as figuras (e) e (f) [13].

Há uma grande variedade de trabalhos teóricos sobre esta transição de fases, utilizando métodos analíticos e/ou numéricos. Vamos agora explorar com mais detalhes os limites do modelo de Bose-Hubbard empregando duas das aproximações mais simples [23], a aproximação de Bogoliubov, que descreve bem o limite de interações fracas, e a teoria de campo médio estática, que trata a energia cinética como perturbação em relação às interações.

1.3 Aproximação de Bogoliubov: limites de interações fracas

Consideremos o hamiltoniano de Bose-Hubbard no caso homogêneo ($\epsilon_i = 0$), e incluamos o potencial químico μ , que permite trabalhar no ensemble grande canônico

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j - \mu \sum_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (1.10)$$

Introduzindo os operadores de criação e destruição $a_{\mathbf{k}}^\dagger$, $a_{\mathbf{k}}$ no espaço de momentos, tais que:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (1.11)$$

onde N_s é o número de sítios da rede e \mathbf{r}_i é a posição do sítio i . Do primeiro termo do hamiltoniano (Eq. (1.10)), segue que

$$-t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j = -\frac{t}{N_s} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}. \quad (1.12)$$

Seja $\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_i + \vec{\delta}$, onde $\vec{\delta}$, é um vetor que liga o sítio i aos seus primeiros vizinhos

$$\begin{aligned} -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j &= -\frac{t}{N_s} \sum_{i\vec{\delta}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i+\vec{\delta})} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + h.c \\ &= -\frac{t}{N_s} \sum_{i\vec{\delta}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\vec{\delta}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + h.c \end{aligned}$$

Utilizando a condição de ortogonalidade

$$\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} = N_s \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad \text{segue que,}$$

$$-t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j = -t \sum_{\mathbf{k}\vec{\delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + h.c$$

$$\begin{aligned}
&= -t \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\vec{\delta}} (e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}.
\end{aligned}$$

Para uma rede hipercúbica em d dimensões:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\mathbf{k}} &= -2t \sum_{\vec{\delta}} \cos(\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}) \\
&= -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j a),
\end{aligned}$$

onde a é o modulo do vetor $\vec{\delta}$.

O segundo termo do hamiltoniano (Eq. (1.10)) na base de momento pode ser escrito como:

$$-\mu \sum_i \hat{n}_i = -\mu \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \quad (1.13)$$

e para o último termo segue que

$$\begin{aligned}
\frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) &= \frac{U}{2} \sum_i a_i^{\dagger} a_i^{\dagger} a_i a_i \\
&= \frac{1}{2} \frac{U}{N_s^2} \sum_{i\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}_4\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \\
&= \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}.
\end{aligned}$$

Assim, o hamiltoniano (Eq. (1.10)) na base de momentos pode ser escrito como:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}, \quad (1.14)$$

$$\text{onde,} \quad \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j a) - \mu. \quad (1.15)$$

1.3.1 Método de Bogoliubov

Como o número médio de átomos no condensado é grande, ou seja, $N_0 \gg 1$ e como $a_{\mathbf{k}=0} |\Psi_0^N\rangle = \sqrt{N_0} |\Psi_0^{N-1}\rangle$, assim pode-se aproximar

$$a_0 \longrightarrow \sqrt{N_0} + \tilde{a}_0 \quad (1.16)$$

onde $\tilde{a}_0 = a_0 - \langle a_0 \rangle$ são as flutuações no operador a_0 .

Na teoria de Bogoliubov deve-se determinar um novo hamiltoniano $H_B(N_0)$, que depende de uma nova variável N_0 (ocupação do condensado), tal que:

$$H_B(N_0) = T(N_0) + V_B(N_0). \quad (1.17)$$

Para determinar uma expressão para $V_B(N_0)$ tomam-se todas as contribuições da Eq. (1.14) até segunda ordem nos operadores com momento diferente de zero ($\mathbf{k} \neq 0$). Pode-se escrever assim:

$$V_B(N_0) = \sum_{i,j=0}^2 V_{i,j}(N_0), \quad (1.18)$$

onde $V_{i,j}(N_0)$ contém os termos de interação da Eq. (1.14), com i operadores de criação e j operadores de destruição de estados com $\mathbf{k} \neq 0$. Segue que:

$$V_{00} = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0 = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} N_0^2 \quad (1.19)$$

$$V_{20} = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_0 a_0 \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad (1.20)$$

$$V_{02} = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \neq 0} a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned}
V_{11} &= \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0 + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}} + a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0 + a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}} \right) \\
&= \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} 4N_0 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{1.22}$$

$$V_{10} = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0 + a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_0 \right) = \frac{U}{N_s} N_0^{3/2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_{\mathbf{k}}^\dagger \tag{1.23}$$

$$V_{01} = \frac{1}{2} \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0 + a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}} \right) = \frac{U}{N_s} N_0^{3/2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_{\mathbf{k}}. \tag{1.24}$$

Como o número de partículas fora do condensado é pequeno em relação a N_0 , os termos que envolvem três e quatro operadores $a_{\mathbf{k}}$, $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ ($\mathbf{k} \neq 0$) como V_{21} , V_{12} e V_{22} serão desprezados. Os termos V_{10} e V_{01} não conservam momento devido a $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$, e também devem ser negligenciados.

Para o termo de energia cinética do hamiltoniano Eq. (1.14) encontra-se:

$$T_B(N_0) = \bar{\varepsilon}_0 a_0^\dagger a_0 + \bar{\varepsilon}_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0 + \bar{\varepsilon}_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \tag{1.25}$$

$$= \bar{\varepsilon}_0 N_0 + \bar{\varepsilon}_0 \sqrt{N_0} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_{\mathbf{k}}^\dagger + \bar{\varepsilon}_0 \sqrt{N_0} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}. \tag{1.26}$$

Assim, na aproximação de Bogoliubov o hamiltoniano da Eq. (1.14) é reduzido à expressão:

$$\begin{aligned}
H_B &= \left(\bar{\varepsilon}_0 + \frac{U}{2} n_0 \right) N_0 + (\bar{\varepsilon}_0 + U n_0) \sqrt{N_0} \left(a_0^\dagger + a_0 \right) \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U n_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (4a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}),
\end{aligned} \tag{1.27}$$

onde $n_0 = \frac{N_0}{N_s}$ é a densidade do condensado. Lembrando que o objetivo é diagonalizar o hamiltoniano acima, a parte linear nos operadores $a_0^\dagger + a_0$ pode ser eliminada escolhendo o

potencial químico como segue:

$$\bar{\varepsilon}_0 + Un_0 = 0. \quad (1.28)$$

Utilizando

$$\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j a) - \mu, \quad (1.29)$$

segue que

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_0 &= -2dt - \mu \\ &= -zt - \mu, \quad z = 2d, \quad \text{é número de primeiros vizinhos.} \end{aligned}$$

Portanto,

$$-zt - \mu + Un_0 = 0,$$

encontrando para o potencial químico μ a expressão

$$\mu = Un_0 - zt. \quad (1.30)$$

Assim, o hamiltoniano H_B (Eq. (1.27)) é escrito:

$$H_B = -\frac{U}{2}n_0N_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}Un_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (4a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}) \quad (1.31)$$

onde,

$$\bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j a). \quad (1.32)$$

Introduzindo,

$$r = Un_0, \quad \zeta_{\mathbf{k}} = \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + 2Un_0 = \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + 2r, \quad (1.33)$$

segue que

$$H_B = -\frac{r}{2}N_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \zeta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{r}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}) \quad (1.34)$$

A parte quadrática nos operadores $a_{\mathbf{k}}$ e $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ do hamiltoniano acima pode ser diagonalizada utilizando a seguinte transformação canônica (**transformação de Bogoliubov**)

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, & a_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}, \\ b_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, & b_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Essa transformação é canônica se os novos operadores ($b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$) satisfizerem as relações de comutação,

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}] = 0 = [b_{\mathbf{k}}^{\dagger}, b_{\mathbf{k}'}^{\dagger}]. \quad (1.36)$$

Estas são satisfeitas impondo-se a restrição $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Segue que

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}^2 b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + b_{-\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}) + v_{\mathbf{k}}^2 b_{-\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \\ a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}}^2 b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger}) + v_{\mathbf{k}}^2 b_{-\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

onde assume-se $u_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}$ e $v_{-\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}$.

Do hamiltoniano (Eq. (1.34)) resulta:

$$\begin{aligned} H_B &= \frac{r}{2} N_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(\frac{r}{2} u_{\mathbf{k}}^2 + \frac{r}{2} v_{\mathbf{k}}^2 + \zeta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \right) (b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + b_{-\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}) \\ &+ \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\zeta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) + 2r u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}] b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\zeta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 + r u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (1.37)$$

A forma diagonal pode ser obtida escolhendo $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ de tal modo que o coeficiente que acom-

panha os termos anômalos $b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + h.c$ seja nulo

$$\frac{r}{2}u_{\mathbf{k}}^2 + \frac{r}{2}v_{\mathbf{k}}^2 + \zeta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = 0. \quad (1.38)$$

Escolhendo a parametrização $u_{\mathbf{k}} = \cosh \psi_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}} = \sinh \psi_{\mathbf{k}}$ que garante $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$, e utilizando $\sinh 2\psi_{\mathbf{k}} = 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$ e $\cosh 2\psi_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2$, segue da equação acima que

$$\tanh 2\psi_{\mathbf{k}} = -\frac{r}{\zeta_{\mathbf{k}}}, \quad (1.39)$$

e,

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} + 1 \right), \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - 1 \right), \quad (1.40)$$

onde,

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\zeta_{\mathbf{k}}^2 - r^2}. \quad (1.41)$$

Com estas expressões obtidas acima é possível reescrever o hamiltoniano da Eq. (1.37). Note-se que o coeficiente dos termos $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$ do hamiltoniano é reescrito como:

$$\begin{aligned} \zeta_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) + 2ru_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} &= \zeta_{\mathbf{k}} \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} + r \frac{-r}{E_{\mathbf{k}}} \\ &= E_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (1.42)$$

e,

$$\begin{aligned} \zeta_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2 + ru_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} &= \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{2} \left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - 1 \right) + r \left(\frac{-r}{2E_{\mathbf{k}}} \right) \\ &= \frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (1.43)$$

Desse modo, chega-se à expressão diagonal procurada.

$$H_B = \frac{1}{2}Un_0N_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}(E_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}\neq 0}E_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}. \quad (1.44)$$

Observe que a energia das excitações $E_{\mathbf{k}}$ ainda pode ser reescrita em termos das variáveis iniciais do modelo

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\zeta_{\mathbf{k}}^2 - r^2}, \quad r = Un_0, \quad (1.45)$$

utilizando

$$\begin{aligned} \zeta_{\mathbf{k}} &= \bar{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + 2Un_0 \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + 2Un_0 \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}} - (Un_0 - zt) + 2Un_0 \\ &= zt + Un_0 + \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j a), \end{aligned}$$

de modo que

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(zt + \epsilon_{\mathbf{k}})^2 + 2Un_0(zt + \epsilon_{\mathbf{k}})} \quad (1.46)$$

Note-se para modos de comprimento de ondas longos ($ka \ll 1$), encontra-se

$$E_{\mathbf{k}} \approx \mathbf{k}\sqrt{2tUn_0a^2}, \quad \mathbf{k} \rightarrow 0. \quad (1.47)$$

A energia das excitações $E_{\mathbf{k}}$ é linear em \mathbf{k} , característica de um superfluido que tem ondas de som como excitações de baixa energia [24]. Porém não há *gap*, ou seja a aproximação de Bogoliubov não descreve a fase isolante de Mott, que é caracterizada pela presença de um *gap* de energia no espectro de excitações [13]. Vamos agora encontrar a densidade do condensado n_0 .

1.3.2 Densidade do condensado

Determinaremos agora a densidade do condensado n_0 associada ao hamiltoniano efetivo da Eq. (1.44). Para isso escrevemos a densidade total n como:

$$n = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle_{H^{eff}}. \quad (1.48)$$

Separando a contribuição de momento zero, segue que

$$\begin{aligned} n &= n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \langle (u_{\mathbf{k}}^2 b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2) \rangle \\ &= n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left\{ (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \rangle + v_{\mathbf{k}}^2 \right\}. \end{aligned}$$

Utilizando as equações (1.40), encontra-se:

$$n = n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - 1 \right) \right]. \quad (1.49)$$

Como $\langle b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \rangle = (e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1)^{-1}$, que é o fator de ocupação de Bose-Einstein para um sistema de bósons em equilíbrio térmico à temperatura T , segue que

$$n = n_0 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[\left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1} + \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - 1 \right) \right]. \quad (1.50)$$

No limite de temperatura zero $\beta \rightarrow \infty$ e $\langle b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \rangle \rightarrow 0$ e

$$n_0 = n - \frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - 1 \right). \quad (1.51)$$

No limite contínuo tem-se $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^d k}{(2\pi)^d}$ e que

$$n_0 = n - \frac{V}{2N_s} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left(\frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - 1 \right). \quad (1.52)$$

Fazendo a mudança de variáveis $\mathbf{k}a = 2\pi\mathbf{q}$ e tomando $N_s = V/a^d$, encontra-se para a densidade do condensado a expressão:

$$n_0 = n - \frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} d^d q \left(\frac{\zeta_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}} - 1 \right), \quad (1.53)$$

onde,

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(zt + \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 + 2Un_0(zt + \varepsilon_{\mathbf{k}})}, \quad (1.54)$$

$$\zeta_{\mathbf{k}} = zt + Un_0 + \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j a). \quad (1.55)$$

Na Fig. 1.5 apresenta-se a densidade do condensado em função de U/t (retirado da referência [23]). Note que este resultado confirma a afirmação de que a aproximação de Bogoliubov não descreve a fase isolante de Mott, pois não existe nenhuma região em que a densidade seja nula e n_0/n tende a zero apenas no limite $U/t \rightarrow \infty$. Pode-se concluir que embora a aproximação de Bogoliubov descreva bem a fase superfluida, ela não é boa para descrever a fase isolante de Mott. Isso significa que essa aproximação não é válida no limite de interações fortes, onde a fase isolante de Mott está presente.

Vamos agora explorar a possibilidade de descrever a transição de fase superfluido-isolante de Mott utilizando uma teoria que leve em conta os efeitos das interações de forma exata, mas considere o termo de energia cinética como perturbação.

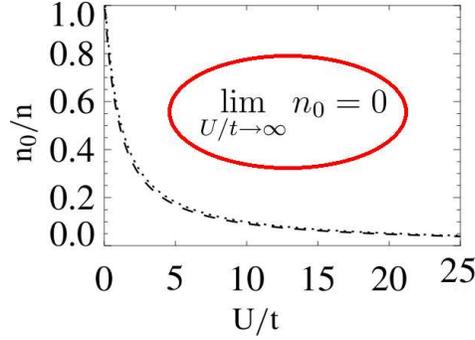


Figura 1.5 Densidade do condensado n_0/n em função de U/t calculada na aproximação de Bogoliubuv aplicada ao modelo de Bose-Hubbard [23].

1.4 Teoria de campo médio estática

Nesta seção aplicaremos a aproximação de campo médio estática ao modelo de Bose-Hubbard [14, 23],

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j - \mu \sum_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (1.56)$$

Nessa teoria, o modelo de rede acima é reduzido ao problema de um sítio sujeito a uma condição de auto-consistência, de maneira similar ao cálculo de campo médio da magnetização do ferromagneto de Ising [25]. Começa-se fatorando o termo de energia cinética do hamiltoniano de Bose-Hubbard, utilizando-se a aproximação de campo médio $a_i = \langle a_i \rangle + \tilde{a}_i$. Assim, segue:

$$a_i^\dagger a_j = -\langle a_i^\dagger \rangle \langle a_j \rangle + \langle a_i^\dagger \rangle a_j + a_i^\dagger \langle a_j \rangle + \text{flutuações}. \quad (1.57)$$

Utilizando a expressão acima, o hamiltoniano (Eq. (1.56)) é reduzido ao hamiltoniano efetivo de um sítio, como segue:

$$\mathcal{H}_{eff}^{(i)} = -\eta_i (a_i^\dagger + a_i) + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) - \mu n_i \quad (1.58)$$

onde o parâmetro η_i é dado pela relação:

$$\eta_i = t \sum_{n.n.j} \langle a_j \rangle, \quad (1.59)$$

aqui $n.n$ significa soma sobre primeiros vizinhos e supusemos, sem perda de generalidade, que $\langle a_i \rangle \in R$. Nota-se que o problema definido pelas equações (1.58) e (1.59) é um problema auto-consistente, pois para encontrar o estado fundamental de $\mathcal{H}_{eff}^{(i)}$, precisa-se conhecer o parâmetro η_i , que por sua vez também depende do estado fundamental através do valor esperado $\langle a_i \rangle$.

Nesta aproximação é possível determinar de maneira analítica a fronteira do digrama de fases utilizando o fato de que perto da transição de fases o parâmetro $\langle a \rangle$ é pequeno. Assim pode-se aplicar teoria de perturbações não degenerada considerando-se o parâmetro η_i da Eq. (1.58) como uma perturbação.

1.4.1 Diagrama de fases em teoria de campo médio estática

Para uma rede uniforme de conectividade Z o parâmetro η_i definido na Eq. (1.59) é reduzido à expressão $\eta = Zt \langle a \rangle$, onde o índice i foi omitido para facilitar a notação e porque $\langle a_i \rangle$ não depende de i no caso uniforme. Assim, pode-se tomar como perturbação a expressão

$$V^{(I)} = -\eta(a^\dagger + a). \quad (1.60)$$

Um cálculo simples em teoria de perturbações utilizando $|n(\mu/U)\rangle$ e $E_n^{(0)} = \frac{U}{2}n(n-1) - \mu n$ como problema de referência permite determinar em primeira ordem o estado fundamental do hamiltoniano $\mathcal{H}_{eff}^{(i)}$

$$|\psi_0\rangle = |n\rangle - \eta \left[\frac{\sqrt{n}}{U(n-1) - \mu} |n-1\rangle + \frac{\sqrt{n+1}}{\mu - Un} |n+1\rangle \right]. \quad (1.61)$$

Isso implica que

$$\langle \psi_0 | a | \psi_0 \rangle = -\eta \left[\frac{n}{U(n-1) - \mu} + \frac{n+1}{\mu - Un} \right]. \quad (1.62)$$

Utilizando a equação da auto-consistência $\eta = Zt \langle a \rangle$, segue,

$$\eta = -Zt\eta \left[\frac{n}{U(n-1) - \mu} + \frac{n+1}{\mu - Un} \right] + \dots \quad (1.63)$$

onde os símbolos ... denotam termos de ordem superior em η . Assim, a relação acima permite determinar a fronteira do digrama de fases como

$$\frac{Zt}{U} = \frac{(n(\mu/U) - \mu/U)(\mu/U - n(\mu/U) + 1)}{1 + \mu/U}, \quad (1.64)$$

Na Fig. 1.6 apresenta-se o diagrama de fases no plano $(Zt/U, \mu/U)$. Apresentam-se os três primeiros lóbulos de Mott (cor vermelha) caracterizados pelas ocupações $\langle b_i^\dagger b_i \rangle = n(\mu/U) = 1, 2, 3$. Nota-se que a fase superfluida (cor azul) é separada da fase isolante de Mott (*MI*) por linhas de pontos críticos onde o parâmetro de ordem $\langle a \rangle$ é nulo.

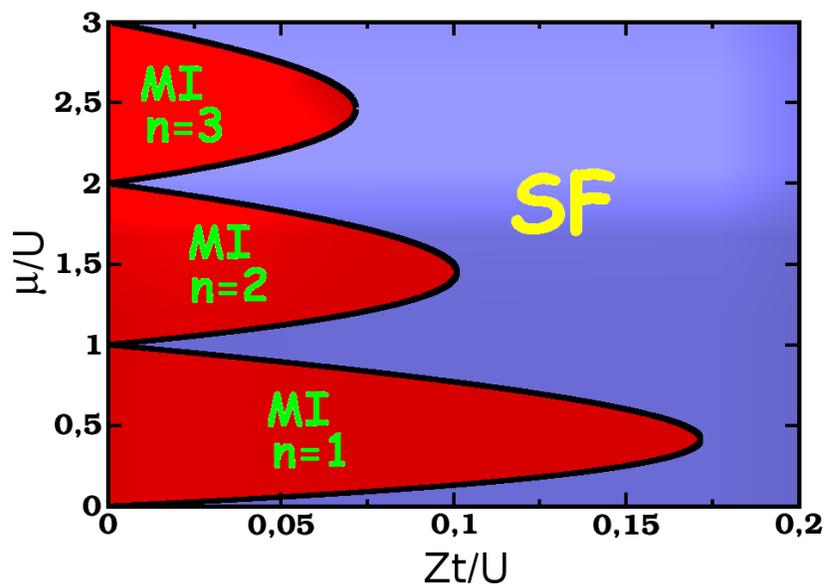


Figura 1.6 Diagrama de fases no plano $(Zt/U, \mu/U)$ para o modelo de Bose-Hubbard calculado utilizando teoria de campo médio estática [14, 23].

1.4.2 Parâmetro de ordem e ocupação

O parâmetro de ordem $\langle a \rangle$ determinado de forma auto-consistente resolvendo as equações (1.58) e (1.59) é mostrado na Fig. 1.7(a) em função de μ/U para um valor fixo do parâmetro de hopping $Zt/U = 0.05$. Note que este é zero na fase isolante de Mott e finito na fase superfluida. Na Fig. 1.7(b) apresenta-se a ocupação $\langle n \rangle$ para o mesmo valor de hopping $Zt/U = 0.05$ em função de μ/U . Observa-se que a fase Mott é caracterizada por uma série de platôs de densidade

constante os quais não são descritos na teoria de Bogoliubov.

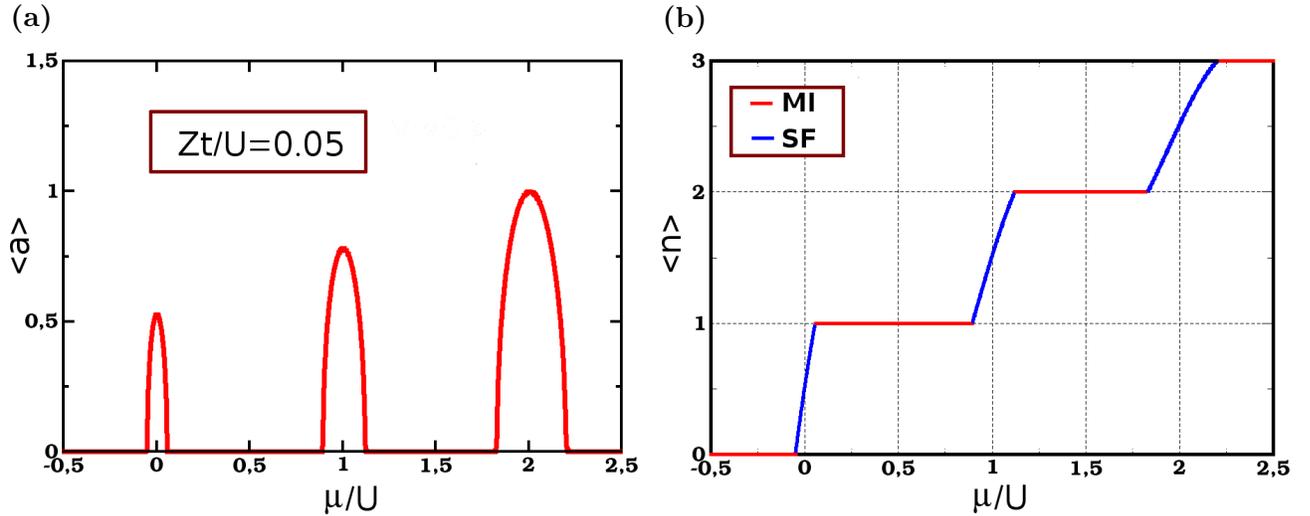


Figura 1.7 (a) Parâmetro de ordem e (b) ocupação por sítio em função de μ/U para um valor fixo de *hopping* $Zt/U = 0.05$

A teoria de campo médio estática descreve a transição de fase superfluido-isolante de Mott e permite determinar outras grandezas que caracterizam a transição de fases. O ponto crítico para uma densidade fixa $\langle n \rangle$ é determinado maximizando-se a Eq (1.64) em relação ao potencial químico [23], obtendo-se

$$(U/Zt)_c \simeq 5.8, \quad n = 1, \quad (1.65)$$

$$\simeq 4n, \quad n \gg 1. \quad (1.66)$$

O valor crítico encontrado para $\langle n \rangle = 1$ concorda muito bem com os experimentos da referência [13]. Vale comentar que existem métodos bem mais sofisticados que permitem caracterizar a transição de fases superfluido-isolante de Mott, tais como Monte Carlo Quântico [26].

1.5 Diagrama de fases determinado por Monte Carlo quântico

Na Fig. 1.8 apresenta-se o resultado obtido para o diagrama de fases para o modelo de Bose-Hubbard segundo o método de Monte Carlo (curva azul com símbolos), assim como também os resultados obtidos com outros métodos de aproximação, entre eles a teoria de campo médio estática exposta na seção anterior. O cálculo corresponde a uma rede 3D onde o número de

coordenação é $Z = 6$. Note-se que mesmo existindo uma diferença entre as teorias de campo médio estático (linha preta tracejada da Fig. 1.8) e o resultado obtido com Monte Carlo quântico (linha com símbolos azuis), pode-se considerar que a teoria de campo médio estática fornece uma boa descrição para a transição de fases.

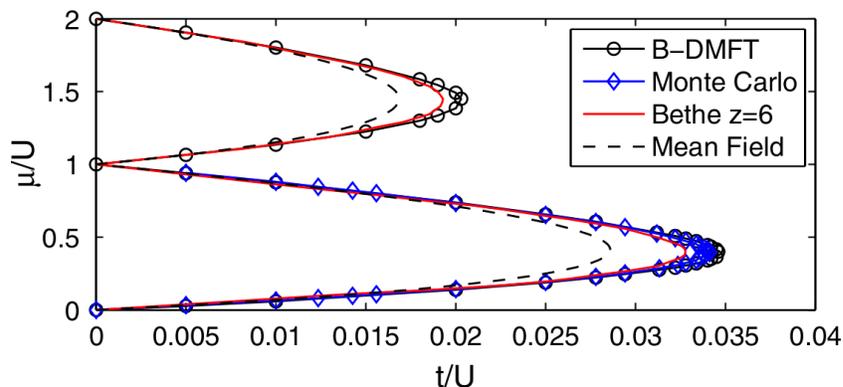


Figura 1.8 Diagrama de fases no plano $(t/U, \mu/U)$ para o modelo de Bose-Hubbard em $3D$. A curva preta com símbolos foi obtida utilizando a $B - DMFT$ [27], a linha azul com símbolos foi determinada utilizando o método de Monte Calo Quântico [26], o diagrama de fases de cor vermelha foi calculado na rede de Bethe [28] e os resultados representados pela linha tracejada foram obtidas em teoria de campo médio estática [14, 23].

Na Fig. 1.8 também estão os digramas de fases obtidos usando-se outros dois métodos de aproximação desenvolvidos recentemente: a curva vermelha corresponde a uma solução na rede de Bethe [28] e a curva preta com símbolos é uma solução utilizando teoria dinâmica de campo médio para bósons ($B-DMFT$) [27, 29, 30]. A $B-DMFT$ é uma versão bosônica da teoria já existente utilizada para descrever sistemas fermiônicos fortemente correlacionados [31, 32]. Nota-se que o diagrama de fases segundo esta teoria é bem parecido ao calculado com o método de Monte Carlo Quântico. Ressalta-se que um dos ingredientes da $B-DMFT$ é a solução do problema de impureza única correlacionada, que será o tópico abordado no capítulo 2.

1.6 Esquema geral

A seguir apresenta-se uma descrição geral de todos os tópicos estudados em cada capítulo do presente trabalho.

Capítulo 2: Fases Quânticas no Modelo de Impureza Única de Anderson

Aborda-se o modelo de impureza única de Anderson para bósons. Inicialmente é deduzido o modelo de impureza única e posteriormente apresentam-se alguns resultados conhecidos da literatura em relação à transição de fases presente neste modelo [19, 20]. O método de diagonalização exata é empregado como ferramenta para estudar as fases quânticas do modelo utilizando como estratégia a inclusão de pequenos campos que quebram a simetria de calibre que o modelo apresenta. Tal fato permite definir o parâmetro de ordem (parâmetro superfluido) utilizado para descrever a transição de fases. Diversos resultados são comparados com os estudos relatados nas referências [19, 20].

Capítulo 3: Efeitos de Desordem na Transição Superfluido-Isolante de Mott

Estuda-se como os efeitos da desordem afetam a transição superfluido-isolante de Mott. O método de estudo é a denominada teoria estocástica de campo médio (*SMFT*) recentemente proposta nos trabalhos [33, 34]. Apresenta-se um estudo analítico da *SMFT* que permite determinar o diagrama de fases para o modelo de Bose-Hubbard desordenado. A aproximação analítica apresentada é inspirada em um cálculo numérico válido na região crítica da transição de fases; compara-se finalmente o diagrama de fases obtido analiticamente com os resultados numéricos conhecidos [33].

Capítulo 4: Modelo de Bose-Hubbard Desordenado com Spin-1: Tratamento mediante Teoria Estocástica de Campo Médio

Neste capítulo além da desordem é adicionado outro ingrediente ao modelo de Bose-Hubbard, o *spin*. Estudam-se assim os efeitos da desordem no modelo de Bose-Hubbard para partículas com *spin*-1 utilizando a *SMFT*. Nessa teoria são determinadas as distribuições de probabilidade de várias grandezas, assim como também os valores médios destas grandezas, permitindo descrever as fases existentes no modelo. Ressaltam-se as diferenças entre os resultados dos casos não homogêneo e homogêneo do modelo.

Capítulo 5: Considerações Finais

Este capítulo é dedicado a destacar os resultados mais relevantes do presente trabalho, ressaltando diversos problemas que podem ser abordados com os métodos utilizados nos diferentes tópicos desenvolvidos nesta tese.

Apêndices

Nos apêndices **A**, **B** e **C** são apresentados em detalhes vários cálculos relacionados com o caso não interagente do modelo de impureza única de Anderson estudado no capítulo 2.

2

Fases Quânticas no Modelo de Impureza Única de Anderson

2.1 Introdução

No fascinante mundo da Física da Matéria Condensada, um dos tópicos que tem despertado maior interesse para os físicos experimentais e teóricos é o estudo do condensado de Bose-Einstein (*BEC*) [1–3]. Na última década, o uso das redes ópticas, permitiu um alto grau de manipulação e controle dos experimentos de aprisionamento de átomos frios [13]. Tais sistemas tornam-se potenciais candidatos para o desenvolvimento da computação quântica, principalmente devido à coerência e emaranhamento dos estados *BEC* [35]. O grande desafio é levar em conta os efeitos de decoerência e dissipação que destroem as correlações quânticas (emaranhamento) nesses sistemas [36, 37].

Recentemente, utilizando combinações de armadilhas atômicas com armadilhas de íons, tem sido possível estudar os efeitos de um reservatório com características superfluidas sobre uma única impureza, neste caso o íon [38]. O modelo de impureza única de Anderson bosônica (*B-SIAM*), do inglês bosonic single-impurity Anderson model, objetivo desde capítulo, foi introduzido pelo grupo de Zoller [17, 18] para descrever um ponto quântico acoplado a um reservatório com características de superfluido. Vale comentar que nesse trabalho o modelo é reduzido ao chamado modelo de *spin*-bósons que apresenta características diferentes do modelo de impureza bosônica de Anderson.

Utilizando técnicas do grupo de renormalização numérico [39–41], foi demonstrado que o *B-SIAM* apresenta uma transição de fase quântica, denominada isolante de Mott-*BEC* [19, 20].

A Fig. 2.1 mostra um esquema que permite entender como ocorre tal transição de fase [19, 20]. Na Fig. 2.1(a), temos um reservatório de bósons não interagente na ausência da impureza. Todas as partículas ocupam o estado de energia mais baixa do potencial $V_B(x)$. O operador de campo $\Psi_B(x)$ atua no reservatório destruindo os bósons na posição x . A fase isolante de Mott aparece quando a interação entre os bósons na impureza é dominante em relação aos processos de *hopping* que ligam o banho à impureza, as partículas da impureza confinadas pelo potencial $V_A(x)$ se separam do banho (Fig. 2.1(b)). Quando os processos de hopping dominam em relação à interação das partículas da impureza, a fase *BEC* pode ser vista como ocupação macroscópica de um estado local no sítio (ver Fig. 2.1(c)).

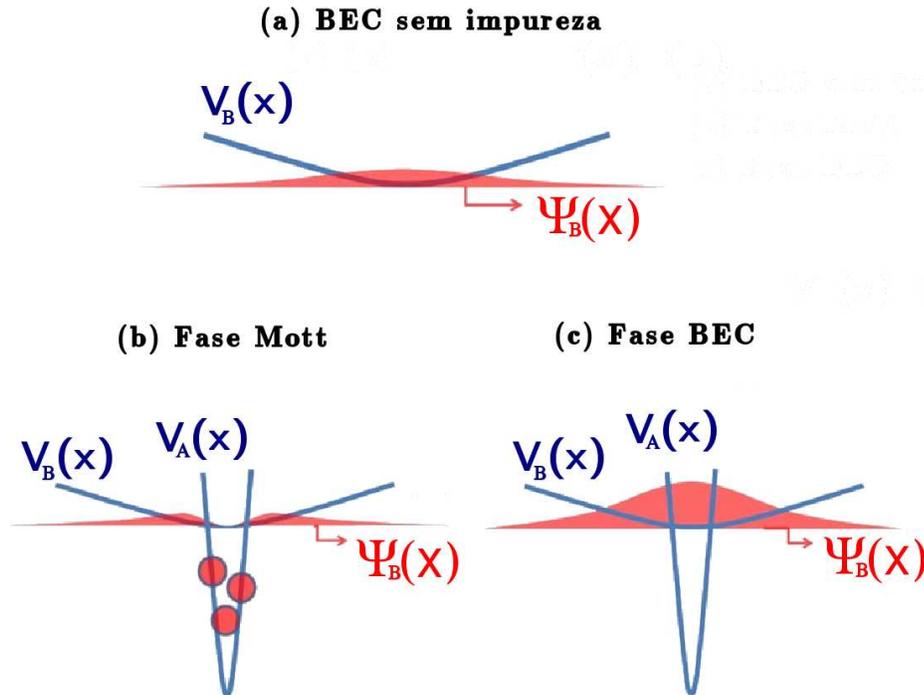


Figura 2.1 Modelo de uma impureza bosônica de Anderson: (a) o *BEC* na ausência da impureza, (b) A fase isolante Mott. (c) A fase *BEC*.

O *B-SIAM* é um dos ingredientes fundamentais na implementação da teoria dinâmica de campo médio para bósons (*B-DMFT*) [27, 29, 30]. Esta teoria foi inicialmente proposta para estudar sistemas fermiônicos [31, 32], e atualmente é considerada uma das teorias mais aceitas para descrever sistemas fortemente correlacionados de natureza fermiônica, bosônica ou

misturas.

Da mesma maneira que foi deduzido o modelo de Bose-Hubbard (ver seção 1.1), será feita uma dedução do hamiltoniano de impureza única bosônica. Isto será considerado na próxima seção deste capítulo. Em seguida, o limite não interagente do modelo é estudado em detalhes na seção 2.3. Em particular demonstra-se analiticamente uma relação para os parâmetros críticos da impureza e do banho onde ocorre o *BEC*. Empregou-se o método de diagonalização exata para estudar o modelo interagente, utilizando como estratégia a condição de quebra espontânea de simetria devido a pequenos campos introduzidos no modelo hamiltoniano. Com isso, foi possível definir um parâmetro de ordem para descrever a transição de fase quântica que o modelo apresenta. Outras grandezas locais como a susceptibilidade, ocupação da impureza e desvio padrão da ocupação da impureza são calculadas e comparadas com os resultados obtidos nas referências [19, 20]. A última seção do capítulo contém um resumo dos resultados de maior relevância e perspectivas futuras de estudos decorrentes do presente trabalho.

2.2 Hamiltoniano do Modelo

Uma derivação do modelo de uma impureza bosônica foi proposta nas referências [17, 18] para estudar um ponto quântico imerso em um reservatório superfluido. A Fig. 2.2 mostra os bósons no ponto quântico (impureza), sinalizados pelas circunferências vermelhas que estão confinados pelo potencial rígido $V_A(\mathbf{x})$, enquanto que os bósons do reservatório são confinados pelo potencial $V_B(\mathbf{x})$.

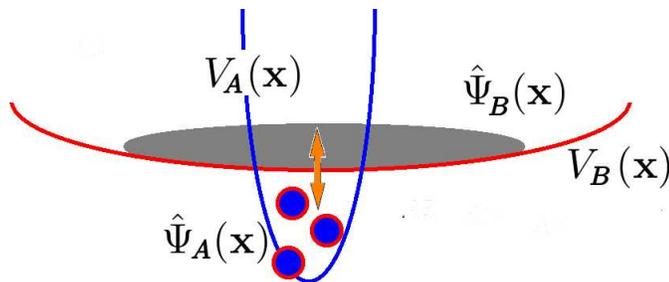


Figura 2.2 Um ponto quântico imerso em um reservatório superfluido. Os bósons na impureza estão confinados pelo potencial rígido $V_A(\mathbf{x})$ e podem mover-se do ponto quântico ao reservatório (processo indicado pela seta de cor laranja). O operador de campo $\hat{\Psi}_A(\mathbf{x})$ destrói bósons na impureza e o $\hat{\Psi}_B(\mathbf{x})$ no reservatório. O potencial de confinamento dos bósons no reservatório é $V_B(\mathbf{x})$ [20].

Pode-se escrever o hamiltoniano composto de três termos:

$$H = H_A + H_B + H_{AB}, \quad (2.1)$$

onde H_A é referente ao hamiltoniano da impureza, H_B ao reservatório dos bósons, e H_{AB} representa o acoplamento do banho com a impureza. Na linguagem de segunda quantização, escreve-se:

$$H_A = \int dx \Psi_A^\dagger(\mathbf{x}) \left(\frac{p_A^2}{2m_A} + V_A(\mathbf{x}) \right) \Psi_A(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int dx dx' \Psi_A^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_A^\dagger(\mathbf{x}') U_A(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Psi_A(\mathbf{x}') \Psi_A(\mathbf{x}), \quad (2.2)$$

onde $V_A(\mathbf{x})$ e $U_A(\mathbf{x})$ são os potenciais de confinamento e de interação dos bósons na impureza. Os operadores de campo $\Psi_A^\dagger(\mathbf{x})$ e $\Psi_A(\mathbf{x})$, criam e destroem partículas na posição \mathbf{x} .

Supondo que os bósons no reservatório não interagem, pode-se descrevê-los pelo hamiltoniano

$$H_B = \int d\mathbf{x} \Psi_B^\dagger(\mathbf{x}) \left(\frac{p_B^2}{2m_B} + V_B(\mathbf{x}) \right) \Psi_B(\mathbf{x}), \quad (2.3)$$

onde $V_B(\mathbf{x})$ é o potencial que confina os bósons no reservatório. Como consideraremos apenas uma espécie de átomos, as massas dos átomos na impureza serão tomadas como iguais às massas dos átomos no reservatório, ou seja $m_A = m_B$.

O acoplamento da impureza com o banho é descrito via o hamiltoniano:

$$H_{AB} = \Omega \int d\mathbf{x} \left(\Psi_A^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_B(\mathbf{x}) + \Psi_B^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_A(\mathbf{x}) \right). \quad (2.4)$$

O parâmetro Ω é a frequência efetiva de Rabi que permite os processos de *hopping* entre a impureza e o reservatório [17, 18].

Procedendo de forma análoga à derivação do modelo de Bose-Hubbard na rede, expandimos

os operadores de campo numa nova base,

$$\Psi_A(\mathbf{x}) = \phi_a(\mathbf{x})a, \quad (2.5)$$

$$\Psi_B(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})b_{\mathbf{k}}, \quad (2.6)$$

onde $\phi_a(\mathbf{x})$ é a função de onda associada com o potencial de confinamento dos bósons na impureza $V_A(\mathbf{x})$, e “ a ” é operador de destruição que atua na impureza. Os operadores $b_{\mathbf{k}}$ atuam destruindo partículas no banho. Os coeficientes $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ são as soluções da equação de Schödinger para o potencial de confinamento $V_B(\mathbf{x})$ com energias $\varepsilon_{\mathbf{k}}$

$$\left(\frac{p_B^2}{2m_B} + V_B(\mathbf{x}) \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (2.7)$$

Utilizando as equações (2.5) e (2.7), H_B pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} H_B &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d\mathbf{x} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \left(\frac{p_B^2}{2m_B} + V_B(\mathbf{x}) \right) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d\mathbf{x} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \varepsilon_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \end{aligned}$$

Assumindo que as funções $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ podem ser normalizadas, obtêm-se:

$$H_B = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \quad (2.8)$$

Para reescrever o hamiltoniano da impureza H_A pode-se utilizar o fato de que no limite de baixas temperaturas, o potencial de interação $U_A(x)$ pode ser substituído pelo potencial de contato,

$$U_A(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = g_A \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad g_A = \frac{4\pi a_A \hbar^2}{m_A}, \quad (2.9)$$

onde a_A é o comprimento de espalhamento de onda s , e m_A é a massa dos bósons na impureza.

Assim, temos:

$$H_A = \overbrace{\int d\mathbf{x} \phi_a^*(\mathbf{x}) \left(\frac{p_A^2}{2m_A} + V_A(\mathbf{x}) \right) \phi_a(\mathbf{x})}^{-\mu_0} a^\dagger a + \frac{1}{2} \overbrace{g_A \int d\mathbf{x} |\phi_a(\mathbf{x})|^4}^U a^\dagger a^\dagger a a \quad (2.10)$$

$$= -\mu_0 a^\dagger a + \frac{U}{2} a^\dagger a^\dagger a a, \quad (2.11)$$

onde os parâmetros μ_0 e U representam a energia e a interação dos bósons na impureza.

O hamiltoniano H_{AB} , pode-se reescrever utilizando as equações (2.5) como:

$$H_{AB} = \Omega \sum_{\mathbf{k}} \int d\mathbf{x} (\phi_a^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) b_{\mathbf{k}} a^\dagger + h.c.).$$

Introduzindo,

$$V_{\mathbf{k}} = \Omega \int d\mathbf{x} \phi_a^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (2.12)$$

obtêm-se,

$$H_{AB} = \sum_{\mathbf{k}} (V_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger a + V_{\mathbf{k}}^* a^\dagger b_{\mathbf{k}}) \quad (2.13)$$

Portanto, o modelo de uma impureza em um reservatório de bósons é descrito por:

$$H = -\mu_0 a^\dagger a + \frac{U}{2} a^\dagger a^\dagger a a + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} (V_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger a + V_{\mathbf{k}}^* a^\dagger b_{\mathbf{k}})$$

Tal modelo é conhecido como hamiltoniano estrela. A impureza (círculo verde da Fig. 2.3) está acoplada a todos os sítios do banho em forma de estrela pelos parâmetros de hibridização $V_{\mathbf{k}}$. Também é possível mapear o hamiltoniano acima em uma geometria de cadeia [40], só que neste caso a impureza estará unicamente acoplada ao primeiro sítio da cadeia, existindo também processos de *hopping* nos sítios do banho. A geometria de cadeia é usada na implementação

do grupo de renormalização numérica (*NRG*) pela simetria do hamiltoniano [40]. No método de diagonalização exata, empregado no presente trabalho, as duas geometrias no hamiltoniano acima (cadeia e estrela) são completamente equivalentes, pois o hamiltoniano será truncado para um número fixo de sítios no banho e número de partículas.

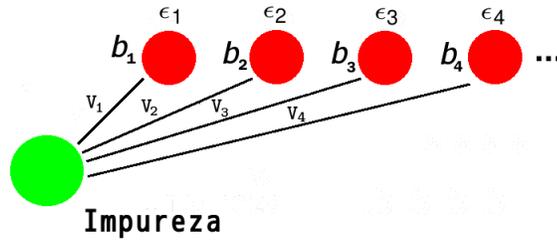


Figura 2.3 Geometria estrela para o modelo de impureza única. A impureza é acoplada a todos os sítios do banho via processos de hibridização com amplitudes $V_{\mathbf{k}}$.

2.3 Limite não interagente: $U = 0$

Inicialmente, chamamos os operadores da impureza como b_0 (simplesmente com o intuito de facilitar a notação usada mais à frente) e a impureza como *sítio zero*. Assim, o hamiltoniano de impureza única bosônica embebida em um banho, também de caráter bosônico, pode ser escrito como:

$$H = -\mu_0 b_0^\dagger b_0 + \frac{U}{2} b_0^\dagger b_0 (b_0^\dagger b_0 - 1) + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_{\mathbf{k}}). \quad (2.14)$$

O limite não interagente $U = 0$ leva ao fenômeno de condensação de Bose-Einstein (BEC), onde existe uma ocupação macroscópica do estado fundamental. A função de Green para o sítio zero é definida segundo a expressão:

$$iG_0(t) = \langle \Phi_0 | T[b_0(t)b_0^\dagger(0)] | \Phi_0 \rangle, \quad (2.15)$$

onde T é o operador de ordenamento temporal e $|\Phi_0\rangle$, é o estado fundamental. Esta função pode ser calculada com facilidade (ver apêndice A para os detalhes do cálculo) encontrando-se:

$$G_0(\omega) = -2\pi i N |\gamma_0|^2 \delta(\omega) + \sum_{\mathbf{q}} \frac{|\gamma_{\mathbf{q}}|^2}{\omega - E_{\mathbf{q}} + i\eta}, \quad (2.16)$$

onde N é o número de bósons no estado fundamental, e os coeficientes $|\gamma_{\mathbf{q}}|^2$ são dados segundo:

$$|\gamma_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{1}{1 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}^2}{(E_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2}}. \quad (2.17)$$

O espectro de energia $E_{\mathbf{q}}$ (energia por partícula) é determinado pela equação,

$$E_{\mathbf{q}} + \mu_0 - \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = 0. \quad (2.18)$$

A função espectral é definida como a parte imaginária da função de Green. Da Eq. (2.16), encontra-se

$$\begin{aligned} A_0(\omega) &\equiv -\frac{\text{Im}G_0(\omega)}{\pi} \\ &= 2N\delta(\omega)|\gamma_0|^2 + \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\omega - E_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (2.19)$$

É importante ressaltar que em $\omega = 0$ há um pico com peso proporcional ao número de partículas N no estado fundamental, o que é uma característica do *BEC*.

Torna-se interessante reescrever o segundo termo da Eq. (2.16) (detalhes no apêndice A) como:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(\omega) &= \sum_{\mathbf{q}} \frac{|\gamma_{\mathbf{q}}|^2}{\omega + i\eta - E_{\mathbf{q}}} \\ &= \frac{1}{\omega + i\eta + \mu_0 - \mathcal{J}_0(\omega)}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde $\mathcal{J}_0(\omega)$,

$$\mathcal{J}_0(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}^2}{\omega + i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.21)$$

A parte imaginária de $\mathcal{J}_0(\omega)$, permite definir uma segunda função espectral simbolizada por $\Delta_0(\omega)$, sendo:

$$\begin{aligned} \Delta_0(\omega) &= -\text{Im}\mathcal{J}_0(\omega) \\ &= \pi \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Dessa maneira toda a informação do banho na função de Green não interagente está contida na função espectral $\Delta_0(\omega)$. Os parâmetros do banho podem ser determinados escolhendo uma parametrização de $\Delta_0(\omega)$, como é usual em vários problemas de impureza única.

Utilizando uma lei de potências na frequência como parametrização de $\Delta_0(\omega)$ [37], segue que

$$\Delta_0(\omega) = 2\pi\alpha\omega_c^{1-s}\omega^s, \quad 0 < \omega < \omega_c, \quad s > -1, \quad (2.23)$$

onde α é um parâmetro adimensional que caracteriza a intensidade da dissipação, ω_c é a frequência de corte e s o expoente do banho. O caso $s < 1$ é conhecido como regime sub-ôhmico, $s = 1$ ôhmico, e $s > 1$ regime super-ôhmico, (veja Fig. 2.4).

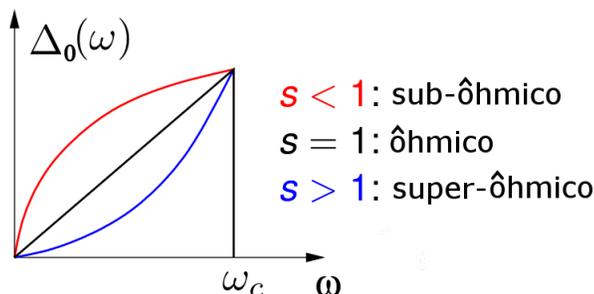


Figura 2.4 Parametrização em lei de potências para a função espectral $\Delta_0(\omega)$. Regime sub-ôhmico $s < 1$, regime ôhmico $s = 1$, e super-ôhmico $s > 1$.

Uma interessante pergunta a ser respondida é: existe um valor crítico dos parâmetros (impureza e banho) no qual ocorre o BEC? Para encontrar a resposta, pode-se buscar os pólos de $\mathcal{G}_0(\omega)$, solucionando a equação

$$\omega + \mu_0 = \overline{\Delta}(\omega), \quad (2.24)$$

onde $\overline{\Delta}(\omega)$ é definido como o valor principal (*P.V.*) de $\mathcal{J}_0(\omega)$ segundo:

$$\overline{\Delta}(\omega) = P.V. \int \frac{dx}{\pi} \frac{\Delta_0(x)}{\omega - x}. \quad (2.25)$$

A solução encontrada para a Eq. (2.25), sendo o pólo $\omega = \omega_0 < 0$, leva ao valor crítico de α no qual ocorre o BEC (ver apêndice B),

$$\alpha_c = -\frac{\mu_0 s}{2\omega_c}, \quad s \geq 0. \quad (2.26)$$

Tal resultado pode ser interpretado como um estado localizado, de energia negativa se separa do contínuo de energia no ponto $\alpha = \alpha_c$, no caso $s > 0$.

Na Fig. 2.5(a) mostra-se a parte imaginária da função de Green $\mathcal{G}_0(\omega)$ em função de ω . O pico do tipo função delta desta função espectral corresponde ao polo simples determinado pela condição acima. Esse estado ligado é separado do contínuo de energia deixando um *gap* de energia finito (Fig. 2.5(b)). No *BEC* há uma ocupação macroscópica de tal estado ligado. Quando os processos de interação são levados em consideração, o *gap* começa a se fechar. Este sumiço do *gap* foi o critério usado para sinalizar a transição de fase quântica neste modelo de acordo com as referências [19, 20].

2.4 Resultados para o B-SIAM usando o NRG

O grupo de renormalização numérica (*NRG*), atualmente aceito como uma das melhores ferramentas no estudo de sistemas de impurezas correlacionadas, foi inicialmente proposto para estudar sistemas fermiônicos [39]. Além disso, sua versão bosônica [40] foi empregada para estudar o *B-SIAM* [19, 20]. Utilizando como critério o desaparecimento do *gap* de energia, quando a interação U é levada em conta no modelo hamiltoniano, determinou-se a transição

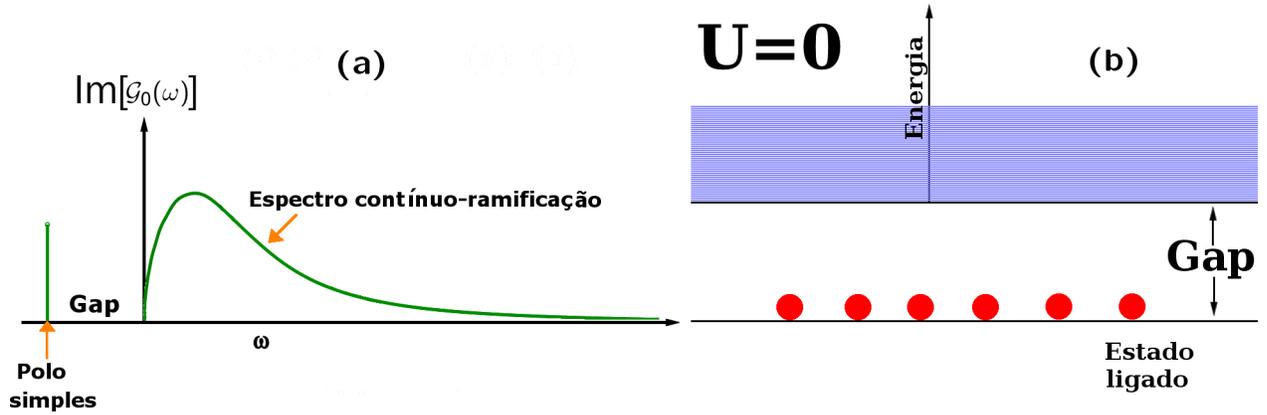


Figura 2.5 Critério do gap. (a) Parte imaginária da função de Green não interagente $\mathcal{G}_0(\omega)$ em função da frequência. (b) Gap de energia que há entre o estado ligado e o contínuo de energia.

de fase isolante de Mott-*BEC* no *B-SIAM*. A Fig. 2.6 mostra dois dos principais resultados obtidos nas referências [19, 20]. A mesma parametrização em lei de potências, para a função espectral discutida na seção anterior Eq. (2.23), foi empregada nessas referências.

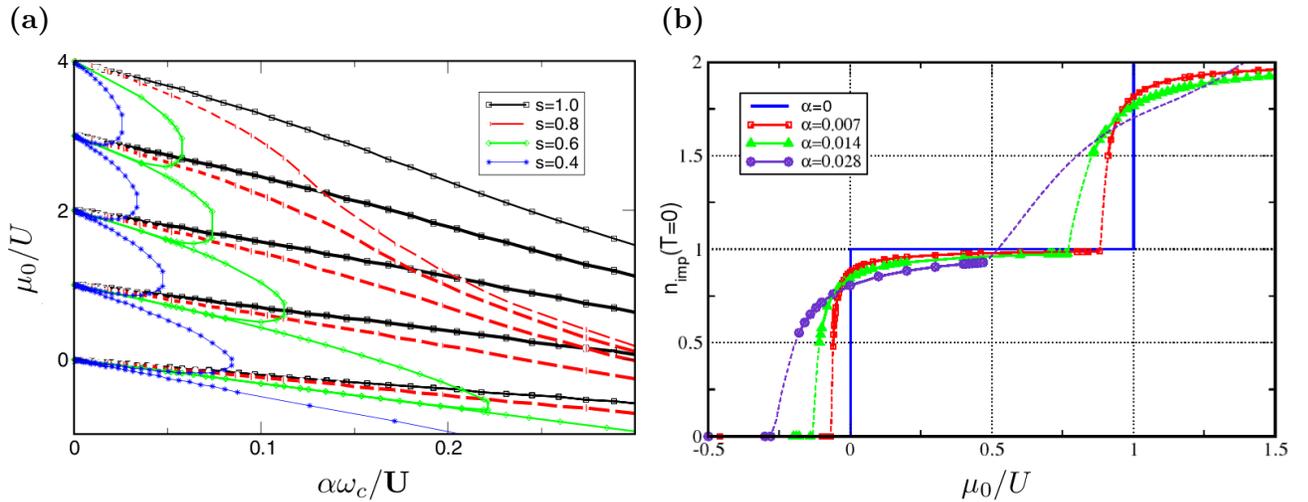


Figura 2.6 Resultados usando o *NRG* para o *B-SIAM* [19, 20]. (a) Diagrama de fases no plano $(\mu_0/U, \alpha\omega_c/U)$ para diferentes valores do expoente do banho s . (b) Ocupação da impureza como função de μ_0/U para um expoente do banho $s = 0.4$ e diferentes valores de $\alpha\omega_c/U$.

Na Fig. 2.6(a), mostra-se o diagrama de fases: no eixo vertical está a energia da impureza μ_0/U e no horizontal a constante de dissipação $\alpha\omega_c/U$. O diagrama de fases tem uma forma parecida com o modelo de Bose-Hubbard na rede: está formado por uma série de lóbulos de Mott, separados por linhas de pontos críticos da fase *BEC*. A dependência com o expoente s ,

do banho, mostra que estes lóbulos se estendem até o infinito para $s = 1$. Na Fig. 2.6(b), mostra-se a ocupação da impureza como função de μ/U para o expoente do banho $s = 0.4$. A linha azul $\alpha = 0$, é um limite trivial do modelo quando a impureza está completamente desacoplada do reservatório. Assim, a ocupação é simplesmente a função degrau, formando platôs característicos da fase Mott. Quando $U \neq 0$ os platos começam a deformar-se aparecendo a fase *BEC*. Na Fig. 2.6(b), os símbolos em todas as curvas da ocupação ($\alpha \neq 0$) correspondem a fase Mott, e as linhas contínuas à fase *BEC* do diagrama de fases correspondente.

A principal tarefa presente neste capítulo é estudar o *B-SIAM* utilizando o método de diagonalização exata, introduzindo pequenos campos que quebram a simetria de calibre do modelo.

2.5 Quebra espontânea de simetria

Nesta seção questiona-se a possibilidade de sinalizar a transição de fases utilizando o parâmetro superfluido $\langle b_0 \rangle$. Visando responder esta questão, pode-se introduzir um termo extra na parte local do hamiltoniano de impureza única. Vamos estudar inicialmente o caso não interagente ($U = 0$):

$$\hat{H} = -\mu_0 b_0^\dagger b_0 - \varphi(b_0^\dagger + b_0) + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}(b_{\mathbf{k}}^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_{\mathbf{k}}), \quad (2.27)$$

onde φ é um campo externo. O termo adicional $\varphi(b_0^\dagger + b_0)$ proposto neste trabalho quebra a simetria de calibre $H[e^{i\alpha} b_{\mathbf{k}}] = H[b_{\mathbf{k}}]$ presente no hamiltoniano acima. É demonstrado que esta quebra de simetria é condição necessária e suficiente para a existência do BEC [42]. Na linguagem matemática, podemos escrever:

$$\lim_{\varphi \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} |\langle b_0 \rangle|^2 \neq 0. \quad (2.28)$$

Isso significa que se tomamos os limites do número de partículas tendendo ao infinito, e posteriormente o campo externo φ tendendo a zero, o parâmetro superfluido é diferente de zero. Deve-se ressaltar que é necessário tomar os limites nessa ordem específica, do contrário $\langle b_0 \rangle$ não

será diferente de zero.

De acordo com os cálculos do apêndice C, a solução para o estado fundamental do hamiltoniano da Eq. (2.27) é um estado coerente,

$$|\Phi_0\rangle = e^{-S} |0\rangle, \quad (2.29)$$

onde,

$$S = \lambda(b_0^\dagger - b_0) + \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}}(b_{\mathbf{k}}^\dagger - b_{\mathbf{k}}). \quad (2.30)$$

Os parâmetros λ e η_n são reais e estão dados pelas expressões

$$\lambda = \frac{\varphi}{\mu_0 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}}, \quad \eta_{\mathbf{k}} = -\lambda \frac{V_{\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.31)$$

A expressão obtida para o valor esperado de b_0 tem a forma

$$\langle b_0 \rangle = -\lambda \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}}^2 \Gamma_{\mathbf{q}}, \quad \Gamma_{\mathbf{q}} = 1 - \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})}. \quad (2.32)$$

Dessa maneira $|\langle b_0 \rangle|^2 = \langle b_0^\dagger b_0 \rangle \propto N$ devido a $|\Phi_0\rangle$ ser um estado coerente (vide Apêndice C). Assim, quando o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) é aplicado à Eq. (2.28) a dependência em relação ao número de partículas desaparece. Ao tomar o outro limite ($\varphi \rightarrow 0$), resta um valor constante diferente de zero. Assim, a condição da Eq. (2.28) mostra a existência do *BEC*.

Um fato relevante é que o critério dado pela Eq. (2.28) é similar à condição de quebra de simetria em um ferromagneto de Ising. Tal analogia é descrita a seguir.

2.5.1 Analogia com o ferromagneto de Ising

O ferromagneto de Ising pode ser descrito pelo hamiltoniano

$$H_{ising} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1, \quad (2.33)$$

onde $J > 0$, é a constante de acoplamento entre os *spins* vizinhos, σ_i os operadores de *spin* de Pauli e h um campo magnético externo. Ressalta-se que na ausência de h , a magnetização é zero, pois os *spins* têm a mesma probabilidade de estarem orientados para cima ou para baixo. Assim, quando colocamos o campo externo, estamos quebrando a simetria de reversão temporal $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$, o que permite uma magnetização diferente de zero. Um ponto relevante é a existência de uma condição de quebra de simetria bem parecida com a do modelo de impureza única de Anderson.

$$\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle M \rangle_{N,h} \neq 0. \quad (2.34)$$

Aqui M é magnetização e N o tamanho de sistema. O gráfico da magnetização em função do campo externo h , é apresentado na Fig. 2.7. Mostram-se três valores de temperatura: $T_<$ (temperatura menor que a temperatura crítica T_c), um valor acima $T_>$, e T_c . Observe-se que a inclinação da curva aumenta, quando T aproxima-se da temperatura crítica. Em T_c , M vai continuamente a zero, indicando que a transição é de segunda ordem.

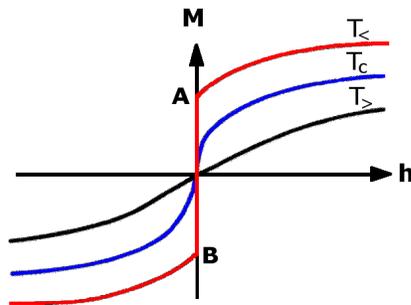


Figura 2.7 Magnetização em função do campo externo h em um ferromagneto de Ising. M é mostrada para temperaturas igual à temperatura crítica T_c , menores que T_c ($T_<$), e maiores que T_c ($T_>$) [25].

Vejamos agora que acontece no modelo de impureza única, quando levamos em conta os efeitos da interação U entre os bósons, estudados utilizando o método de diagonalização exata.

2.6 O método de diagonalização exata

Escrevendo-se novamente o hamiltoniano na geometria estrela, mas agora para um número fixo de sítios (N_s) e levando em conta o termo de quebra de simetria, temos:

$$H = -\mu_0 b_0^\dagger b_0 + \frac{U}{2} b_0^\dagger b_0 (b_0^\dagger b_0 - 1) + \sum_{n=1}^{N_s} \varepsilon_n b_n^\dagger b_n + \sum_{n=1}^{N_s} V_n (b_n^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_n) + \varphi \sum_{n=0}^{N_s} (b_n^\dagger + b_n) \quad (2.35)$$

É importante ressaltar que existe uma quantidade conservada no hamiltoniano acima na ausência do campo externo φ , a soma do número total de partículas N_b ,

$$N_b = \sum_{n=0}^{N_s} b_n^\dagger b_n \leq N_{max}. \quad (2.36)$$

Na linguagem matemática, isso significa que a grandeza acima comuta com o hamiltoniano (quando $\varphi = 0$), sendo limitada pela cota superior no número de partículas N_{max} na presença do termo extra. Assim a idéia proposta neste trabalho é diagonalizar H usando o ensemble grande canônico para um número fixo de N_s e N_{max} .

Outro ponto importante é determinar os parâmetros do banho $\{\varepsilon_n, V_n\}$. Estes podem ser encontrados da Eq. (2.22), assim:

$$V_n^2 = \int_{a(n)}^{b(n)} dx \frac{\Delta_0(x)}{\pi}, \quad \varepsilon_n = V_n^{-2} \int_{a(n)}^{b(n)} dx \frac{\Delta_0(x)}{\pi}. \quad (2.37)$$

Os limites de integração $a(n)$ e $b(n)$ constituem um intervalo que contém as energias ε_n do banho. Assim, da parametrização proposta para $\Delta_0(\omega)$ (Eq. (2.23)), obtemos:

$$V_n^2 = \frac{2\alpha\omega_c^{1-s}}{s+1} (b(n)^{s+1} - a(n)^{s+1}), \quad n = 1, 2, \dots, N_s \quad (2.38)$$

$$\varepsilon_n = \frac{2\alpha\omega_c^{1-s}}{s+2} (b(n)^{s+2} - a(n)^{s+2}) \frac{1}{V_n^2}, \quad (2.39)$$

Como já destacado, neste trabalho há grande interesse em fenômenos de baixas energias. Dessa maneira, a escolha da discretização $(a(n), b(n))$ torna-se bastante sutil, devendo permitir que

modos de frequência $\omega \rightarrow 0$, possam ser tratados.

A seguinte discretização é proposta:

$$\begin{aligned} a(n) &= (N_s - n)\Lambda^{-n}\delta, \\ b(n) &= (N_s + 1 - n)\Lambda^{-(n-1)}\delta \end{aligned} \quad (2.40)$$

onde, $\delta = \omega_c/N_s$ e Λ é o parâmetro característico da discretização do método de renormalização numérica (NRG) [39].

Essa discretização é um pouco diferente da utilizada no método NRG, $[\Lambda^{-n}\omega_c, \Lambda^{-(n-1)}\omega_c]$. Observe-se também, quando o número de sítios (N_s) aumenta, temos uma melhor aproximação do modo de frequência zero na discretização proposta na Eq. (2.40) (ver Fig. 2.8). Além disso, no limite $\Lambda = 1$, pode-se recuperar exatamente a discretização linear. No entanto, ao utilizar $\Lambda = 1$ na discretização logarítmica, obtêm-se $V_n \rightarrow 0$ e $\varepsilon_n \rightarrow \infty$. Em todos cálculos foram utilizados os parâmetros $\Lambda = 2$ e $\omega_c = 1$.

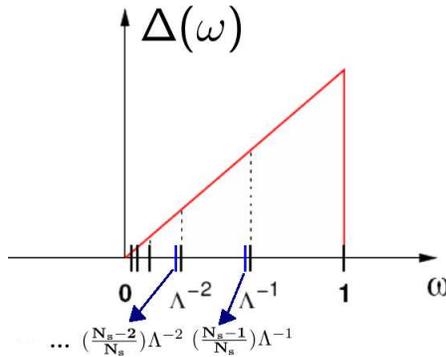


Figura 2.8 Comparação entre a discretizações para a função espectral do método *NRG* [20] e a proposta na Eq. (2.40). Nota-se que quando N_s aumenta, a discretização utilizada no presente trabalho (linhas azuis) descrita pela Eq. (2.40) aproxima-se mais rápido ao modo de frequência zero em relação com a discretização do *NRG* (linhas de cor preto).

2.6.1 Parâmetro superfluido

Escolhendo o valor $\alpha\omega_c/U = 0.0625$, traçamos o gráfico do parâmetro superfluido em função do campo externo φ . Na Fig. 2.9(a) apresenta-se $\langle b_0 \rangle$ para três valores da energia da impureza,

$\mu_0/U = 0$ na fase Mott, $\mu_0/U = -0.21$ na fronteira entre as fases e $\mu_0/U = -0.25$ dentro da fase *BEC*. A Fig. 2.9(b) mostra uma linha de cor marrom, indicando a parte do digrama onde estão os três pontos escolhidos para a análise.

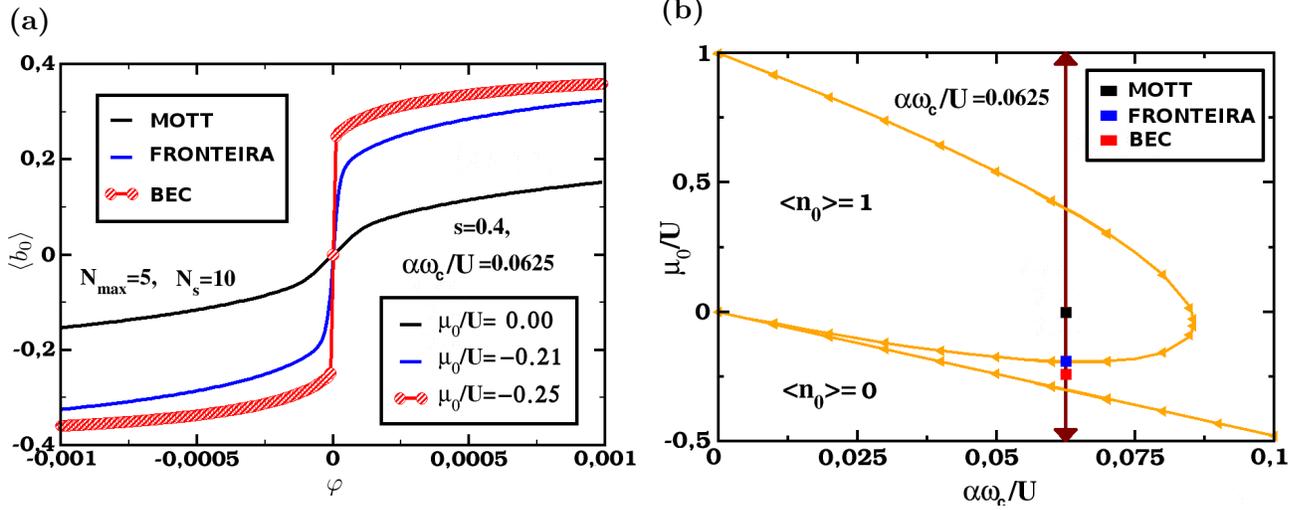


Figura 2.9 Quebra espontânea de simetria no B-SIAM. (a) Parâmetro superfluido como função do campo externo φ para $\mu_0/U = 0$ na fase Mott, $\mu_0/U = -0.21$, na fronteira entre as fases e $\mu_0/U = -0.25$ na fase *BEC*. (b) Diagrama de fases mostrando os lóbulos de Mott com ocupação 0 e 1. A linha vertical de cor marrom, indica o ponto $\alpha\omega_c/U = 0.0625$, no qual calcula-se $\langle b_0 \rangle$.

A inclinação da curva (Fig. 2.9(a)) aumenta quando desloca-se do ponto μ_0/U dentro da fase Mott ao ponto de μ_0/U na fase *BEC*. Daí se nota a semelhança com o caso do ferromagneto. A transição de fase, também como no caso Ising, é de segunda ordem. O parâmetro $\langle b_0 \rangle$ tende continuamente a zero no ponto crítico e tem um salto abrupto na fase *BEC*.

Dessa maneira, tem-se um critério (critério de quebra de simetria) para identificar a transição de fases no modelo de impureza bosônica. Na seção a seguir, será construído o diagrama de fases do modelo usando o critério de quebra de simetria.

2.7 Diagrama de fases

Usando o critério de quebra de simetria, Eq. (2.28), foi construído o digrama de fases, mostrado na Fig. 2.10, que apresenta a energia da impureza μ_0/U como função da constante de dissipação $\alpha\omega_c/U$. A curva de cor laranja corresponde ao diagrama calculado usando o método de diagonalização exata. A curva de cor azul com símbolos corresponde ao calculado usando

o *NRG* [19, 20]. Os parâmetros utilizados no cálculo foram, $U/\omega_c = 0.5$ para a constante de interação e $s = 0.4$ para o expoente do banho.

Observa-se que o diagrama de fases está constituído por uma série de lóbulos de Mott. Neste caso são apresentados os dois primeiros lóbulos de Mott, com ocupações 1 e 2, além da seção do digrama com ocupação zero ($\langle n_0 \rangle = 0$). Os lóbulos de Mott são separados da fase *BEC* por linhas de pontos críticos onde o parâmetro de ordem é zero. Notamos que para $\alpha\omega_c/U$ pequenos, a fase Mott é favorecida. Em caso contrário, quando α é incrementado, os procesos de *hopping* entre a impureza e o reservatório ($V_{\mathbf{k}} \neq 0$ no hamiltoniano) são favorecidos. Isto dá preferência à ocupação macroscópica do estado fundamental, que caracteriza a fase *BEC*.

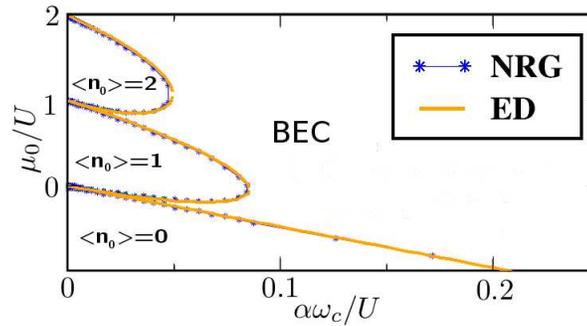


Figura 2.10 Diagrama de fases para o modelo de impureza única para bósons. As linhas de cor azul com símbolos correspondem ao diagrama de fases determinado usando o *NRG* [19]. As linhas de cor laranja foram determinadas usando o método de diagonalização exata. Os valores usados no cálculo foram $s = 0.4$ e $U/\omega_c = 0.5$.

Outra grandeza que pode ser utilizada para sinalizar a transição de fase é a susceptibilidade local, como veremos a seguir.

2.7.1 Susceptibilidade

Voltando à analogia com o ferromagneto de Ising, onde a susceptibilidade é $\frac{\partial M}{\partial h}$. Defina-se a susceptibilidade local para o modelo de única impureza como:

$$\chi = \lim_{\varphi \rightarrow 0} \frac{\partial |\langle b_0 \rangle|}{\partial \varphi}. \quad (2.41)$$

Na Fig. 2.11 apresenta-se o inverso da susceptibilidade $1/\chi$ em função do $1/N_{max}$. O valor $\mu_0/U = 0$ está dentro da fase Mott, e $\mu_0/U = -0.21$ corresponde ao ponto da fronteira do

diagrama de fases. Os símbolos pretos na Fig. 2.11 correspondem ao ponto μ_0/U na fase Mott. Observe que neste caso $1/\chi$ tende a um valor constante, com o aumento do N_{max} . Esse comportamento de χ na fase Mott é esperado, devido ao parâmetro superfluido variar linearmente com o campo externo φ (Fig. 2.9(a)) no limite $\varphi \rightarrow 0$.

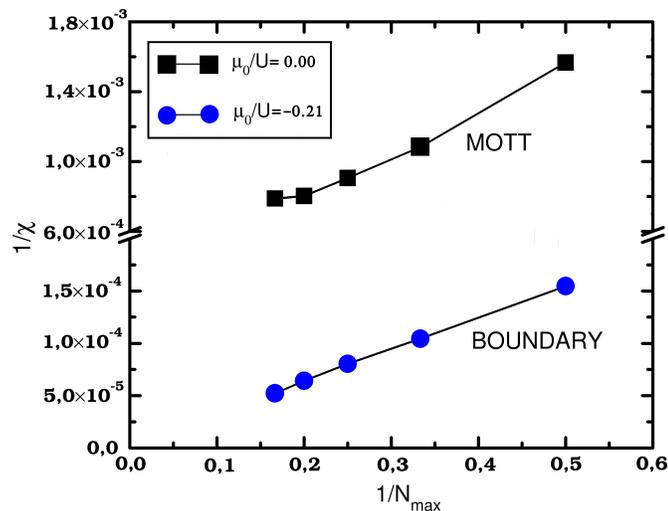


Figura 2.11 Susceptibilidade em função de $1/N_{max}$. O valor de $\mu_0/U = 0$ está dentro da fase Mott, e $\mu_0/U = -0,21$ esta na fronteira do diagrama de fases. O valor usado para a constante de dissipação no cálculo foi $\alpha\omega_c/U = 0,0625$.

No entanto para o valor de μ_0/U na borda do digrama de fase (Fig. 2.11), o inverso da susceptibilidade tende a zero quando N_{max} aumenta. Tal comportamento é mostrado pela linha com símbolos azuis da Fig. 2.11. Aqui há outra característica de uma transição de fase de segunda ordem, que é assinalada pela divergência da susceptibilidade.

2.7.2 Outros observáveis

A ocupação da impureza $n_{imp} = \langle n_0 \rangle$, calculada no estado fundamental, é mostrada na Fig. 2.12 para diferentes valores dos parâmetros $\alpha\omega_c/U$. Aqui, comparamos os resultados obtidos neste trabalho com os obtidos na referência [19]. Observa-se que há uma boa concordância dos resultados obtidos para essa grandeza ao comparar os dois métodos.

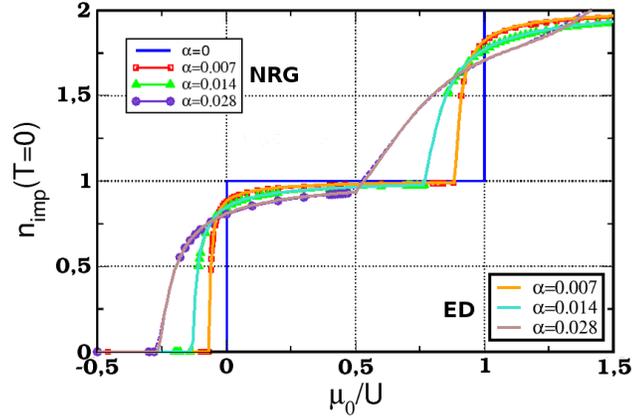


Figura 2.12 Ocupação da impureza como função de μ_0/U . Comparação entre os métodos *NRG* [19] e diagonalização exata para as diferentes curvas de $\alpha\omega_c/U$. No limite $\alpha = 0$ a impureza está completamente desacoplada do reservatório.

Na Fig. 2.13(a) mostra-se a ocupação da impureza $\langle n_0 \rangle$, junto com $10 \times |\langle b_0 \rangle|^2$ em função de μ_0/U . Note-se que o valor de $\varphi/\omega_c \sim 10^{-6}$ é pequeno, pois esta grandeza só pode ser definida nos limites $N_{max} \rightarrow \infty$ e $\varphi \rightarrow 0$. Como já havia sido discutido, vê-se que o parâmetro superfluido é diferente de zero na fase *BEC*, e zero na fase Mott, como é mostrado na Fig. 2.13(a). O diagrama de fases ao lado (Fig. 2.13(b)) mostra a linha $\alpha\omega_c/U$ utilizada para o cálculo. Os símbolos na curva da ocupação estão dentro da fase Mott, enquanto as linhas contínuas correspondem a pontos dentro da fase *BEC*.

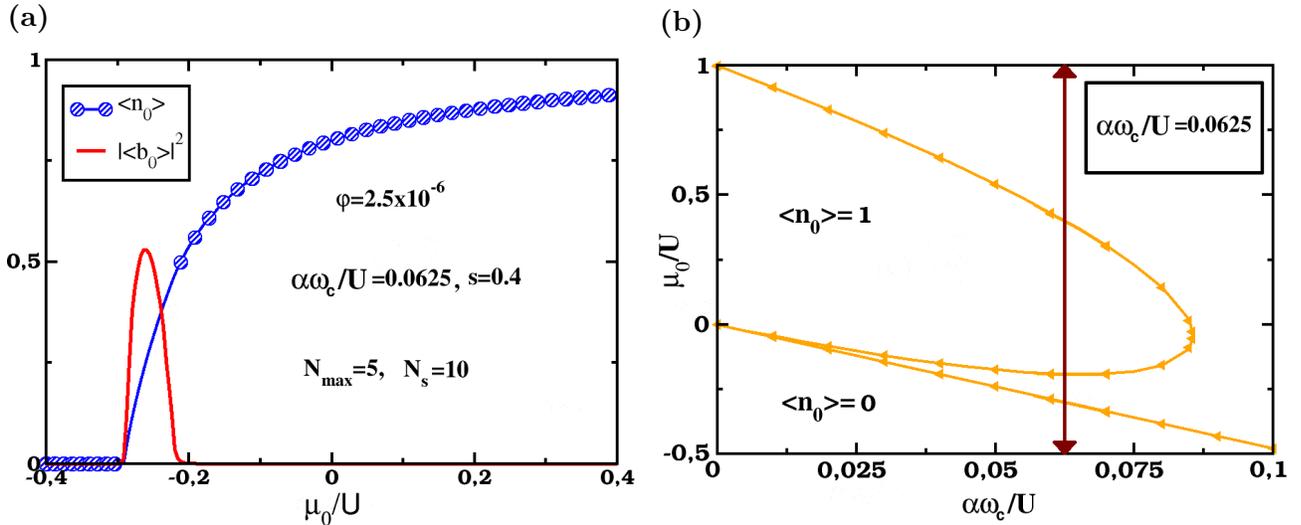


Figura 2.13 (a) Ocupação da impureza e o parâmetro superfluido para um valor pequeno de φ/ω . (b) Diagrama de fases mostrando a linha de $\alpha\omega_c/U$ que corresponde ao cálculo de $\langle n_0 \rangle$ e $\langle b_0 \rangle$.

O desvio padrão da ocupação da impureza $\Delta n_0 = \sqrt{\langle n_0^2 \rangle - \langle n_0 \rangle^2}$ é mostrado na Fig. 2.14(a) no plano $(\mu_0/U, \alpha\omega_c/U)$ em uma escala de cores. Note-se que ela é pequena para valores pequenos de $\alpha\omega_c/U$ (cor azul na escala de cores), pois neste caso são desfavorecidos os processos de hibridização da impureza com o banho. Δn_0 , alcança o máximo valor para pontos $\alpha\omega_c/U$ dentro da fase *BEC*. Na Fig. 2.14(b), Δn_0 é traçada para três valores de $\alpha\omega_c/U$ em função de μ_0/U . Observe-se que Δn_0 tem um salto abrupto nos pontos da transição, onde ela alcança o maior valor quando μ_0/U muda da fase isolante de Mott à fase *BEC*, e para pontos μ_0/U dentro da fase Mott começa a diminuir.

Numericamente, atingir os limites da expressão de quebra de simetria Eq. (2.28), torna-se um problema complexo. Tal perspectiva será discutida mais detalhadamente na próxima seção.

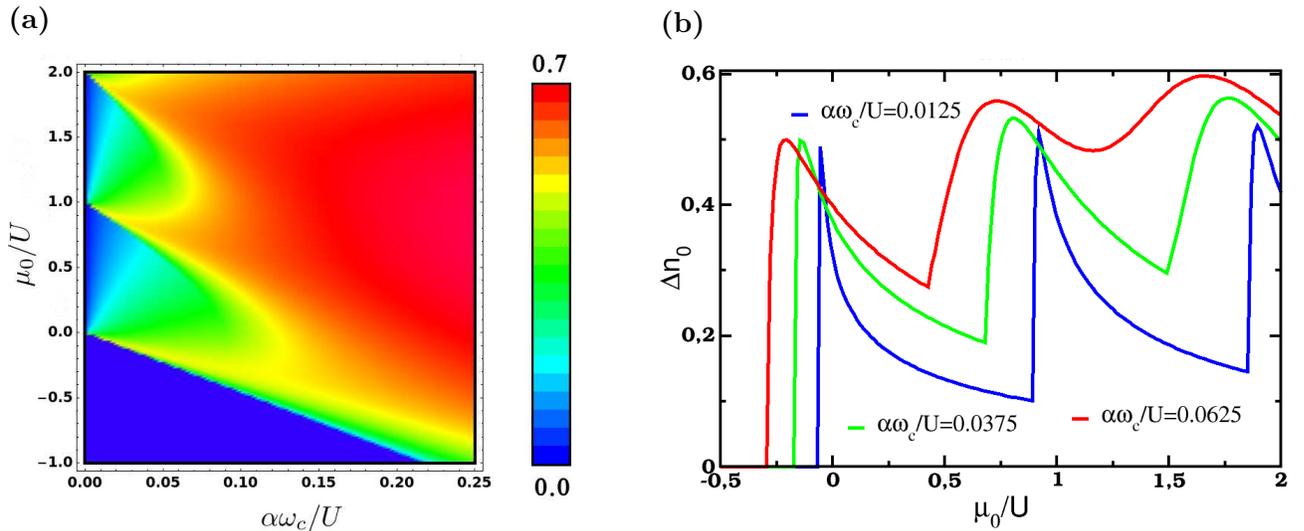


Figura 2.14 Desvio padrão da ocupação da impureza. (a) Δn_0 mostrado no plano $(\mu_0/U, \alpha\omega_c/U)$ em uma escala de cores. (b) Δn_0 como função de μ_0/U para três valores diferentes de $\alpha\omega_c/U$. Os parâmetros utilizados no cálculo foram $N_{max} = 5$ e $N_s = 10$.

2.8 Limitações do método

Nesta seção exploram-se as limitações do método de diagonalização exata estudando a dependência do parâmetro superfluido com o *cutoff* no número de partículas N_{max} . Inicia-se fixando um valor pequeno do campo externo ($\varphi/\omega_c \sim 10^{-6}$) e plota-se $|\langle b_0 \rangle|^2$ em função de μ_0/U (ver Fig. 2.15(a)). Como é esperado, $\langle b_0 \rangle$ é zero na fase Mott e diferente de zero no *BEC*. Na Fig. 2.15(b), apresenta-se o parâmetro superfluido com um intervalo maior de μ_0/U em

relação à do lado esquerdo, e para outros valores de N_{max} .

Nota-se que para $N_{max} = 2, 3$, $\langle b_0 \rangle$ apresenta vales para valores de μ_0/U dentro da fase *BEC*, entanto para $N_{max} = 4, 5$ os vales começam a sumir descrevendo corretamente a fase *BEC*. Mas para valores da energia da impureza acima de $\mu_0/U \sim 0.3$ observa-se que o parâmetro superfluido diminui para todos os valores de N_{max} considerados em uma região que corresponde novamente à fase *BEC*. Tal comportamento significa que é preciso aumentar ainda mais o parâmetro N_{max} para termos uma boa descrição nessa faixa de valores de N_{max} .

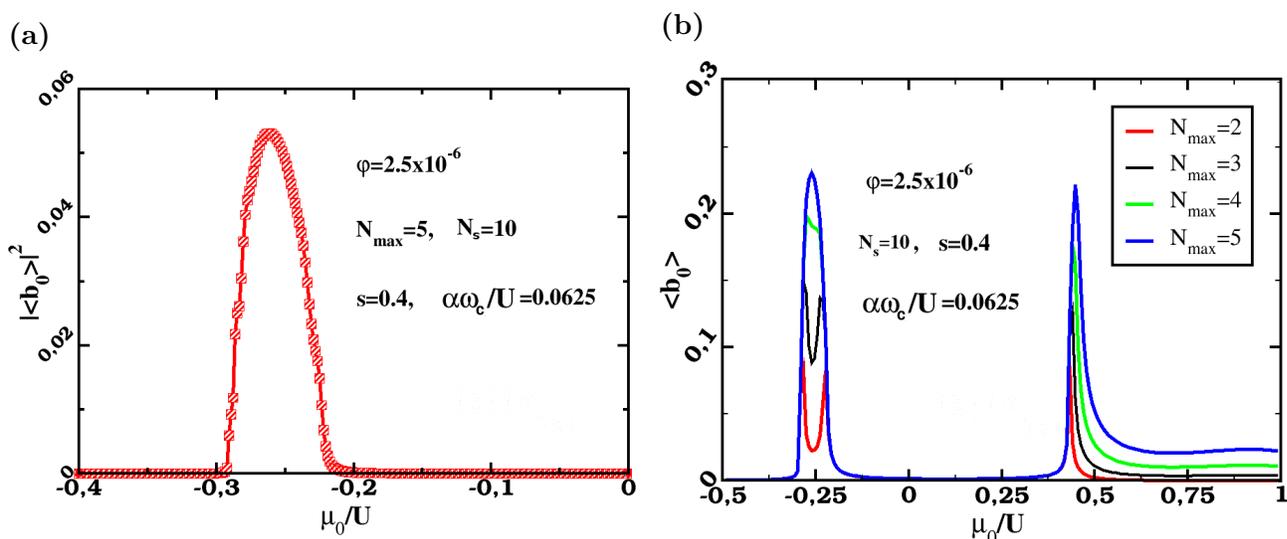


Figura 2.15 Efeitos de tamanho finito: (a) $|\langle b_0 \rangle|^2$ como função de μ_0/U . (b) Dependência do parâmetro superfluido com N_{max} .

Assim, ao fixar um valor pequeno de φ/ω_c , deve-se ter cautela com a escolha de N_{max} . Este deve ser grande o suficiente para que $\langle b_0 \rangle$ não diminua na fase *BEC*. Deve-se lembrar também que o procedimento correto é fazer o limite da Eq. (2.28) na ordem inversa, fixando um N_{max} e extrapolando o limite de $\varphi/\omega_c \rightarrow 0$, como foi discutido nas seções anteriores.

2.9 Conclusões

Mostrou-se que é possível sinalizar a transição de fase quântica isolante de Mott-*BEC* no modelo de impureza única de Anderson, usando a grandeza $\langle b_0 \rangle$ como parâmetro de ordem. Isso foi feito introduzindo pequenos campos externos, quebrando a simetria de calibre presente no hamiltoniano do modelo. Alguns dos resultados obtidos foram comparadas com os reportados

nas referências [19, 20], mostrando-se uma boa concordância. A transição de fase quântica observada neste modelo ainda não tem comprovação experimental. Isso gera um grande desafio para testar os resultados do presente trabalho com eventuais experiências que poderão ser realizados.

Tópicos que podem ser de interesse envolvem considerar a inclusão de outros termos na hamiltoniana do modelo. Por exemplo, termos de hibridização tipo $\int \Lambda(\mathbf{x})d\mathbf{x} \left(\Psi_A^\dagger(\mathbf{x})\Psi_B^\dagger(\mathbf{x}) + h.c \right)$, que são parâmetros de hibridização anômalos envolvendo processos de criação e destruição de bósons simultâneos na impureza e no reservatório.

Também é possível levar em conta termos de interação tipo densidade-densidade entre os bósons na impureza e no reservatório [17], $\int d\mathbf{x}d\mathbf{x}' \widehat{\Psi}_A^\dagger(\mathbf{x})\widehat{\Psi}_B^\dagger(\mathbf{x}')V_{AB}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\widehat{\Psi}_B(\mathbf{x}')\widehat{\Psi}_A(\mathbf{x})$, onde $V_{AB}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ é o potencial de interação. Se o potencial for positivo a fase Mott é favorecida, pois estes processos tendem a localizar as partículas da impureza pelas interações. Porém, se forem levadas em conta os outros termos anômalos discutidos linhas antes, seria um modelo de impureza generalizado, e apresentaria um desafio teórico maior.

Considerando que os efeitos de temperatura (T) mudam o digrama de fase do B -SIAM, outro tópico de interesse seria inclusão de T finito para estudar a termodinâmica nesses modelos de impureza.

3

Efeitos de Desordem na Transição Superfluido-Isolante de Mott

3.1 Introdução

Na compreensão de problemas mais realistas da natureza é inevitável levar em consideração os efeitos da desordem. Esse novo ingrediente além de estar intrinsecamente presente em alguns materiais pode ser introduzido externamente através de um potencial aleatório como no caso de gases atômicos ultra frios. Existem muitas realizações experimentais da adição de desordem em redes ópticas. Recentemente o grupo de B. DeMarco [43, 44] utilizando combinações de um campo óptico *speckle* e uma rede óptica 3D, exploraram o modelo de Bose-Hubbard desordenado (*DBHM*), do inglês *disordered Bose Hubbard model*. A intensidade da desordem era continuamente ajustada através do controle da intensidade do campo *speckle*, e as propriedades estatísticas induzidas pela desordem foram determinadas pelas distribuições dos parâmetros do modelo [43, 44]. Vale destacar que este foi o primeiro trabalho a explorar experimentalmente o regime de interações fortes e desordem no *DBHM*.

O efeito de desordem pode levar ao aparecimento de novas fases quânticas. No caso do *DBHM* surge uma nova fase, chamada fase de vidro de Bose (*BG*). Nessa fase o parâmetro de ordem (parâmetro superfluido) é zero, e para distingui-la das fases superfluido e isolante de Mott também presentes no modelo, usa-se a compressibilidade, devido que na fase isolante de Mott a ocupação média por sítio é constante a mudanças no potencial químico, portanto a compressibilidade é nula; entretanto na fase *BG* existe flutuação no número de partículas, dando lugar a uma compressibilidade finita [14].

Do ponto de vista teórico o *DBHM* tem sido estudado utilizando uma grande variedade de métodos numéricos e analíticos, tais como Monte Carlo quântico [45–51], diagonalização exata [52–54], grupo de renormalização [55], grupo de renormalização para a matriz densidade [56], e aproximações de campo médio [14, 15, 57–64].

Recentemente foi proposta a teoria estocástica de campo médio (*SMFT*) [33, 34] para estudar os efeitos da desordem no modelo de Bose-Hubbard. Essa teoria mapeia o hamiltoniano de Bose-Hubbard desordenado no problema efetivo de um sítio acoplado a um banho de parâmetros de ordem de campo médio desordenados (ver Fig. 3.1). O objetivo fundamental dessa teoria é determinar uma função de distribuição de probabilidade $P(\psi)$ (onde ψ são os parâmetros de ordem de campo médio) de maneira auto-consistente.

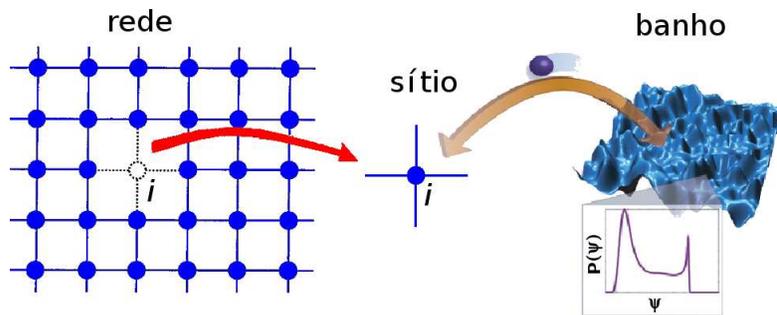


Figura 3.1 Teoria estocástica de campo médio. O modelo de Bose-Hubbard de múltiplos sítios é reduzido ao problema efetivo de um sítio imerso em um banho de parâmetros desordenados de campo médio. A distribuição de probabilidade $P(\psi)$ descreve os efeitos da desordem nos parâmetros de ordem e deve ser determinada de forma auto-consistente [33, 34].

Neste capítulo será feito um cálculo analítico da equação de auto-consistência que resulta na *SMFT*. Inicialmente será introduzido o modelo de Bose-Hubbard desordenado e em seguida determinaremos a equação de auto-consistência para a distribuição de probabilidade $P(\psi)$ que define a teoria estocástica de campo médio. Posteriormente analisa-se o comportamento da distribuição $P(\psi)$ perto da região crítica da transição de fase desde um ponto de vista numérico. Assim, em uma região dos parâmetros ψ , propõe-se uma solução da equação de auto-consistência da *SMFT*, para logo determinar de forma analítica o digrama de fases.

3.2 Hamiltoniano do modelo

Além do potencial $V_0(\mathbf{x})$ da rede óptica utilizado para confinar os átomos no modelo de Bose-Hubbard (veja seção 1.1), é possível acrescentar outro potencial $V_\Delta(\mathbf{x})$ que contenha os efeitos de desordem. Assim, esse novo potencial pode ser introduzido no termo que envolve as energias dos sítios (seção 1.1),

$$\epsilon_i = \int d\mathbf{x} w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) V_\Delta(\mathbf{x}) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad (3.1)$$

onde $w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ são as funções de Wannier.

O modelo de Bose-Hubbard desordenado pode ser escrito como:

$$\mathcal{H}_{BH} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + \sum_i (\epsilon_i - \mu) a_i^\dagger a_i + \frac{U}{2} \sum_i a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i. \quad (3.2)$$

As energias ϵ_i , que contém os efeitos da desordem, podem ser parametrizadas de diferentes maneiras. Uma delas é através de uma distribuição de probabilidade uniforme (Fig. 3.2),

$$p(\epsilon) = \frac{1}{\Delta} \Theta(\Delta/2 - |\epsilon|), \quad (3.3)$$

onde $\Theta(x)$ é a função de grau de Heaviside. Essa distribuição tem uma densidade de probabilidade constante $1/\Delta$ no intervalo $-\Delta/2 \leq \epsilon \leq \Delta/2$, e é zero nos outros casos. Existem também outras formas de distribuições de probabilidade utilizadas na parametrização de desordem: essas podem ser gaussianas, binárias ou exponenciais [34]. Quando os efeitos de desordem são parametrizados através das energias ϵ_i dos sítios do hamiltoniano (Eq. (3.2)), temos o que chamamos de desordem diagonal. Porém esses também podem ser considerados no termo de *hopping*, t , o que é chamado de desordem não diagonal.

No presente estudo são considerados apenas efeitos de desordem diagonal contidos nas energias ϵ_i , que seguem uma distribuição uniforme.

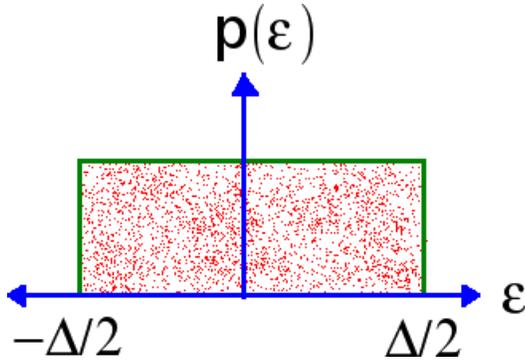


Figura 3.2 Função de densidade de probabilidades uniforme, $p(\epsilon)$ é constante no intervalo $-\Delta/2 \leq \epsilon \leq \Delta/2$ e zero nos outros casos.

3.3 Teoria Estocástica de Campo Médio

A *SMFT* [33, 34], é baseada na função de densidade de probabilidade $P(\psi)$, onde ψ é o parâmetro de ordem. Assim, essa teoria tem como objetivo fundamental fazer uma amostragem dos parâmetros de campo médio desordenados $\psi_i = \langle a_i \rangle$, através da distribuição $P(\psi)$, a ser determinada auto-consistentemente.

Começa-se reduzindo o hamiltoniano de Bose-Hubbard da rede (Eq. (3.2)) ao hamiltoniano efetivo de um sítio através da transformação de campo médio $a_i = \psi_i + \tilde{a}_i$, onde $\psi_i = \langle a_i \rangle$ (seção 1.1).

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{MF}^{(i)} &= -t \sum_{n.n.j} (\psi_j a_i^\dagger + \psi_j^* a_i - \psi_j^* \psi_i) + (\epsilon_i - \mu) a_i^\dagger a_i + \frac{U}{2} a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i \\ &= -(\eta a_i^\dagger + \eta^* a_i - \psi_i \eta^*) + (\epsilon_i - \mu) a_i^\dagger a_i + \frac{U}{2} a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i; \quad \eta = t \sum_{n.n.j=1}^Z \psi_j. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Observe-se que o hamiltoniano acima depende da grandeza η , que por sua vez também depende da solução do estado fundamental do mesmo hamiltoniano através dos parâmetros $\psi_j = \langle a_j \rangle$. Assim, fica evidente que a solução envolve um processo de auto-consistência. Deve-se notar que podemos tomar $\psi > 0$ sem perda de generalidade. Vale comentar que o problema definido pelo hamiltoniano efetivo (Eq. (3.4)) ao contraio do caso, é diferente para sítio, pois as energias ϵ_i

são diferentes, e devido ao parâmetro η cada sítio “ve” um banho diferente.

Defina-se a função de distribuição de probabilidade $Q(\eta)$, onde $\eta = t \sum_{n,n,j=1}^Z \psi_j$, como uma convolução de funções $P(\psi_i)$ através da relação:

$$Q(\eta) = \int_0^\infty d\psi_1 \int_0^\infty d\psi_2 \dots \int_0^\infty d\psi_Z P(\psi_1)P(\psi_2)\dots P(\psi_Z) \delta(\eta - t \sum_{m=1}^Z \psi_m). \quad (3.5)$$

Tomando a transformada de Laplace da equação acima, resulta,

$$\mathcal{Q}(s) = \int_0^\infty d\eta e^{-s\eta} Q(\eta) \quad (3.6)$$

$$= \int_0^\infty d\eta \left[\int_0^\infty d\psi_1 \int_0^\infty d\psi_2 \dots \int_0^\infty d\psi_Z P(\psi_1)P(\psi_2)\dots P(\psi_Z) \delta(\eta - t \sum_{m=1}^Z \psi_m) \right] e^{-s\eta}. \quad (3.7)$$

Usando a propriedade,

$$\int_0^\infty d\eta e^{-s\eta} \delta(\eta - t \sum_{m=1}^Z \psi_m) = e^{-ts(\psi_1 + \psi_2 + \dots + \psi_Z)}, \quad (3.8)$$

obtemos,

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(s) &= \int_0^\infty d\psi_1 \int_0^\infty d\psi_2 \dots \int_0^\infty d\psi_Z P(\psi_1)P(\psi_2)\dots P(\psi_Z) e^{-ts(\psi_1 + \psi_2 + \dots + \psi_Z)} \\ &= \int_0^\infty d\psi_1 P(\psi_1) e^{-ts\psi_1} \int_0^\infty d\psi_2 P(\psi_2) e^{-ts\psi_2} \dots \int_0^\infty d\psi_Z P(\psi_Z) e^{-ts\psi_Z}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Utilizando a definição de transformada de Laplace para $P(\psi)$,

$$\int_0^\infty d\psi P(\psi) e^{-s\psi} = \mathcal{P}(s), \quad (3.10)$$

encontra-se para $\mathcal{Q}(s)$ a expressão:

$$\mathcal{Q}(s) = [\mathcal{P}(ts)]^Z. \quad (3.11)$$

A *SMFT* é definida pela condição de auto-consistência [33, 34],

$$\int_0^\infty d\eta Q(\eta) \bar{P}_\eta(\psi) = P(\psi). \quad (3.12)$$

onde $\bar{P}_\eta(\psi) = \bar{P}(\psi|\eta)$, é a distribuição de probabilidade condicional dos parâmetros ψ conhecidos os parâmetros η . Assim,

$$\bar{P}_\eta(\psi) = \int d\epsilon p(\epsilon) \delta[\psi - \langle GS(\epsilon, U, \eta) | a | GS(\epsilon, U, \eta) \rangle], \quad (3.13)$$

e $|GS(\epsilon, \eta)\rangle$ é o estado fundamental do hamiltoniano efetivo de um sítio,

$$\mathcal{H} = -\eta(a^\dagger + a) + (\epsilon - \mu)a^\dagger a + \frac{U}{2}a^\dagger a^\dagger a a. \quad (3.14)$$

Agora, como $Q(\eta)$ é a transformada inversa de Laplace de \mathcal{Q} , ou seja,

$$Q(\eta) = \mathcal{L}^{-1}\{\mathcal{Q}(s)\}, \quad \mathcal{Q}(s) = \left[\int_0^\infty d\psi P(\psi) e^{-s\psi} \right]^Z. \quad (3.15)$$

Podemos escrever a equação da auto-consistência (Eq. (3.12)) para $P(\psi)$ na forma:

$$P(\psi) = \int_0^\infty d\eta \mathcal{L}^{-1} \left\{ \left[\int_0^\infty d\psi P(\psi) e^{-s\psi} \right]^Z \right\} \int d\epsilon p(\epsilon) \delta[\psi - g(\epsilon, U, \eta)]. \quad (3.16)$$

onde

$$g(\epsilon, U, \eta) = \langle GS(\epsilon, U, \eta) | a | GS(\epsilon, U, \eta) \rangle. \quad (3.17)$$

Um algoritmo de solução da Eq. (3.16) é apresentado a seguir.

3.3.1 Algoritmo de solução da *SMFT*

Uma das formas pela qual pode ser implementado o ciclo de auto-consistência na *SMFT* está apresentado na Fig. 3.3:

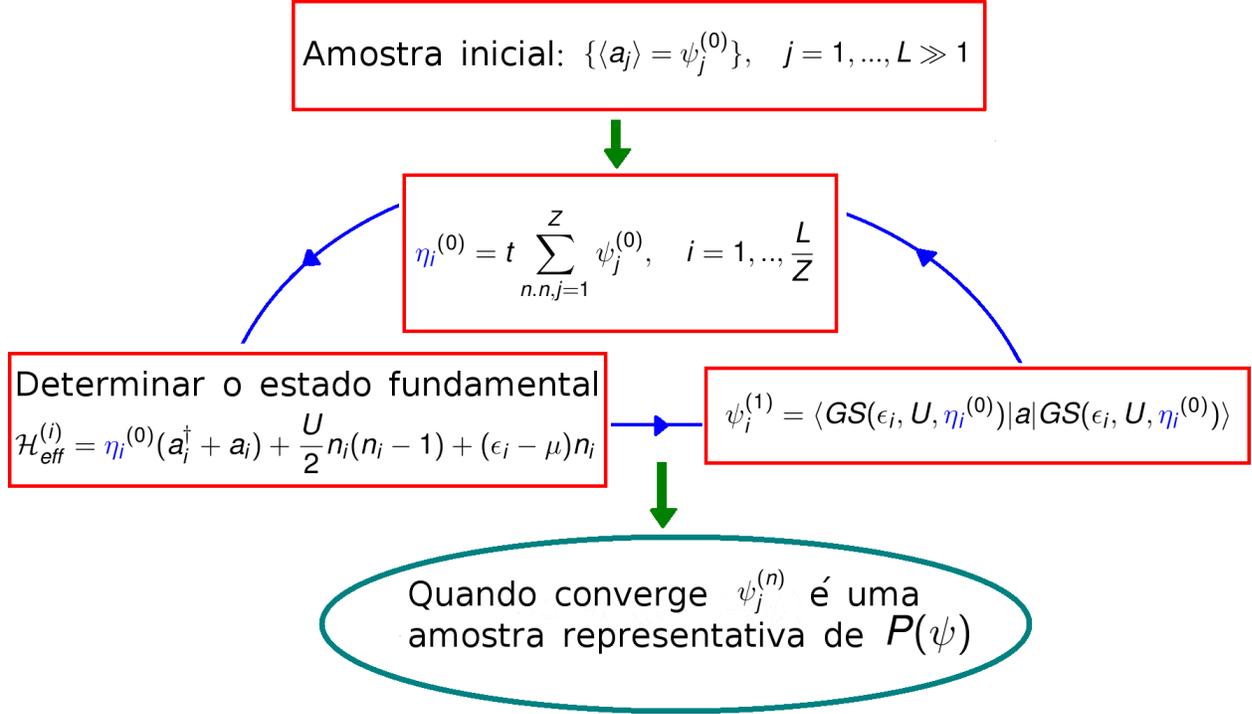


Figura 3.3 Ciclo de auto-consistência da teoria estocástica de campo médio.

1. Começa-se por uma estimativa inicial para os parâmetros de campo médio $\psi_i^{(0)}$, $i = 1, \dots, L \gg 1$, onde L é uma amostra finita dos parâmetros de ordem.
2. Posteriormente os parâmetros $\eta_i^{(0)} = t \sum_j \psi_j^{(0)}$ são determinados através da estimativa inicial $\psi_i^{(0)}$.
3. Conhecidos os parâmetros $\eta_i^{(0)}$, pode-se diagonalizar o hamiltoniano efetivo,

$$\mathcal{H}_{eff}^{(i)} = -\eta_i^{(0)}(a_i^\dagger + a_i) + (\epsilon_i - \mu)a_i^\dagger a_i + \frac{U}{2} a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i; \quad \eta_i^{(0)} = t \sum_{n.n., j=1}^Z \psi_j^{(0)},$$

para valores aleatórios de ϵ_i obtidos a partir de $p(\epsilon)$. Assim, a grandeza $\psi_i^{(1)} = \langle a_i \rangle$, usada na próxima iteração, é determinada calculando o valor esperado $\langle a_i \rangle$ no estado fundamental do hamiltoniano efetivo.

4. Voltamos ao passo (2) e repetimos o processo. Este termina quando os parâmetros $\psi_i^{(n)}$

e $\psi_i^{(n+1)}$ apresentam distribuições semelhantes. Atendida essa convergência a distribuição $P(\psi)$ é calculada da amostragem dos parâmetros ψ_j .

3.3.2 Fases no DBHM

Na Fig. 3.4(a) apresenta-se o diagrama de fases no plano $(\mu/U, Zt/U)$ para o caso sem desordem. Quando são levados em consideração os efeitos de desordem na transição, observa-se que os lóbulos de Mott da Fig. 3.4(a) começam a deformar-se aparecendo uma nova fase, fase de vidro de Bose (*Bose glass-BG*), como é mostrado na Fig. 3.4(b). Este diagrama de fases (caso desordenado) foi obtido nas referências [33, 34] usando *SMFT*. Nesse trabalho as energias ϵ_i no hamiltoniano Eq. (3.2) foram distribuídas uniformemente segundo a Eq. (3.3).

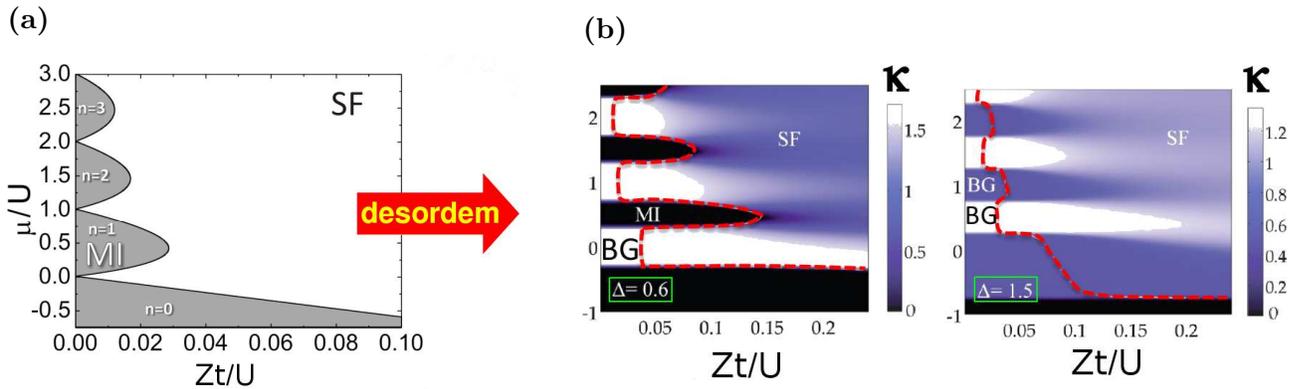


Figura 3.4 Efeitos da desordem na transição de fase superfluido-isolante de Mott. (a) Diagrama de fases no plano $(Zt/U, \mu/U)$ sem desordem. (b) Compressibilidade no plano $(\mu/U, Zt/U)$ para duas intensidades diferentes de desordem. As linhas vermelhas tracejadas indicam as fronteiras críticas do diagrama de fases. Estas figuras foram retiradas das referências [33, 34].

A compressibilidade definida mediante a relação $\kappa = \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu}$, onde $\langle n \rangle$ é a ocupação média por sítio é mostrada também na Fig. 3.4(b) em uma escala de cores para dois valores diferentes de intensidade de desordem Δ . As fronteiras entre as fases estão indicadas pelas linhas tracejadas de cor vermelha nos dois casos. Nota-se que κ serve para diferenciar as fases Mott e BG, pois a compressibilidade é diferente de zero na fase BG e zero na fase Mott, como é mostrado pela escala de cores.

Para um valor fixo do potencial químico $(\mu/U = 0.4)$ é mostrado o diagrama de fases (Fig. 3.5(a)) no plano $(Zt/U, \Delta/U)$ [33]. Fixando o valor $\Delta/U = 1$, calcula-se a distribuição de probabilidade $P(\psi)$ para vários valores de Zt/U , como é mostrado na Fig. 3.5(b). Começa-se

com o valor $Zt/U = 0.1$ na fase superfluido e varia-se Zt/U até a fase BG . Observa-se que na região próxima do ponto crítico da transição $Zt/U \approx 0.05$, a distribuição $P(\psi)$ tem um comportamento de lei de potência. Para o valor Zt/U na transição e valores dentro da fase vidro de Bose, $P(\psi)$ é uma função delta de Dirac, pois o parâmetro de ordem $\langle a_i \rangle$ é zero na fronteira e na fase BG .

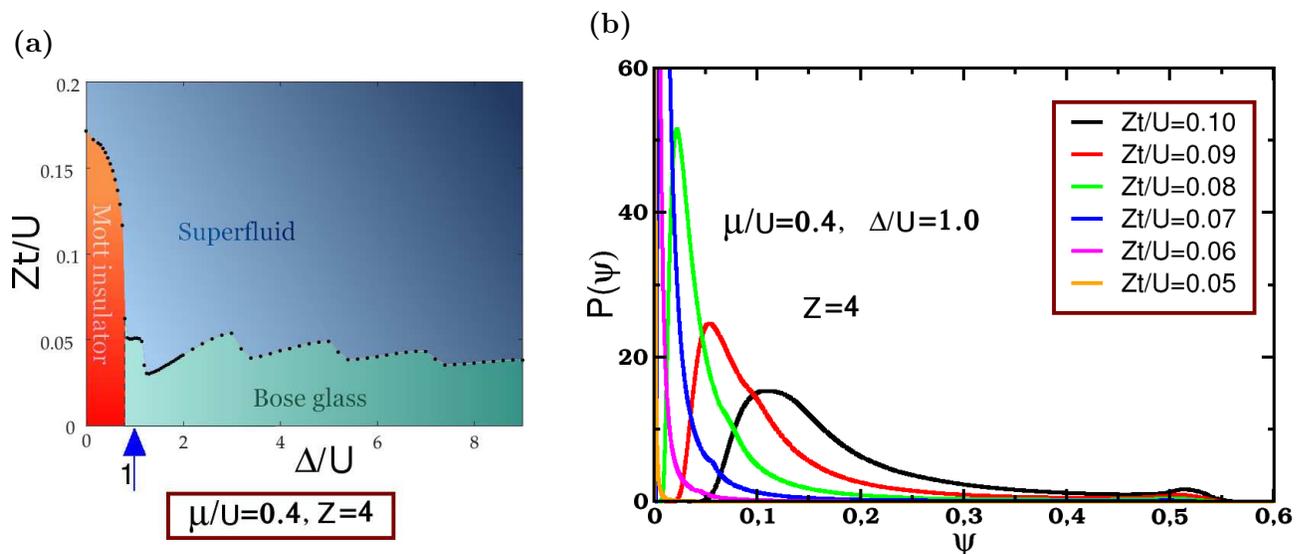


Figura 3.5 (a) Diagrama de fases e a distribuição de probabilidade $P(\psi)$. Diagrama de fases no plano $(Zt/U, \Delta/U)$ (tirado da referência [33]). (b) Distribuição de probabilidade $P(\psi)$ em função de ψ para diferentes valores de Zt/U . Parâmetros usados no cálculo $Z = 4$ e $\mu/U = 0.4$.

3.4 Solução perto do ponto crítico

Nessa seção o objetivo central é fazer um estudo analítico para a Eq. (3.16) válida perto do ponto crítico da transição de fases. Inicialmente, estudaremos o comportamento de $P(\psi)$ na região crítica desde um ponto de vista numérico, para termos uma ideia do ansatz a ser usado na solução da Eq. (3.16).

3.4.1 Comportamento de $P(\psi)$ na região crítica

Analisemos o comportamento crítico de $P(\psi)$ indo na fase superfluido à fase BG de acordo com o diagrama de fases apresentado na Fig. 3.5(a). Para o valor de desordem $\Delta/U = 1$, e do potencial químico $\mu/U = 0.4$, é mostrado na Fig. 3.6(a) o gráfico de $P(x)$ onde $x = \log(\psi)$ para vários valores do parâmetro de hopping Zt/U .

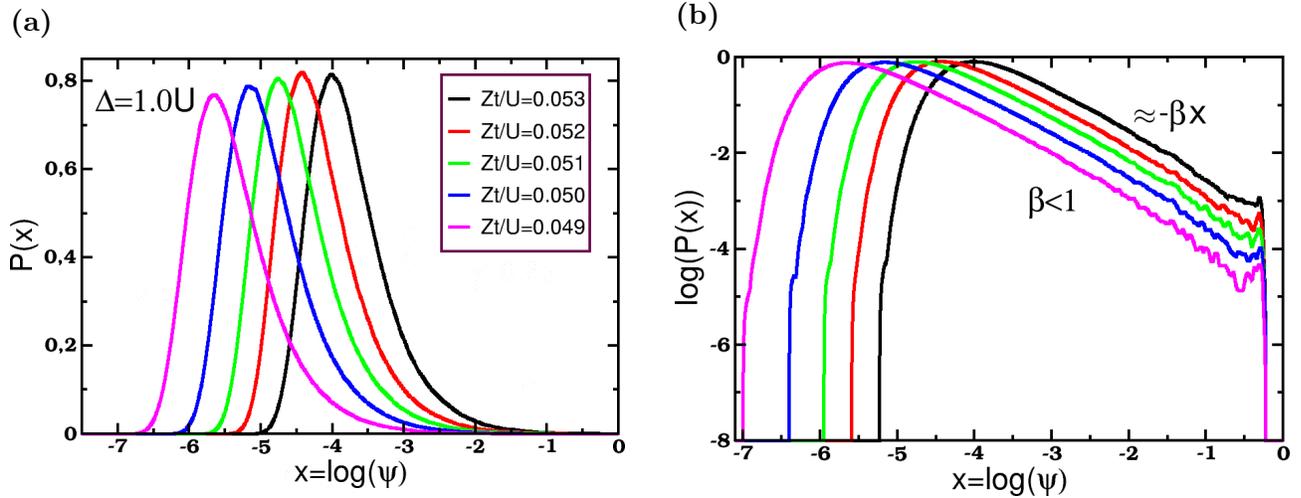


Figura 3.6 Distribuição de probabilidade $P(x)$ onde $x = \log(\psi)$. (a) Mostra-se $P(x)$ para vários valores do parâmetros Zt/U . (b) Apresenta-se $\log(P(x))$ em função de $x = \log(\psi)$, indicando que existe uma região de valores de ψ onde é válida a relação $\log(P(x)) \sim -\beta x$. Escolheu-se o valor de desordem $\Delta/U = 1$ para o cálculo.

Note-se que $P(\psi)$ é significativa em uma região de valores pequenos ($10^{-7} \leq \psi \leq 10^{-3}$). Só que nessa região perto do ponto crítico pode-se definir ainda duas regiões de valores grandes e pequenos de ψ . Observe (Fig. 3.6(b)) que em uma região de parâmetros que chamaremos de ψ “grandes” ($\psi \simeq 10^{-3}$), há um comportamento linear para a função $\log(P(x))$, mostrado na parte superior da Fig. 3.6(b). Veja que todas as curvas são paralelas com coeficiente angular $\beta \approx 0.84 < 1$. Assim,

$$\log(P(x)) \sim -\beta x, \quad x = \log(\psi). \quad (3.18)$$

Isso implica que nessa região de parâmetros, $P(x) \sim \psi^{-\beta}$. Utilizando a relação

$$P(x) = \frac{d\psi}{dx} P(\psi) = \psi P(\psi) \quad (3.19)$$

segue que

$$P(\psi) \sim \psi^{-(1+\beta)}. \quad (3.20)$$

Assim, $P(\psi)$ tem um comportamento de lei de potência para valores de ψ grandes. Entretanto este comportamento não é correto para $\psi \rightarrow \infty$ já que $P(\psi)$ tem um valor máximo permitido, como é mostrado na Fig. 3.6(b). Além disso, o valor médio de ψ calculado segundo

a Eq. (3.20) seria infinito e não zero, como deve ser no ponto crítico. Mas em uma larga região de valores grandes de ψ , o comportamento em lei de potência para $P(\psi)$ é correto.

Na Fig. 3.7(a) apresenta-se o gráfico $\log(P(x))$ em função de $x = \log(\psi)$ para vários valores de desordem Δ/U . Note que ainda é mantido um comportamento linear para $\log(P(x))$ na região de ψ grande. Na Fig. 3.7(b), mostra-se o expoente crítico β_c da lei de potência da Eq. (3.20). Observa-se que nessa faixa de valores de desordem $\Delta \geq U$, (desordem forte), $\beta_c < 1$.

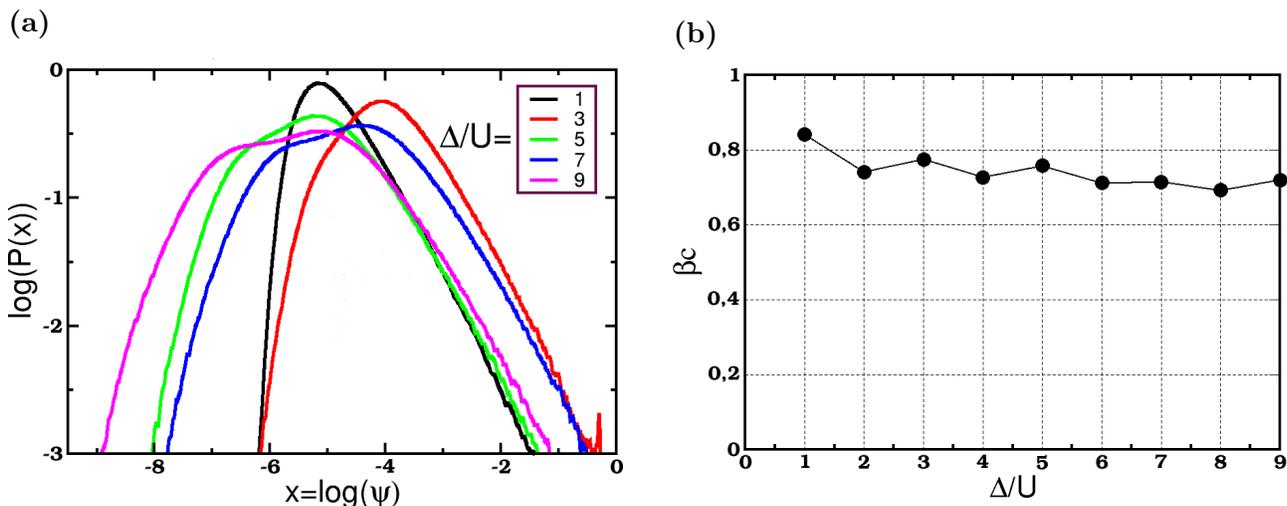


Figura 3.7 Comportamento da distribuição $P(x)$ na região crítica. (a) $\log(P(x))$ em função de $x = \log(\psi)$ para vários valores de desordem Δ/U na região crítica da transição. (b) Expoente crítico β_c em função da desordem Δ/U . Os valores utilizados no cálculo foram $\mu/U = 0.4$ e $Z = 4$.

3.4.2 Equação de auto-consistência

Observe que para solucionar a Eq. (3.16) é preciso conhecer o valor esperado no estado fundamental do operador a . Perto do ponto crítico da transição o parâmetro η no hamiltoniano de um sítio (Eq. (3.14)) é pequeno ($\eta/U \ll 1$). Assim, podemos usar para $\langle a \rangle = g(\epsilon, \eta)$ a expressão encontrada em teoria de perturbações. De acordo com a seção 1.4, em teoria de perturbações em primeira ordem encontrou-se:

$$g(\epsilon, \eta) = \langle a \rangle = \eta f(\epsilon), \quad (3.21)$$

onde

$$f(\epsilon) = \frac{n(\mu - \epsilon, U)}{\mu - \epsilon - U(n(\mu - \epsilon, U) - 1)} + \frac{n(\mu - \epsilon, U) + 1}{Un(\mu - \epsilon, U) - (\mu - \epsilon)}. \quad (3.22)$$

Note que $n(\mu - \epsilon, U)$ é o menor inteiro maior ou igual a $(\mu - \epsilon)/U$ definido como:

$$n(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ 1, & 0 \leq x \leq 1 \\ 2, & 1 \leq x \leq 2 \\ \vdots & \\ N, & N - 1 \leq x \leq N \\ \vdots & \vdots \end{cases} \quad (3.23)$$

Agora, da Eq. (3.12) segue que

$$\begin{aligned} P(\psi) &= \int_0^\infty d\eta Q(\eta) \int d\epsilon p(\epsilon) \delta[\psi - \eta f(\epsilon)] \\ &= \int d\epsilon p(\epsilon) \int_0^\infty d\eta Q(\eta) \delta[\psi - \eta f(\epsilon)]. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Assim, pode-se determinar uma expressão para a transformada de Laplace de $P(\psi)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(s) &= \int_0^\infty d\psi e^{-s\psi} P(\psi) \\ &= \int_0^\infty d\psi e^{-s\psi} \left[\int d\epsilon p(\epsilon) \int_0^\infty d\eta Q(\eta) \delta[\psi - \eta f(\epsilon)] \right] \\ &= \int d\epsilon p(\epsilon) \int_0^\infty d\eta Q(\eta) e^{-s\eta f} \end{aligned}$$

$$= \int d\epsilon p(\epsilon) \mathcal{Q}(sf), \quad f > 0.$$

Utilizando a Eq. (3.11)

$$\mathcal{Q}(s) = [\mathcal{P}(ts)]^Z,$$

segue que

$$\mathcal{P}(s) = \int d\epsilon p(\epsilon) [\mathcal{P}(tsf)]^Z. \quad (3.25)$$

Nota-se que a equação acima deve ser resolvida de forma auto-consistente, devido a $\mathcal{P}(s)$ estar nos dois lados dessa equação.

Se $P(\psi)$ segue a lei de potência $P(\psi) \sim \psi^{(1+\beta)}$ segundo a Eq. (3.20). A transformada de Laplace de $P(\psi)$ pode ser escrita como:

$$\mathcal{P}(s) = \int d\psi e^{-s\psi} P(\psi) = A - \alpha s^\beta,$$

onde A é a constante de normalização para $s = 0$. Note que $A = \mathcal{P}(0) = \int d\psi P(\psi) = 1$. Os parâmetros α e β tem que ser determinados. Assim, vamos propor como solução da Eq. (3.25) [65]

$$\mathcal{P}(s) = 1 - \alpha s^\beta, \quad s \ll 1. \quad (3.26)$$

Observa-se que a expansão em valores pequenos de s proposta para $\mathcal{P}(s)$ é justificável pois estamos trabalhando na região de valores grandes de ψ .

Da Eq. (3.25) segue,

$$\mathcal{P}(s) = \int d\epsilon p(\epsilon) [1 - \alpha(ts f)^\beta]^Z$$

$$\begin{aligned}
&\approx \int d\epsilon p(\epsilon) [1 - Z\alpha(ts f)^\beta], \quad s \ll 1 \\
&= \int d\epsilon p(\epsilon) - Z\alpha s^\beta t^\beta \int d\epsilon p(\epsilon) f^\beta(\epsilon) \\
&= 1 - \alpha s^\beta.
\end{aligned}$$

Utilizando $\int d\epsilon p(\epsilon) = 1$, obtemos,

$$Zt^\beta \int d\epsilon p(\epsilon) f^\beta(\epsilon) = 1. \quad (3.27)$$

A equação acima é a relação procurada. Ela permite determinar a fronteira do diagrama de fases uma vez conhecido o parâmetro β para uma distribuição de desordem $p(\epsilon)$ dada.

3.4.3 Distribuição uniforme de desordem

Se as energias estocásticas ϵ_i , estão distribuídas de acordo com:

$$p(\epsilon) = \frac{1}{\Delta} \Theta(\Delta/2 - |\epsilon|), \quad (3.28)$$

segue da Eq. (3.27),

$$\frac{Zt^\beta}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\epsilon f^\beta[n(\mu - \epsilon, U), \epsilon] = 1, \quad (3.29)$$

onde a função $f[n(\mu - \epsilon, U), \epsilon]$ está definida pela Eq. (3.23). Note-se que no caso $\beta = 1$, a Eq. (3.27) é exatamente igual á encontrada usando teoria de campo médio não estocástica válida no regime de desordem fraca $\Delta < U$, a qual não descreve a fase *Bose-Glass* para um amplitude de *hopping* t finita e temperatura zero [63].

Agora para determinar uma solução da Eq. (3.27) no regime de desordem forte ($\Delta \geq U$) que descreva a fase *BG* para t finito, deve-se determinar o parâmetro β que maximiza a amplitude de *hopping* $t = t(\beta)$, pois existe um valor máximo do t para o qual fase vidro de Bose é estável. Esse valor corresponde à fronteira do diagrama de fases.

Assim da Eq. (3.29)

$$\frac{Zt^\beta}{\Delta} I(n, \mu, \beta, \Delta) = 1, \quad (3.30)$$

onde

$$I(n, \mu, \beta, \Delta) = \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\epsilon f^\beta[n(\mu - \epsilon, U), \epsilon]; \quad (3.31)$$

pode-se isolar $t(\beta)$

$$t(\beta) = \left(\frac{\Delta}{ZI(\beta)} \right)^{1/\beta}. \quad (3.32)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \ln(t(\beta)) &= \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\Delta}{ZI(\beta)} \right] \\ \Rightarrow \frac{d \ln t(\beta)}{d\beta} &= -\frac{1}{\beta^2} \ln \left[\frac{\Delta}{ZI(\beta)} \right] + \frac{1}{\beta} \frac{ZI(\beta)}{\Delta} \left(-\frac{\Delta I'(\beta)}{ZI^2(\beta)} \right) \\ \frac{t'(\beta)}{t(\beta)} &= -\frac{1}{\beta^2} \ln \left[\frac{\Delta}{ZI(\beta)} \right] - \frac{1}{\beta} \frac{I'(\beta)}{I(\beta)}. \end{aligned}$$

Entretanto a equação que maximiza $t(\beta)$ encontra-se fazendo $t'(\beta) = 0$,

$$\frac{I'(\beta)}{I(\beta)} + \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\Delta}{ZI(\beta)} \right] = 0. \quad (3.33)$$

Essa equação acima permite encontrar o parâmetro β em função da desordem Δ/U , e com estes valores pode-se determinar o diagrama de fases utilizando a Eq. (3.30).

3.5 Diagrama de fases

Para os valores $U = 1$ e $\mu/U = 0.4$, mostra-se na Fig. 3.8(a) a função $t(\beta, \Delta)$ (veja Eq. (3.32)). Na Fig. 3.8(b) apresenta-se $Zt(\beta, \Delta)/U$ como função de β para três valores diferentes de desordem Δ/U . Observe que os valores de β onde $Zt(\beta, \Delta)/U$ é máxima correspondem aos pontos críticos $\beta_c(\Delta)$ que são as soluções da Eq. (3.33). Esses valores de $\beta_c(\Delta/U)$ são utilizados

para gerar o diagrama de fases segundo a equação 3.30.

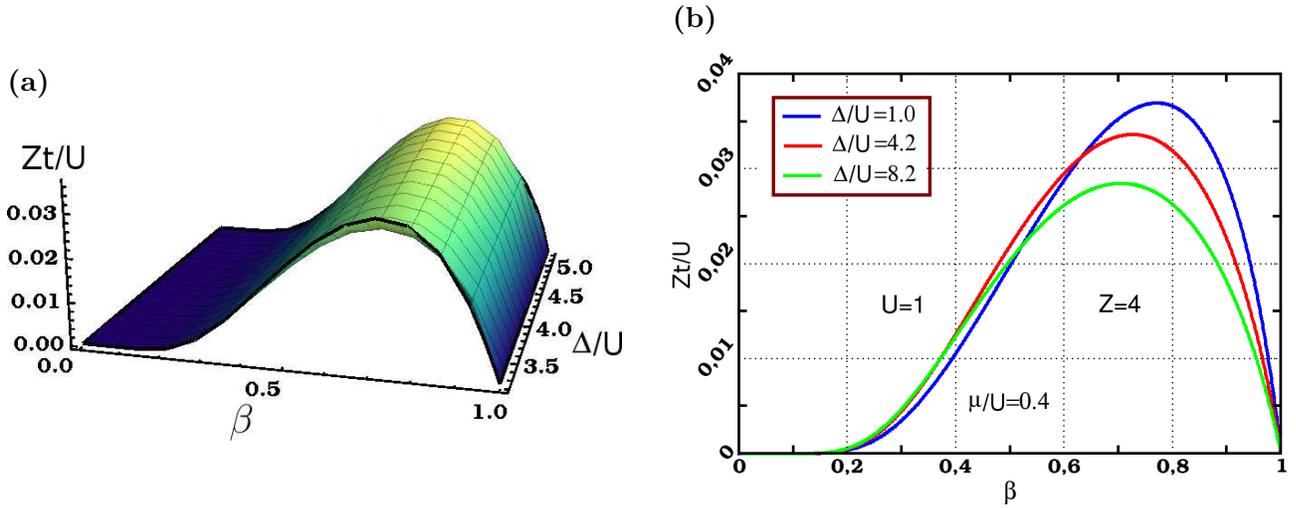


Figura 3.8 Cálculo do parâmetro β : (a) variação do parâmetro de hopping Zt/U como função do parâmetro β e da intensidade de desordem Δ/U . O intervalo da desordem correspondente é $3.2 \leq \Delta/U \leq 5.2$. Note que para cada valor de β onde a função Zt/U é máxima corresponde a um valor crítico β_c utilizado para gerar o diagrama de fases. (b) O parâmetro de hopping Zt/U como função de β para três diferentes valores da desordem. Os valores críticos de β encontrados para $\Delta/U = 1.0, 4.2$ e 8.2 , são $\beta_c = 0.771, 0.726$ e 0.704 , respectivamente. Os parâmetros usados no cálculo foram $U = 1, Z = 4$ e $\mu/U = 0.4$.

O digrama de fases obtido da Eq. (3.30) é mostrado na Fig. 3.9(a) (curva de cor azul). A curva de cor preta com símbolos corresponde ao resultado obtido numericamente na referência [33]. Existe uma pequena discrepância entre os dois resultados obtidos. Ressalta-se que o limite numérico utilizado na determinação do diagrama de fases da referência [33] (curva preta com símbolos) foi arbitrário, eles escolheram o valor $5 \cdot 10^{-4}$ como o zero do valor médio do parâmetro de ordem ($\langle a \rangle$) que determina a fronteira crítica entre as fases.

Os valores críticos de β estão representados na Fig. 3.9(b) como função da desordem. A linha de cor azul com símbolos corresponde ao resultado obtido numericamente (ver seção anterior) e a curva de cor vermelha é o resultado analítico. Observe que neste caso encontra-se uma boa concordância entre os dois resultados.

3.6 Conclusões

Mostrou-se o cálculo analítico do diagrama de fase perto do ponto crítico da transição de fase quântica presente no modelo de Bose-Hubbard desordenado. Essa fronteira crítica foi determinada com a suposição de que a distribuição de probabilidade $P(\psi)$ tem o comportamento

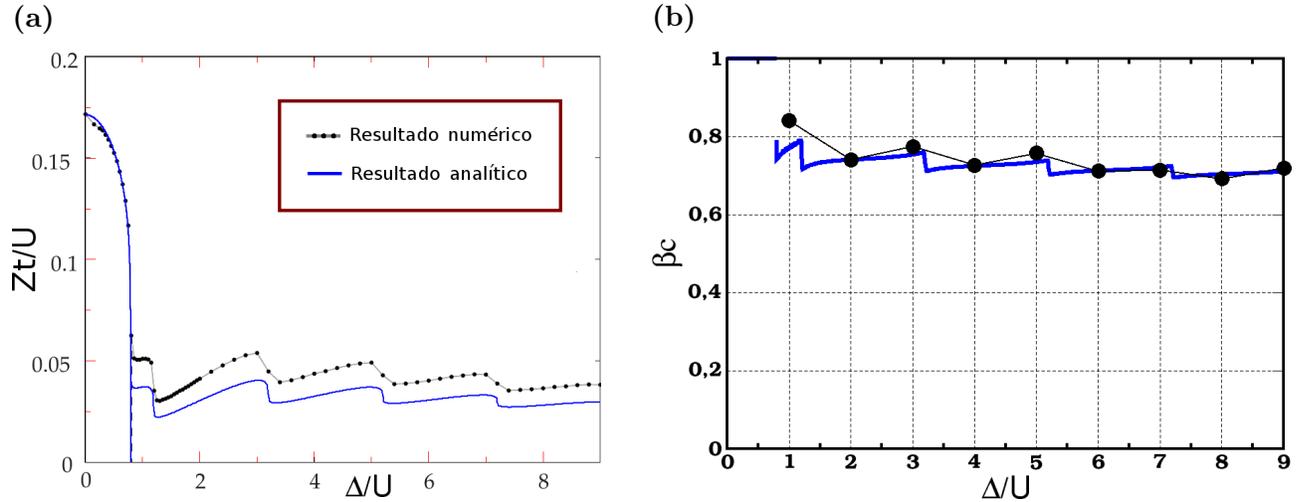


Figura 3.9 (a) Diagrama de fases em *SMFT*. Comparação entre os resultados obtidos na referência [33], curva preta com símbolos, com os resultados analíticos, curva de cor azul. (b) Expoente crítico β_c em função da desordem Δ/U . A curva azul é o cálculo analítico e a curva preta com símbolos corresponde ao cálculo numérico na região de desordem forte ($\Delta/U \geq 1$). Os parâmetros usados para o cálculo foram, $Z = 4$ e $\mu/U = 0.4$.

de lei de potência $P(\psi) \sim \psi^{-(1+\beta)}$. Ressaltou-se que esse comportamento só é válido em uma região de valores de ψ grandes, pois o parâmetro de ordem ($\bar{\psi}$) é nulo no ponto crítico, e não infinito como seria o caso onde o comportamento em lei de potências fosse correto mesmo em toda a região de valores grandes de ψ .

Outro fato relevante que levou a determinar a fronteira crítica foi ter utilizado para o valor esperado de a a expressão:

$$\langle a \rangle = \eta f(\epsilon), \quad f(\epsilon) = \frac{n(\mu - \epsilon, U)}{\mu - \epsilon - U(n - 1)} + \frac{n(\mu - \epsilon, U) + 1}{Un(\mu - \epsilon, U) - (\mu - \epsilon)}. \quad (3.34)$$

Lembre-se que esse comportamento linear em η para $\langle a \rangle$ é válido no regime $\eta/U \ll 1$. Note também que a equação acima diverge quando $\xi = \mu - \epsilon$ é um múltiplo inteiro de U . Essa singularidade em $\langle a \rangle$ leva imediatamente ao expoente $\beta < 1$ no regime de desordem forte ($\Delta/U \geq 1$), evitando a divergência da integral na Eq. (3.27) nesses pontos. Estritamente falando o comportamento linear em η para $\langle a \rangle$ não é correto.

Na Fig. 3.10(a) mostra-se o gráfico de $\langle a \rangle$ em função $\xi = \mu - \epsilon$ para quatro valores de η/U obtidos diagonalizando exatamente o hamiltoniano de Bose-Hubbard de um sítio. Veja que $\langle a \rangle$ é finito em pontos de ξ múltiplos de inteiros de U . No caso da Fig. 3.10(a), estes

pontos correspondem aos valores $\xi = 0, 1$ e 2 . Na Fig. 3.10(b) apresenta-se a comparação para o parâmetro de ordem ($\langle a \rangle$) entre os resultados obtidos diagonalizando o hamiltoniano efetivo de um sítio (curva de cor verde) e o obtido segundo a Eq. (3.34) (curva roxa). Note-se a singularidade em $\xi = 1$ na curva roxa discutida linhas antes. Apesar de todos os problemas apontados o comportamento em lei de potência para a distribuição $P(\psi)$ é uma boa descrição.

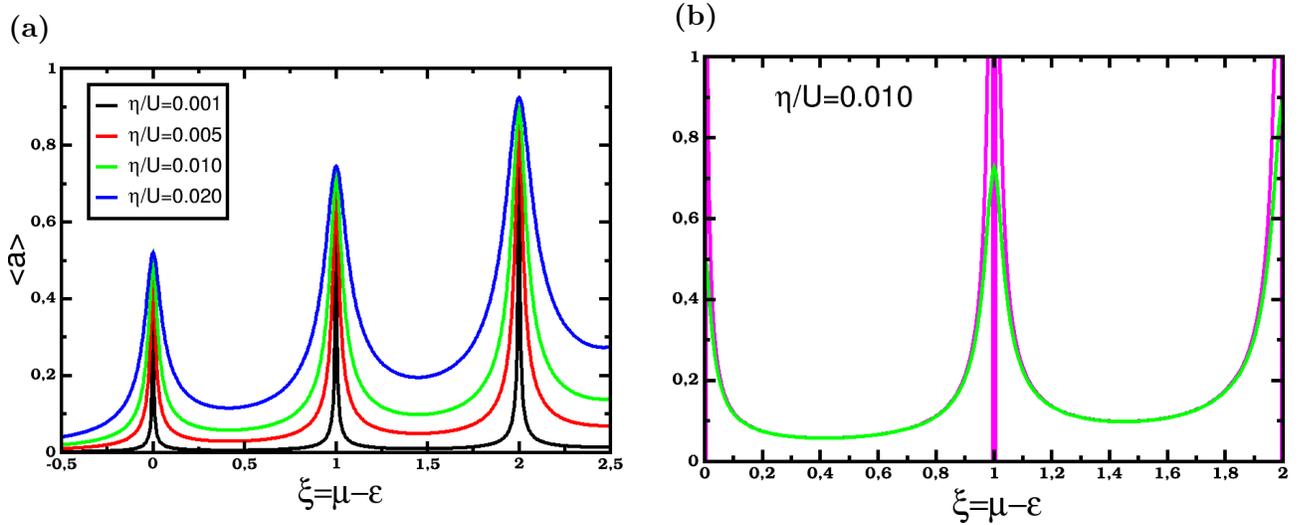


Figura 3.10 Parâmetro superfluido $\langle a \rangle$ em função de $\xi = \mu - \epsilon$. (a) Parâmetro superfluido para vários valores de η/U obtido da diagonalização exata do hamiltoniano efetivo (Eq. (3.14)). (b) Apresenta-se a grandeza $\langle a \rangle$ para o valor $\eta/U = 0.01$. A curva de cor verde é o resultado obtido diagonalizando o hamiltoniano da Eq. (3.14), e a curva roxa foi obtido da Eq. (3.34).

4

Modelo de Bose-Hubbard Desordenado com Spin-1: Tratamento mediante Teoria Estocástica de Campo Médio

4.1 Introdução

A transição de fase quântica superfluido-isolante de Mott, inicialmente realizada em experimentos com redes ópticas que utilizavam a espécie atômica ^{87}Rb [13], é bem descrita pelo modelo de Bose-Hubbard com *spin* zero [14–16]. Isso porque nas armadilhas magnéticas convencionalmente empregadas nestes experimentos, os graus de liberdade internos (*spins*) são congelados e os átomos podem ser considerados como bósons sem *spin*. Porém em armadilhas ópticas puras, os *spins* são livres e os condensados atômicos dependem da natureza do *spinor* [66–68]. Nesse caso, a transição de fase superfluido-isolante de Mott pode ser estudada através do modelo de Bose-Hubbard para partículas com *spin*-1 [69].

Estendendo a teoria de campo médio desenvolvida nas referências [14, 15, 23], a transição de fase no modelo de *spin*-1 já foi estudada para o caso de temperatura igual a zero [69, 70], como também para temperatura finita [71]. Em particular, na referência [69], as fronteiras do diagrama de fases, considerando uma interação anti-ferromagnética intra-sítio no modelo de Bose-Hubbard com *spin*-1 foi obtida de forma analítica. Determinou-se que há duas fases isolantes de Mott, uma fase de *spin* singlete com um número par de átomos por sítios, onde cada sítio da rede tem um *spin* total $S = 0$, e uma outra fase, com número ímpar de átomos

por sítios e com *spin* total $S = 1$ para cada sítio da rede. Foi mostrado também que a fase superfluido é um estado polar, onde uma fração dos átomos está condensada no estado de *spin*-0. Pode-se dizer que o sistema se comporta de maneira similar a um sistema de bósons com *spin*-1 armadilhados em um potencial harmônico com interação anti-ferromagnética [66, 67].

Um novo ingrediente que pode ser introduzido no modelo de Bose-Hubbard com *spin*-1 são os efeitos de desordem, dando origem a um diagrama de fases mais abrangente. A desordem tem um papel fundamental em vários campos da física e é de se esperar que esses efeitos também sejam importantes em sistemas de átomos frios em redes ópticas [72]. Do ponto de vista experimental, existem métodos para considerar efeitos de desordem em sistemas de átomos ultra-frios. Um deles é a utilização de padrões de laser *speckle* que são acrescentados ao potencial de confinamento gerado pela rede óptica [73, 74]. Outros métodos incluem misturas de diferentes espécies atômicas armadilhadas aleatoriamente [75, 76], criação de super-redes pela presença simultânea de redes ópticas com frequências incomensuráveis [52, 61, 77], e ainda pode-se citar o uso de campos magnéticos não homogêneos que podem ser modificados aleatoriamente perto da ressonância de Feshbach, fazendo com que o comprimento de espalhamento dos átomos da amostra dependam da posição espacial [78, 79].

Um estudo teórico da presença dos efeitos da desordem no modelo de Bose-Hubbard com *spin*-1 foi realizado na referência [80]. Ali, determinou-se o diagrama de fases a temperatura zero utilizando o método variacional de Gutzwiller, combinado com a teoria probabilística de campo médio.

O presente capítulo aborda o estudo do modelo desordenado de Bose-Hubbard para partículas com *spin*-1 utilizando a teoria estocástica de campo médio (*SMFT*) [33, 34]. Dessa maneira, deduziremos o hamiltoniano do modelo (seção 4.2) e posteriormente apresentaremos o diagrama de fases para o caso não homogêneo [69]. Várias grandezas são analisadas na seção 4.4 para o caso sem desordem. Em seguida, os efeitos da desordem tratados em *SMFT* serão levados em consideração. Assim, pode-se determinar as distribuições de probabilidade e os valores médios de grandezas como: o parâmetro de ordem, a fração do condensado, o desvio padrão da ocupação e o valor esperado do quadrado do operador de *spin* total.

4.2 Hamiltoniano do Modelo

Considere-se um sistema de átomos bosônicos com *spin* total $F = 1$ aprisionados em uma combinação de um potencial óptico $V_{op}(\mathbf{r})$ e um potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$, descritos pelo seguinte hamiltoniano [69]:

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{op}(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r}) - \mu \right) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{c_0}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \\
& + \frac{c_2}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int d\mathbf{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \mathbf{F}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{F}_{\gamma\delta} \Psi_{\delta}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{4.1}$$

onde $\Psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ é o operador de campo que destrói um átomo na posição \mathbf{r} , no estado total $|F = 1, m_F = \alpha\rangle$ ($\alpha = -1, 0, 1$), M é a massa do átomo e μ o potencial químico. Os operadores de *spin*-1 $\mathbf{F}_{\alpha\beta}$ são representados pelas matrizes:

$$F_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4.2}$$

No hamiltoniano (Eq. (4.1)), o segundo termo descreve a interação entre os átomos, não dependente do *spin* (seção 1.1), sendo o coeficiente c_0 dado pela relação:

$$c_0 = \frac{(g_0 + 2g_2)}{3}, \quad g_F = \frac{4\pi\hbar^2 a_F}{M}, \tag{4.3}$$

onde a_F é o comprimento de espalhamento de onda s para dois átomos colidindo com *spin* total F . Devemos comentar que o espalhamento com *spin* total 1 é proibido em onda s ($l = 0$). Isso porque a parte espacial da função de onda das duas partículas é simétrica sob permutação das mesmas para valores pares do momento angular relativo l e, portanto, a parte de *spin* deve ser também simétrica, garantindo que a função de onda total seja simétrica, como deve ser no caso de bósons. Entretanto, a função de onda para duas partículas com *spin* total 1 é anti-simétrica.

O terceiro termo da Eq. (4.1) descreve uma interação dependente do *spin*, onde o coeficiente c_2 é dado pela expressão:

$$c_2 = \frac{(g_2 - g_0)}{3}. \quad (4.4)$$

Note que c_2 é proporcional também à diferença dos comprimentos de espalhamento $a_2 - a_0$. A interação dependente do *spin* pode ser classificada como: ferromagnética, quando $c_2 < 0$ (ou seja, $a_2 < a_0$) e anti-ferromagnética, no caso $c_2 > 0$ (ou seja, $a_2 > a_0$) [66].

Expandindo os operadores de campo na base das funções de Wannier no modo mais baixo $\Psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_i a_{i\alpha} w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, similar ao caso exposto na seção 1.1 é obtido o modelo de Bose-Hubbard para bósons com spin-1 [69]:

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha} \left(a_{i\alpha}^\dagger a_{j\alpha} + a_{j\alpha}^\dagger a_{i\alpha} \right) + \sum_i \sum_{\alpha} (\epsilon_i - \mu) a_{i\alpha}^\dagger a_{i\alpha} \\ & + \frac{U_0}{2} \sum_i \sum_{\alpha, \beta} a_{i\alpha}^\dagger a_{i\beta}^\dagger a_{i\beta} a_{i\alpha} + \frac{U_2}{2} \sum_i \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} a_{i\alpha}^\dagger a_{i\gamma}^\dagger \mathbf{F}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{F}_{\gamma\delta} a_{i\delta} a_{i\beta}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde os operadores $a_{i\alpha}^\dagger$ e $a_{i\alpha}$ criam e destróem um átomo com *spin* total α no sítio i . O parâmetro de *hopping* t entre sítios vizinhos i e j , é definido mediante a relação:

$$t = - \int d\mathbf{r} w_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{op}(\mathbf{r}) \right) w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (4.6)$$

Os parâmetros de interação U_0 e U_2 são definidos como:

$$U_F = c_F \int d\mathbf{r} |w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4, \quad F = 0, 2. \quad (4.7)$$

As energias do sítios ϵ_i , devido ao potencial de confinamento externo, estão definidas através da relação:

$$\epsilon_i = \int d\mathbf{r} V_{ext}(\mathbf{r}) |w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^2. \quad (4.8)$$

Introduzindo os operadores número total de bósons n_i e de *spin* \mathbf{S}_i ,

$$n_i = \sum_{i\alpha} n_{i\alpha}, \quad n_{i\alpha} = a_{i\alpha}^\dagger a_{i\alpha}, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{S}_i = \sum_{\alpha,\beta} a_{i\alpha}^\dagger \mathbf{F}_{\alpha\beta} a_{i\beta}, \quad (4.10)$$

o hamiltoniano da Eq. (4.5) pode ser reescrito como:

$$H = -t \sum_{\alpha} \sum_{\langle i,j \rangle} a_{i\alpha}^\dagger a_{j\alpha} + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\mathbf{S}_i^2 - 2n_i) + \sum_i (\epsilon_i - \mu)n_i. \quad (4.11)$$

Da mesma maneira, pode-se escrever \mathbf{S}_i^2 em termos dos operadores $n_{i\alpha}$, $a_{i\alpha}^\dagger$ e $a_{i\alpha}$ como segue:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i^2 = & 2n_{i,1}n_{i,0} + 2n_{i,0}n_{i,-1} + n_{i,1} + 2n_{i,0} + n_{i,-1} \\ & + n_{i,1}^2 - 2n_{i,1}n_{i,-1} + n_{i,-1}^2 + 2a_{i,1}^\dagger a_{i,-1}^\dagger b_{i,0}^2 + 2(a_{i,0}^\dagger)^2 a_{i,1} a_{i,-1}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

O operador \mathbf{S}_i é utilizado para classificar as propriedades magnéticas da fase superfluido, como mostrado a seguir [66].

4.2.1 Propriedades magnéticas da fase superfluido

O operador \mathbf{S}_i , introduzido na Eq. (4.10), pode ser escrito em termos de suas componentes (S_{ix}, S_{iy}, S_{iz}) como segue:

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(a_1^\dagger + a_{-1}^\dagger) a_0 + a_0^\dagger (a_1 + a_{-1}) \right] \\ S_y &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left[(-a_1^\dagger + a_{-1}^\dagger) a_0 + a_0^\dagger (-a_{-1} + a_1) \right] \\ S_z &= n_1 - n_{-1} \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde temos suprimido o índice i por simplicidade na notação. As propriedades magnéticas da fase superfluido estão caracterizadas pela grandeza $\langle \mathbf{S}_i \rangle$, onde o valor esperado é calculado em um estado coerente [66]. Utilizando as componentes de \mathbf{S}_i como escritas acima, $\langle \mathbf{S}_i \rangle$ pode ser

rescrito como:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \sqrt{2} (\psi_1 \psi_0 + \psi_{-1} \psi_0) \hat{x} + (\psi_1^2 - \psi_{-1}^2) \hat{z}, \quad (4.14)$$

com $\psi_\alpha = \langle a_\alpha^\dagger \rangle = \langle a_\alpha \rangle$, real.

Os estados caracterizados por $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$ e $\langle \mathbf{S} \rangle^2 = 1$, são denominados de *estado superfluido polar* e *ferromagnético*, respectivamente [66].

4.2.1.1 Estado superfluido polar

Este estado ocorre como resultado de uma interação onde o coeficiente de acoplamento definido na Eq. (4.4) é positivo, $c_2 > 0$ (ou seja, $a_2 > a_0$). A energia é minimizada por $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, e o *spinor* do condensado é dado pela expressão [66]:

$$\zeta = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \\ \psi_{-1} \end{pmatrix} = e^{i\theta} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\alpha} \sin \beta \\ \cos \beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha} \sin \beta \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

onde (α, β, τ) são os ângulos de Euler (neste caso o estado polar não depende do ângulo τ). O grupo de simetria desse estado é o $U(1)X\mathcal{S}^2$, onde $U(1)$ denota o ângulo de fase θ e \mathcal{S}^2 é a superfície de uma esfera unitária, onde as orientações são especificadas pelos ângulos (α, β)

Considerando os parâmetros de ordem como sendo reais, o estado superfluido polar pode assumir as seguintes configurações [71]:

- i) $\psi_1 = \psi_{-1} > 0$, & $\psi_0 = 0$, onde $\theta = \alpha = \beta = \pi/2$ ou $\theta = -\alpha = \beta = \pi/2$
- ii) $\psi_1 = \psi_{-1} = 0$, & $\psi_0 > 0$, onde $\beta = 0$ ou π , $\theta = 0$ ou π , & $0 \leq \alpha \leq 2\pi$.

4.2.1.2 Estado superfluido ferromagnético

Neste estado o coeficiente de acoplamento definido na Eq. (4.4) é negativo, $c_2 < 0$ (ou seja, $a_2 < a_0$). A energia é minimizada tomando $\langle \mathbf{S} \rangle^2 = 1$, e nesse caso o estado fundamental é dado

pelo *spinor* [71]:

$$\zeta = e^{i(\theta-\tau)} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos^2(\beta/2) \\ \sqrt{2} \cos(\beta/2) \sin(\beta/2) \\ e^{i\alpha} \sin^2(\beta/2) \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

onde as configurações para tal estado se $\psi_\alpha \in R$ são dadas por:

$$\psi_1 = \psi_{-1}, \quad \beta = \pi/2, \alpha = 0, \quad 0 < \theta = \tau \leq 2\pi, \quad \& \quad \psi_0 = \sqrt{2}\psi_1. \quad (4.17)$$

Como já mencionado na introdução do presente capítulo, no caso do modelo homogêneo é possível encontrar de forma analítica a fronteira do diagrama de fases. Com este fim, foi utilizada a teoria de campo médio como descrita a seguir.

4.2.2 Aproximação de campo médio

A aproximação padrão para o campo médio, consiste em desacoplar o termo de *hopping* do hamiltoniano (Eq. (4.11)) através da relação:

$$a_{i\alpha}^\dagger a_{j\alpha} \simeq \psi_{i\alpha}^* a_{j\alpha} + a_{i\alpha}^\dagger \psi_{j\alpha} - \psi_{i\alpha}^* \psi_{j\alpha}, \quad (4.18)$$

onde $\psi_{i\alpha} = \langle a_{j\alpha} \rangle$. Nessa aproximação são desprezadas flutuações de segunda ordem nos operadores de criação e destruição, ou seja:

$$(a_{i\alpha}^\dagger - \langle a_{i\alpha} \rangle)(a_{j\alpha} - \langle a_{j\alpha} \rangle) \simeq 0. \quad (4.19)$$

Utilizando a Eq. (4.18), o hamiltoniano da Eq. (4.11) pode ser reduzido ao problema efetivo de um sítio sujeito a uma equação de auto-consistência

$$h_i = - \sum_{\alpha} \left(\eta_{i\alpha} a_{i\alpha}^\dagger + \eta_{i\alpha}^* a_{i\alpha} - \psi_{i\alpha} \eta_{i\alpha}^* \right) + (\epsilon_i - \mu) n_i$$

$$+\frac{U_0}{2}n_i(n_i - 1) + \frac{U_2}{2}(\mathbf{S}_i^2 - 2n_i); \quad \eta_{i\alpha} = t \sum_{\langle ij \rangle} \psi_{j\alpha} \quad (4.20)$$

Nota-se que o problema de auto-consistência fica evidente na dependência do parâmetro $\eta_{i\alpha}$ através do valor esperado de $a_{i\alpha}$, como já destacado antes neste trabalho.

4.3 Diagrama de fases: caso homogêneo

Perto da transição de fase, as componentes $\psi_{i\alpha}$ do parâmetro de ordem tendem a zero. Assim, a grandeza $\eta_{i\alpha} = t \sum_{\langle ij \rangle} \psi_{j\alpha}$, introduzida no hamiltoniano acima, pode ser considerada pequena. Conseqüentemente, o primeiro termo do hamiltoniano (Eq. (4.20)) escrito como:

$$V_i = - \sum_{\alpha} \left(\eta_{i\alpha} a_{i\alpha}^{\dagger} + \eta_{i\alpha}^* a_{i\alpha} \right) \quad (4.21)$$

pode ser tratado como uma pequena perturbação. Além disso, para o caso de uma rede uniforme com conectividade Z , o parâmetro $\eta_{i\alpha}$ é reduzido a:

$$\eta_{i\alpha} = t \sum_{\langle ij \rangle} \psi_{j\alpha} = Zt \langle a_{i\alpha} \rangle. \quad (4.22)$$

Na referência [69], este problema foi considerado para o caso homogêneo, ou seja, sem desordem ($\epsilon_i = 0$). O diagrama de fases encontrado utilizando teoria de Landau para transições de fases de segunda ordem, é apresentado na Fig. 4.1.

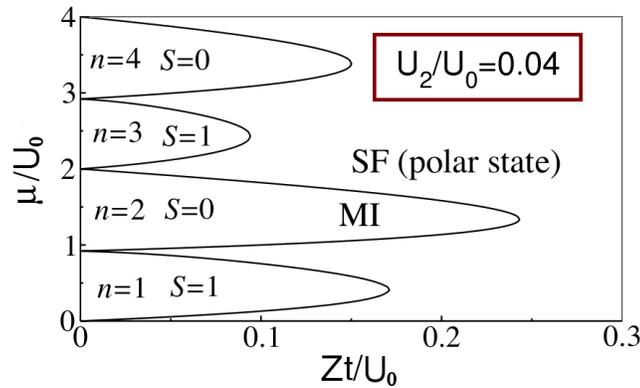


Figura 4.1 Diagrama de fases para o modelo de Bose-Hubbard com *spin*-1 no caso homogêneo [69], para o parâmetro $U_2/U_0 = 0.04$.

Observa-se que o digrama de fases é caracterizado por uma serie de lóbulos de Mott separados da fase superfluido (neste caso, polar) por linhas de pontos críticos. Note que os lóbulos com ocupação ímpar ($n = 1, 3$), são caracterizados por um valor de *spin* total 1 e os lóbulos com ocupação par ($n = 2, 4$) são caracterizados por possuir *spin* total 0. A fase isolante de Mott com ocupação par é mais estável em relação à fase isolante de Mott com ocupação ímpar. Observa-se que os lóbulos de Mott do diagrama de fases são maiores no caso de ocupação par. Tal fato possui justificativa bem simples: no caso dos lóbulos com ocupação par, todos os átomos formam um estado singlete em cada sítio ($S = 0$), favorecendo uma forte localização em cada sítio, tal que os processos de *hopping* tornam-se mais difíceis entre os sítios vizinhos. Entretanto, no caso com ocupação ímpar, os átomos não podem formar estados singletos ($S = 1$). Isso permite processos de *hopping* para sítios vizinhos, favorecendo a fase superfluido e diminuindo a fase isolante de Mott correspondente.

O estado singlete ($S = 0$) também é favorecido com o aumento do parâmetro de interação U_2 (devido ao *spin*). No caso $U_2 = 0$, recupera-se o modelo de Bose-Hubbard como *spin* zero. O digrama de fases da Fig. 4.1 foi gerado utilizando o parâmetro $U_2/U_0 = 0.04$.

Na Fig. 4.2(a) são apresentadas as componentes do parâmetro superfluido, $\psi_{-1} = \psi_1$ e $\psi_0 = 0$, em função de Zt/U_0 para valores distintos do potencial químico, correspondentes aos quatro primeiros lóbulos de Mott do diagrama de fases. Como esperado, as componentes do parâmetro superfluido se anulam no ponto da transição.

Na Fig. 4.2(b), apresenta-se também a fração do condensado definida pela relação:

$$\rho_C = \frac{\sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}|^2}{\langle n \rangle}, \quad \langle n \rangle = \sum_{\alpha} n_{\alpha}. \quad (4.23)$$

Essa grandeza poder ser utilizada como parâmetro de ordem, pois está escrita em termo das componentes ψ_{α} . Note que para valores de μ_0/U dentro dos lóbulos de Mott caracterizados por ocupação ímpar e *spin* total um a transição de fases é de segunda ordem, pois tanto as componentes do parâmetro superfluido quanto a fração do condensado tendem continuamente a zero no ponto da transição. Tal comportamento é sinalizado pelas curvas com símbolos

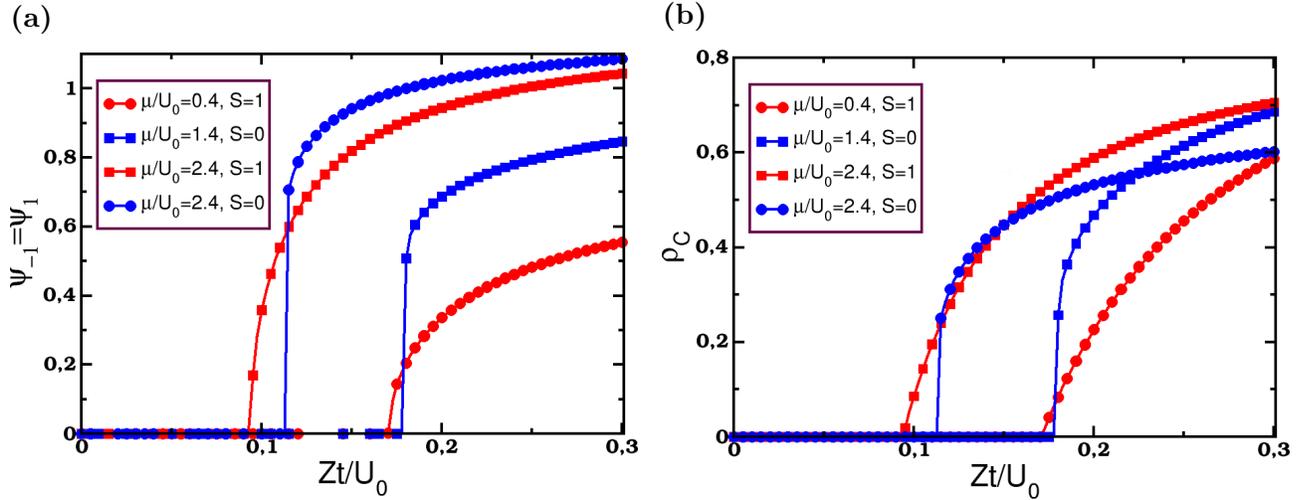


Figura 4.2 (a) Componentes do parâmetro superfluido ψ_α ($\alpha = -1, 1$) em função de Zt/U_0 . (b) Fração do condensado ρ_C em função de Zt/U_0 . Os valores de μ/U_0 foram escolhidos de modo a representar cada um dos lóbulos do diagrama de fases da Fig. 4.1.

vermelhos. Entretanto, as curvas com símbolos azuis para as componentes de ψ_α e ρ_C , para valores de μ_0/U dentro dos lóbulos de Mott caracterizados por ocupação par e *spin* total zero apresentam um salto descontínuo no ponto da transição, característico de uma transição de fase de primeira ordem.

Um cálculo numérico realizado recentemente utilizou a aproximação de campo médio de Gutzwiller [80] e mostrou que para um valor de interação $U_2/U_0 \approx 0.2$ a transição de fase de primeira ordem se converte em uma de segunda ordem.

Na Fig. 4.3(a) apresenta-se o desvio padrão da ocupação

$$\Delta n = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}, \quad (4.24)$$

que é zero para todos valores de Zt/U_0 dentro da fase Mott nessa aproximação. Isso ocorre porque a ocupação $\langle n \rangle$ é constante dentro dessa fase e diferente de zero na fase superfluido.

Uma outra grandeza de interesse é o valor esperado do quadrado do operador de *spin*, $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$, e que está representado na Fig. 4.3(b). Observa-se que para valores μ/U_0 dentro dos lóbulos de Mott caracterizados por ocupação par, tem-se valores de $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ igual a zero, pois o *spin* total é zero dentro destes lóbulos e diferente de zero na fase superfluido. Entretanto, para os outros

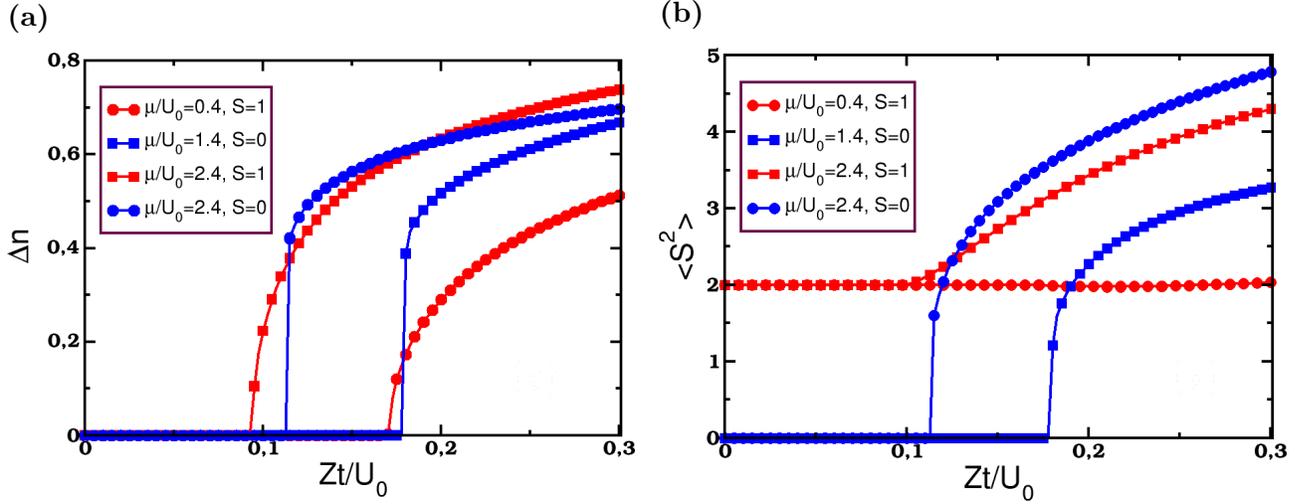


Figura 4.3 (a) Desvio padrão da ocupação Δn em função de Zt/U_0 . (b) Valor esperado do quadrado do operador de *spin*, $\langle S^2 \rangle$ em função de Zt/U_0 . Os valores de μ/U_0 foram escolhidos de modo a representar cada um dos lóbulos do diagrama de fases da Fig. 4.1.

valores de μ/U_0 dentro dos lóbulos de Mott com $\langle n \rangle$ ímpar, $\langle S^2 \rangle$ é igual a 2, pois o *spin* total é 1. No entanto, na fase superfluido, $\langle S^2 \rangle$ apresenta uma dependência não trivial com Zt/U_0 .

A próxima seção contém uma análise dos efeitos da desordem sobre o diagrama de fases e também sobre as grandezas utilizadas na caracterização das fases.

4.4 Efeitos da desordem: estudo mediante *SMFT*

Nesta seção são apresentados os resultados de maior relevância do presente capítulo. Decorrem do estudo dos efeitos da desordem no modelo de Bose-Hubbard para partículas com *spin*-1, utilizando a teoria estocástica de campo médio. A implementação da *SMFT* pode ser realizada com um algoritmo similar ao descrito na seção 3.3, com a diferença de que o parâmetro de ordem ψ_α tem agora três componentes ($\psi_{-1}, \psi_0, \psi_1$), gerando de forma auto-consistente três funções de distribuição $P(\psi_\alpha)$ para cada componente. Tal procedimento acarreta maior custo computacional.

As energias aleatórias ϵ_i do hamiltoniano da Eq. (4.20) são parametrizadas por uma distribuição uniforme de largura 2Δ , onde o parâmetro Δ representa a intensidade da desordem. Todos os cálculos foram realizados considerando $U_2/U_0 = 0.3$.

Em seguida, apresenta-se as distribuições de probabilidade e os valores médios das principais

grandezas que permitem caracterizar as fases.

4.4.1 Parâmetro superfluido

Como já tinha-se discutido antes no caso desordenado para distinguir as fases superfluida, isolante de Mott e à fase vidro de Bose é preciso utilizar duas grandezas, o parâmetro superfluido e a compressibilidade. O primeiro serve para diferenciar a fase superfluido, das fases isolante de Mott e à fase vidro de Bose; entanto a compressibilidade diferencia entre as fases isolante de Mott e vidro de Bose.

Na Fig. 4.4, apresenta-se em escala de cores as componentes $\psi_{-1} = \psi_1$ do parâmetro de ordem no plano $(Zt/U_0, \mu_0/U_0)$. A Fig. 4.4(a) representa o sistema homogêneo (caso limpo) e a Fig. 4.4(b) o caso desordenado. Observa-se que no caso desordenado a fase isolante de Mott começa a desaparecer e tem início a formação da fase vidro de Bose como será mostrado posteriormente utilizando a compressibilidade. Nota-se que o efeito da desordem é mais relevante nos lóbulos de Mott com ocupação ímpar onde o estado singlete é proibido ($S = 1$). A explicação física deste fato é similar à do caso homogêneo. Os átomos nesse caso podem pular

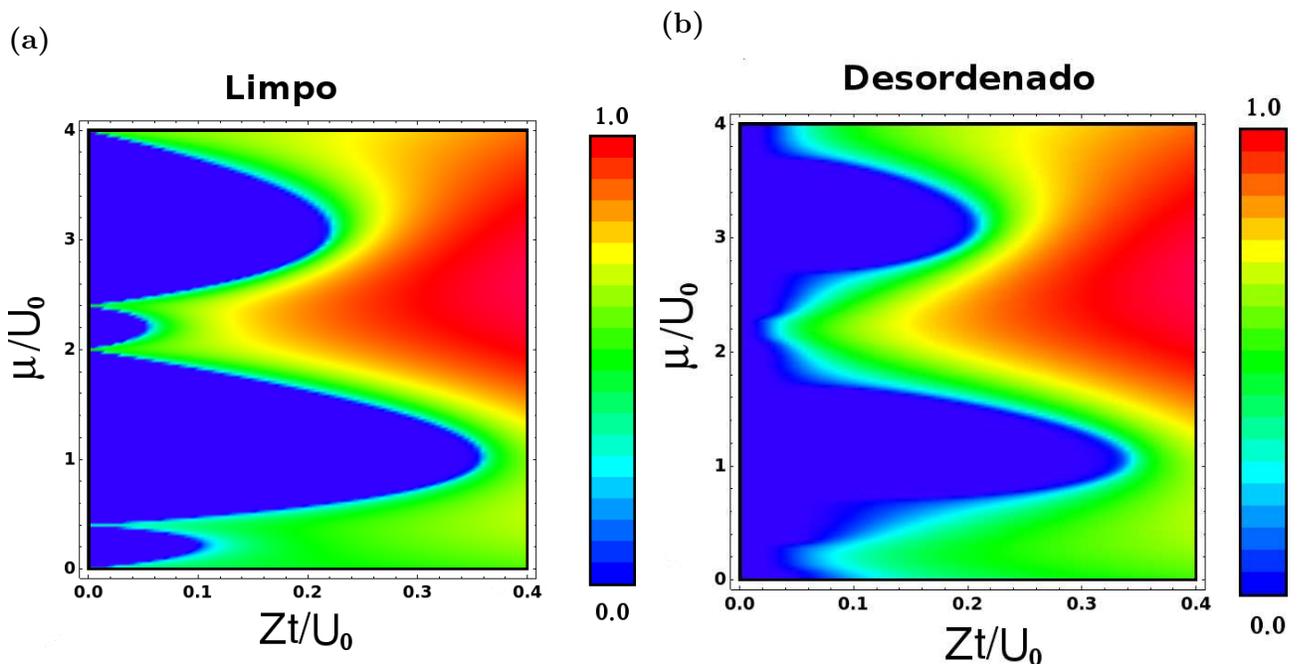


Figura 4.4 Componentes do parâmetro de ordem no plano $(Zt/U_0, \mu/U_0)$, para os casos (a) limpo e (b) desordenado.

com facilidade para os sítios vizinhos, favorecendo a fase vidro de Bose. Entretanto a fase Mott onde o estado singlete ($S = 0$) é permitido é mais robusta em relação aos efeitos de desordem, pois as interações produzem uma forte localização nos sítios. Note que na Fig. 4.4(b), os lóbulos de Mott com ocupação par e $S = 0$ persistem mesmo na presença da desordem.

As funções de distribuição do parâmetro superfluido são apresentadas na Fig. 4.5. Vale comentar que a mesma simetria do estado polar superfluido do caso homogêneo ($\psi_{-1} = \psi_1, \psi_0 = 0$) é mantida para as distribuições no caso não homogêneo, pois $P(\psi_{-1}) = P(\psi_1)$ e $P(\psi_0) = \delta(0)$. Na Fig. 4.5(a), a distribuição $P(\psi_1)$ é mostrada para o valor de potencial químico $\mu/U_0 = 0.1$ e para diversos valores de Zt/U_0 indo da fase superfluido à fase vidro de Bose. Note que para Zt/U_0 dentro da fase superfluido, a distribuição $P(\psi_{-1})$ é bem alargada, mas quando entra-se na fase BG , a distribuição possui a forma da função delta de Dirac. Isso é devido ao fato do parâmetro superfluido ser nulo na fase vidro de Bose. Além disso, tal comportamento é similar ao encontrado no modelo de Bose-Hubbard desordenado para partículas com *spin* zero.

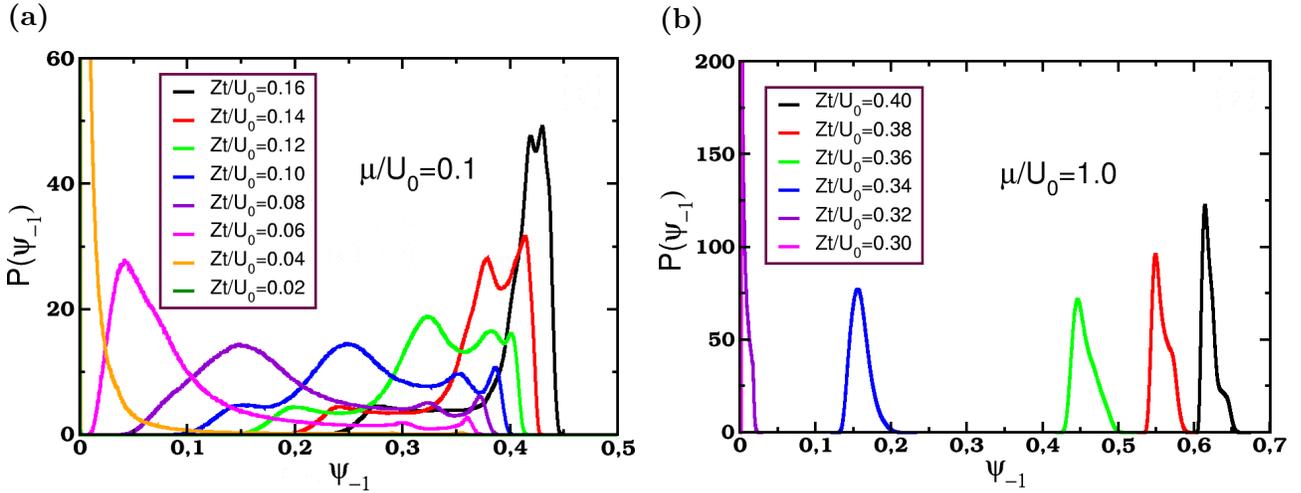


Figura 4.5 Distribuições de probabilidade para as componentes do parâmetro de ordem $P(\psi_{-1}) = P(\psi_1)$. Elas foram calculadas para dois valores de μ/U_0 como função do parâmetro de hopping Zt/U_0 .

Na Fig. 4.5(b) apresenta-se a distribuição $P(\psi_{-1})$ para o valor $\mu/U_0 = 1.0$ (neste caso indo da fase superfluido à fase isolante de Mott). Pode-se notar que, para pontos de Zt/U_0 dentro da fase isolante de Mott, $P(\psi_{-1})$ também é uma função delta de Dirac (pois o parâmetro superfluido também se anula nessa fase). Vale destacar que para este valor de potencial químico

($\mu/U_0 = 1.0$) é favorecida a formação do estado singlete. Tal estado corresponde ao lóbulo de Mott do caso limpo caracterizado por $S = 0$ e ocupação par. Assim, na presença de desordem ($\Delta/U_0 = 0.3$), a fase isolante de Mott com ocupação par é mais robusta e a distribuição $P(\psi_{-1})$ sofre apenas uma pequena modificação em relação ao caso limpo (vale ressaltar que no caso limpo a distribuição é uma função delta de Dirac).

4.4.2 Compressibilidade

Uma grandeza de extrema importância para diferenciar a fase isolante de Mott da fase vidro de Bose é a compressibilidade $\kappa = \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \mu}$. Tal grandeza é finita no *BG*, pois a ocupação varia com o potencial químico. Além disso é zero na fase isolante de Mott (*MI*), pois neste caso a ocupação é constante com relação a variação de μ .

Na Fig. 4.6 apresenta-se κ em uma escala de cores no plano $(Zt/U_0, \mu/U_0)$ ilustrando os casos limpo e desordenado do modelo. No caso limpo (Fig. 4.6(a)), a compressibilidade é zero

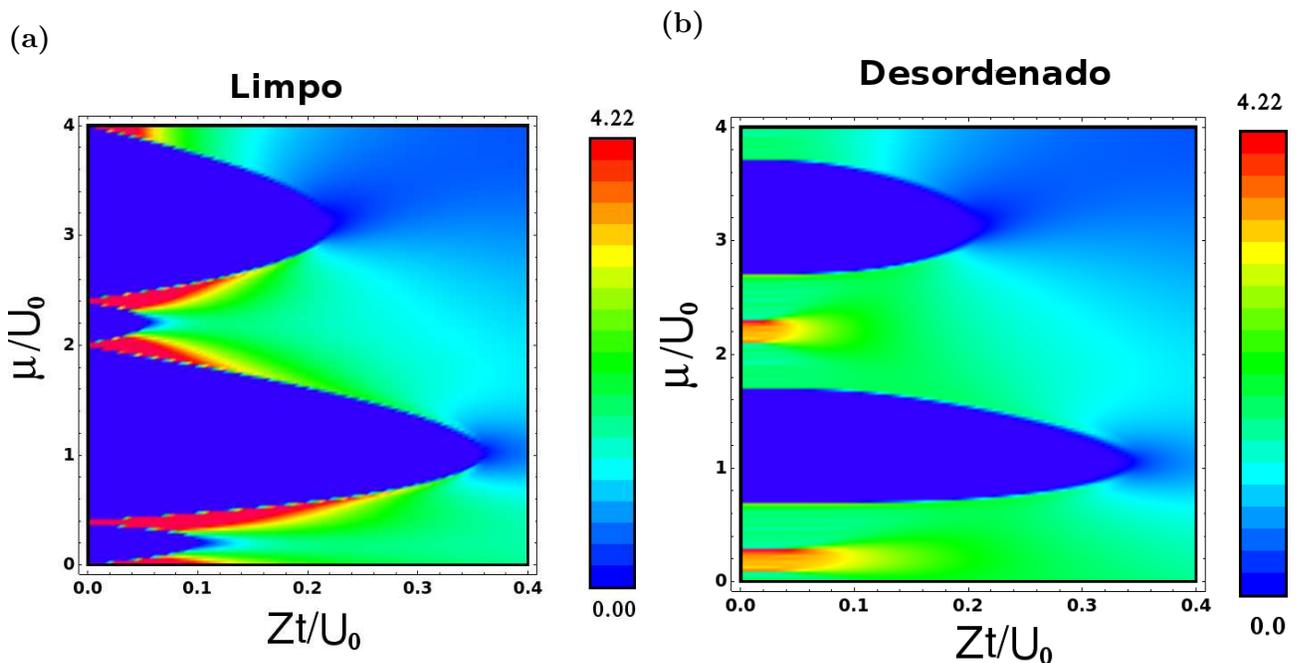


Figura 4.6 Compressibilidade no plano $(Zt/U_0, \mu/U_0)$. (a) Caso limpo e (b) caso desordenado.

nos lóbulos de Mott e diferente de zero nas outras regiões do diagrama de fases. Porém, a grandeza κ diverge para valores $Zt/U_0 \rightarrow 0$ entre dois lóbulos de Mott próximos. Por isso o máximo valor de κ (representado pela cor vermelha) está bem concentrado nos pontos de

hopping pequeno. Esta divergência de κ deve-se que a ocupação ($\langle n \rangle$) tem um salto abrupto quando muda de uma fase de para outra.

Na Fig. 4.6(b) apresenta-se κ no plano $(Zt/U_0, \mu/U_0)$ para o caso não homogêneo. Aqui, a compressibilidade é novamente zero na fase isolante de Mott caracterizada por ocupação par e *spin* total 0. Entretanto na fase isolante de Mott correspondente ao *spin* total 1 e ocupação ímpar (no caso limpo), transformou-se em fase vidro de Bose, pela presença de desordem. Aqui a compressibilidade é finita. Vale comentar que, para o caso desordenado, na escala de cores de κ há regiões de cor azul na fase superfluido, onde $\kappa \neq 0$. Isso deve-se que a escala de cores não é suficientemente fina.

Na Fig. 4.7, mostra-se a compressibilidade em função de μ/U_0 para três valores de Zt/U_0 para os casos limpo (Fig. 4.7(a)) e desordenado (Fig. 4.7(b)). Para o valor $Zt/U_0 = 0.025$ nota-se que no caso limpo (Fig. 4.7(a)), κ é zero quando são atravessados os lóbulos de Mott, e κ é finita nas regiões da fase superfluido. Para este valor de *hopping* pequeno $Zt/U_0 = 0.025$, κ diverge entre dois lóbulos de Mott bem próximos. Nota-se por exemplo que, na Fig. 4.7(a), κ está limitada até o valor $\kappa_{max} = 6$ escolhido de forma arbitrária. Porém para este mesmo valor

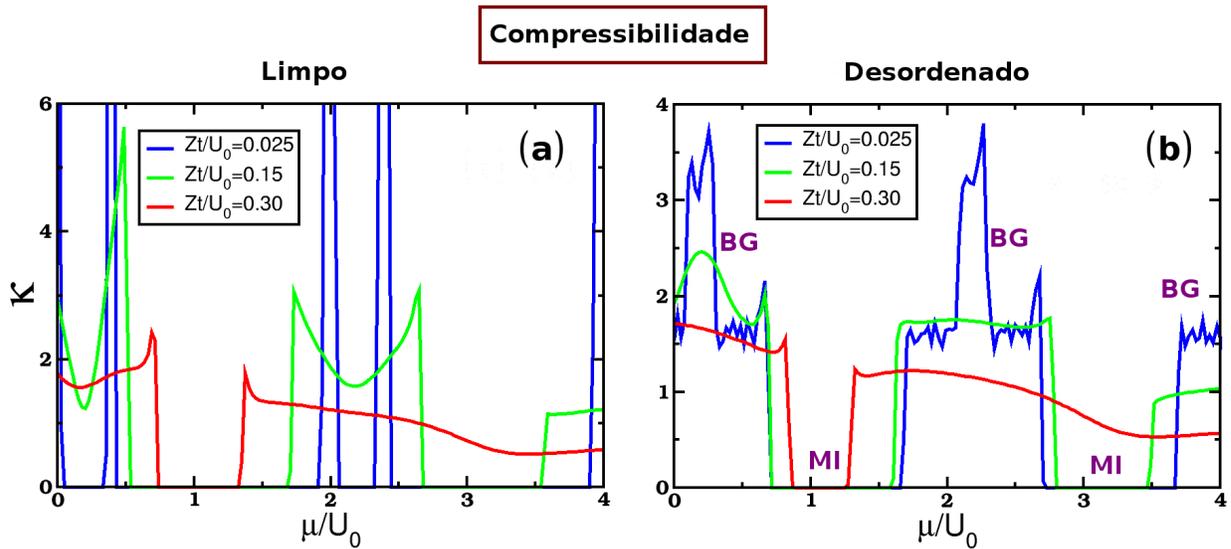


Figura 4.7 Compressibilidade em função de μ/U_0 para vários valores do *hopping* Zt/U_0 . (a) Caso limpo e (b) caso desordenado.

do parâmetro de *hopping* (Zt/U_0), nota-se que no caso desordenado (Fig. 4.7(b)) a fase Mott

começa a diminuir. Aparece então a fase BG , onde κ torna-se diferente de zero. Para os outros valores de *hopping*, $Zt/U_0 = 0.15$ e 0.30 , a compressibilidade pode ser zero ou finita, tanto no caso limpo ou desordenado. Isso depende dos valores de μ/U_0 estarem dentro da fase isolante de Mott ou na fase superfluida.

4.4.3 Fração do condensado

Como tinha-se discutido anteriormente, a fração do condensado ρ_c também serve como parâmetro de ordem para descrever a transição de fase no caso limpo. Na Fig. 4.8, apresenta-se ρ_C em uma escala de cores para os casos limpo e desordenado para o modelo de Bose-Hubbard com *spin*-1. Nota-se que no caso limpo (Fig. 4.8(a)) a fronteira do diagrama de fases é determinada quando essa grandeza é zero. No entanto no caso desordenado (Fig. 4.8(b)) quando a média de ρ_c é zero só é determinado a fronteira entre a fase superfluida e as outras fases, pois para distinguir entre a fase isolante de Mott e vidro de Bose deve-se utilizar a compressibilidade, como já foi discutido anteriormente.

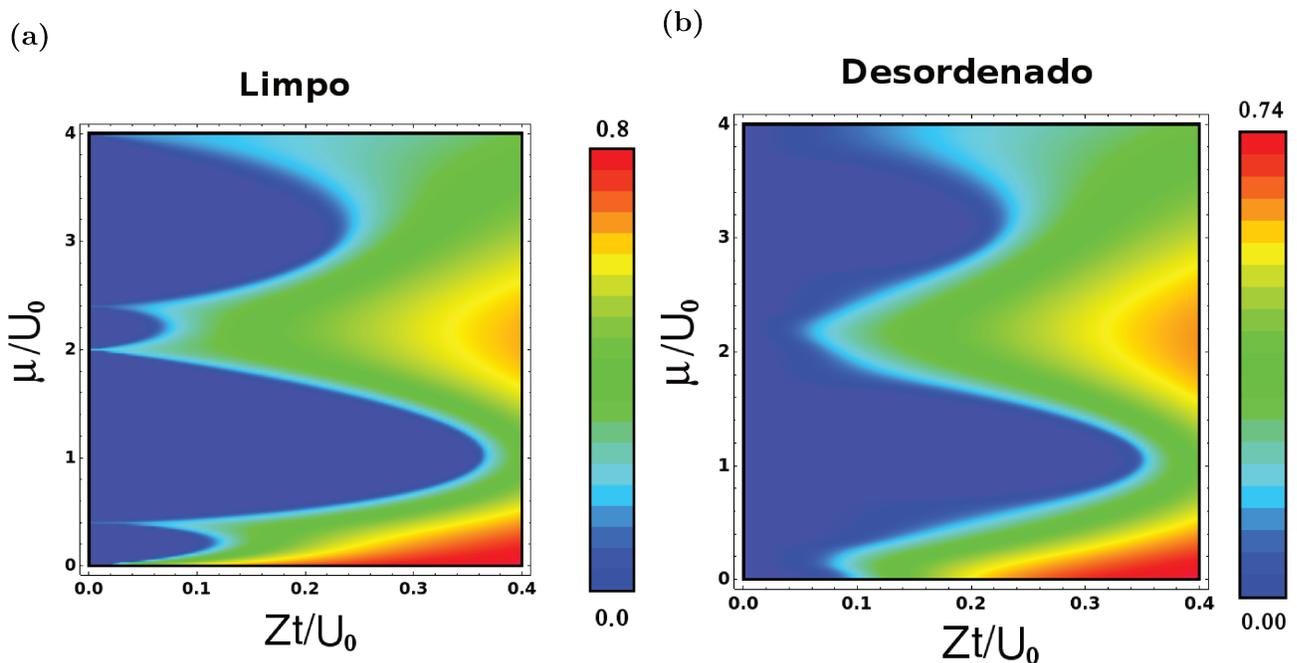


Figura 4.8 Fração do condensado ρ_C . O valor de ρ_C é apresentado através de uma escala de cores. (a) Caso limpo e (b) caso desordenado.

A Fig. 4.9 apresenta a distribuição da ocupação $P(\overline{\langle n \rangle})$ para dois valores potencial químico

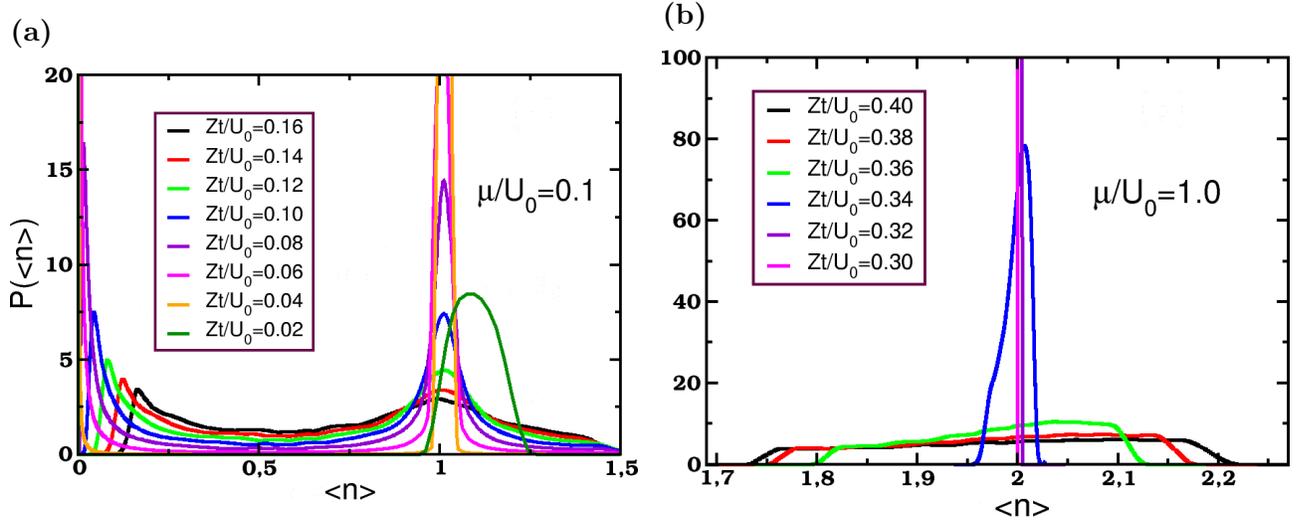


Figura 4.9 Distribuição de probabilidade $P(\langle n \rangle)$ em função de $\langle n \rangle$ para diversos valores do parâmetro Zt/U_0 , e dois valores potencial químico (a) $\mu/U_0 = 0.1$ e (b) $\mu/U_0 = 1.0$.

μ/U_0 e para diversos valores de Zt/U_0 (indo da fase superfluida à fase *BG*). Nota-se que na Fig. 4.9(a) a distribuição tem um comportamento bimodal e apresenta dois picos localizados ao redor dos valores 0 e 1, para valores de Zt/U_0 próximos aos da fase vidro de Bose. De outro lado para o valor de potencial químico $\mu/U_0 = 1.0$ (Fig. 4.9(b)) onde Zt/U_0 varia da fase superfluida à fase Mott, a distribuição $P(\langle n \rangle)$ flutua em torno de $\langle n \rangle = 2$ e torna-se uma função delta de Dirac para valores dentro da fase Mott, pois dentro desta fase $\langle n \rangle = 2$.

Na Fig. 4.10 mostra-se também a distribuição de probabilidade de ρ_C para dois valores de

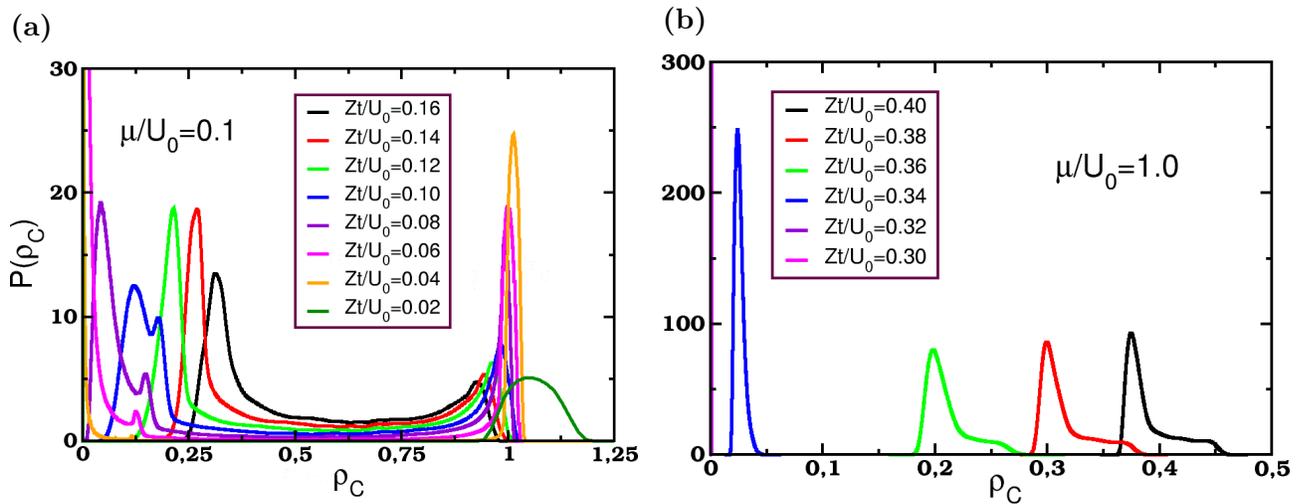


Figura 4.10 Distribuição de probabilidade de ρ_C para dos valores do potencial químico e vários valores do parâmetro de hopping Zt/U_0 .

μ/U_0 . Na Fig. 4.10 (a), a grandeza $P(\rho_C)$ varia com Zt/U_0 da fase superfluido à fase vidro de Bose. Nota-se que neste caso a distribuição apresenta um comportamento bimodal, com picos predominantes para ocupações 0 e 1, pois a densidade do condensado depende no denominador da ocupação média ($\langle n \rangle$) e para $\mu/U_0 = 0.1$ prevalecem ocupações médias por sítios zero e um.

Na Fig. 4.10 (b), observa-se que $P(\rho_C)$ apresenta uma largura bem menor comparada ao caso $\mu/U_0 = 0.1$. Ela tende a uma função delta de Dirac para valores de Zt/U_0 variando da fase superfluido para a fase isolante de Mott. Pois as componentes do parâmetro de ordem se anulam dentro da fase isolante de Mott.

4.4.4 Desvio padrão da ocupação

Na Fig. 4.11 apresenta-se a média do desvio padrão da ocupação $\overline{\langle \Delta n \rangle}$ para os casos do sistema limpo (Fig. 4.11(a)), e no caso do sistema desordenado (Fig. 4.11(b)). Observa-se que no caso limpo $\overline{\langle \Delta n \rangle}$ é zero na isolante de Mott, pois nesta teoria de um só sítio a fase isolante de Mott não apresenta flutuação (vide o cor azul na escala de cores). Entretanto na fase superfluida tanto para os casos limpo e desordenado, o parâmetro de ordem $\psi_\alpha \neq 0$ e portanto $\overline{\langle \Delta n \rangle}$ é diferente de zero. Outro ponto relevante é que na fase vidro de Bose, $\overline{\langle \Delta n \rangle}$ é nulo como no caso isolante de Mott (Fig. 4.11(b)). Isso deve-se que o parâmetro de ordem é nulo na fase BG e portanto a média quântica $\langle \Delta n \rangle$ também é nula em cada sítio, em consequência a média realizada na desordem $\overline{\langle \Delta n \rangle}$ é zero. Agora, isso não significa que a ocupação por sítio $\langle n_i \rangle$ seja zero na fase vidro de Bose, pois como foi mostrado a fase é caracterizada por uma compressibilidade finita, o qual acarreta que a ocupação por sítio seja finita.

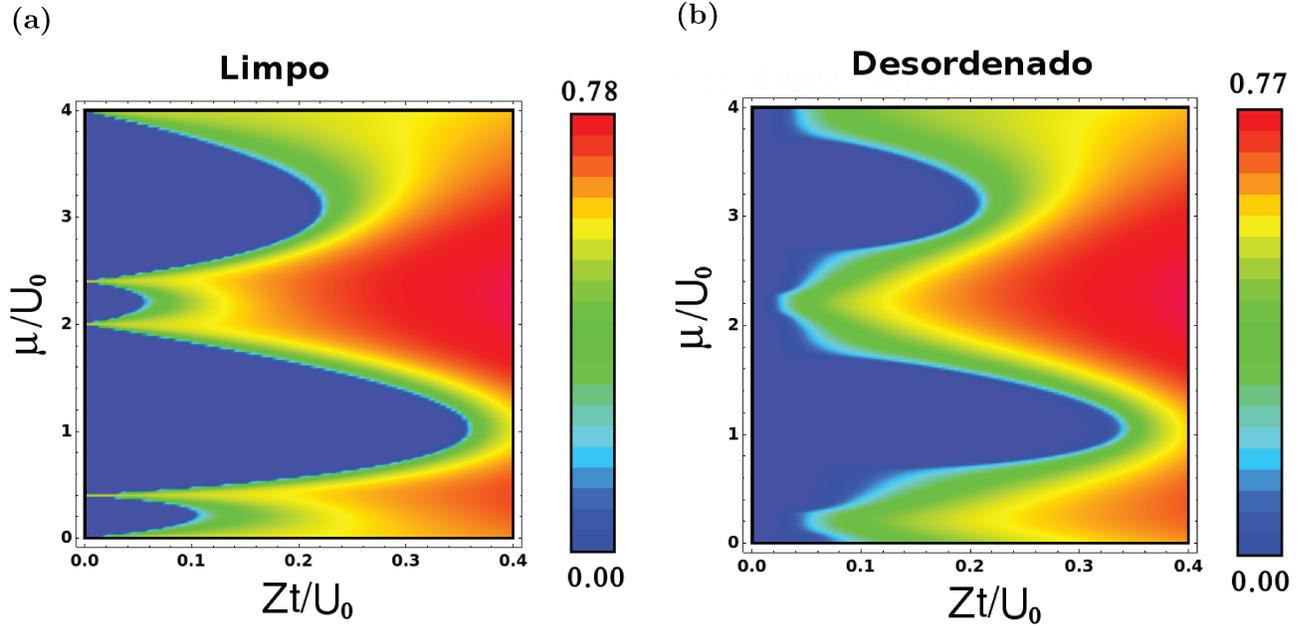


Figura 4.11 Desvio padrão da ocupação no plano $(\mu/U_0, Zt/U_0)$. (a) Caso limpo e (b) desordenado.

Na Fig. 4.12 é apresentada a distribuição de probabilidade do desvio padrão da ocupação $P(y)$ onde $y = \overline{\langle \Delta n \rangle}$, traçada para dois valores diferentes do potencial químico $\mu/U_0 = 0.1$, que

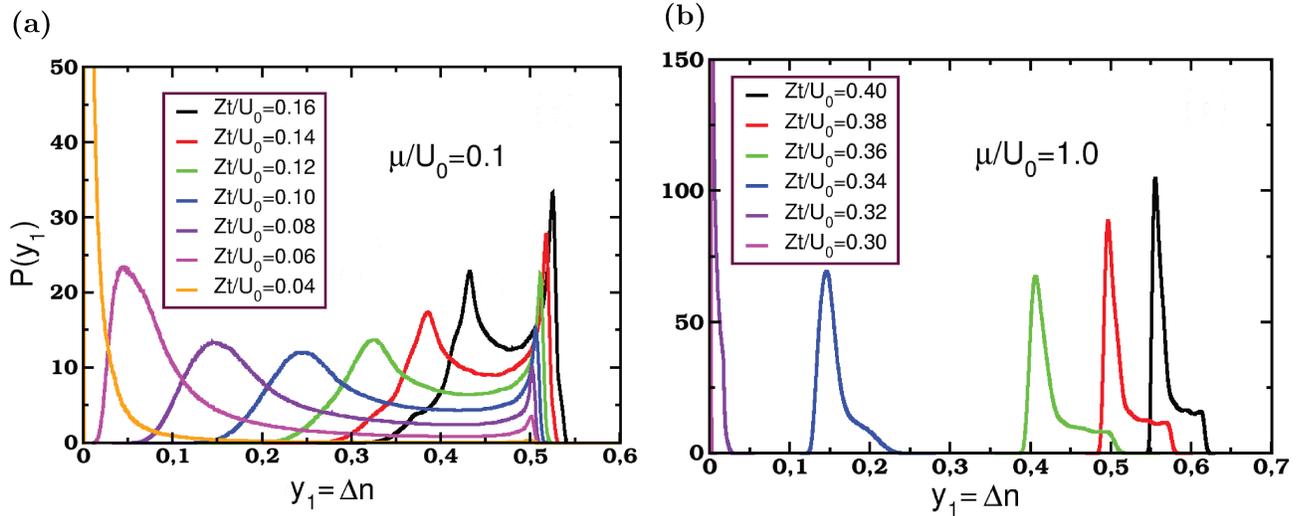


Figura 4.12 Distribuição de probabilidade de Δn para dois valores do potencial químico, (a) $\mu/U_0 = 0.1$ e (b) $\mu/U_0 = 1.0$, e também para diversos valores do parâmetro de hopping Zt/U_0 .

corresponde aos pontos em Zt/U_0 saindo da fase *BG* e entrando na fase superfluido (Fig. 4.12(a)); e $\mu/U_0 = 1.0$, que corresponde a pontos em Zt/U_0 movimentando-se da fase superfluido à fase isolante de Mott (Fig. 4.12(b)). Nota-se que o comportamento desta distribuição é bem parecida á distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem $P(\psi_\alpha)$ mostrado na Fig. 4.5.

Isso prova a afirmação feita linha antes no qual desvio padrão da ocupação é nulo nas fases isolante de Mott e vidro de Bose, e finita na fase superfluida.

4.4.5 Spin

Uma outra grandeza de importância na caracterização das fases é o valor esperado do quadrado do operador de *spin* \mathbf{S} . Com o intuito de comparar os casos homogêneo e não homogêneo, mostra-se em uma escala de cores na Fig. 4.13 a grandeza $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$. Note que no caso limpo (Fig. 4.13(a)), $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ varia entre zero e dois quando atravessa os lóbulos de Mott, sendo $\langle \mathbf{S}^2 \rangle = 2$ na fase isolante de Mott caracterizada por uma ocupação por sítio ímpar e *spin* total

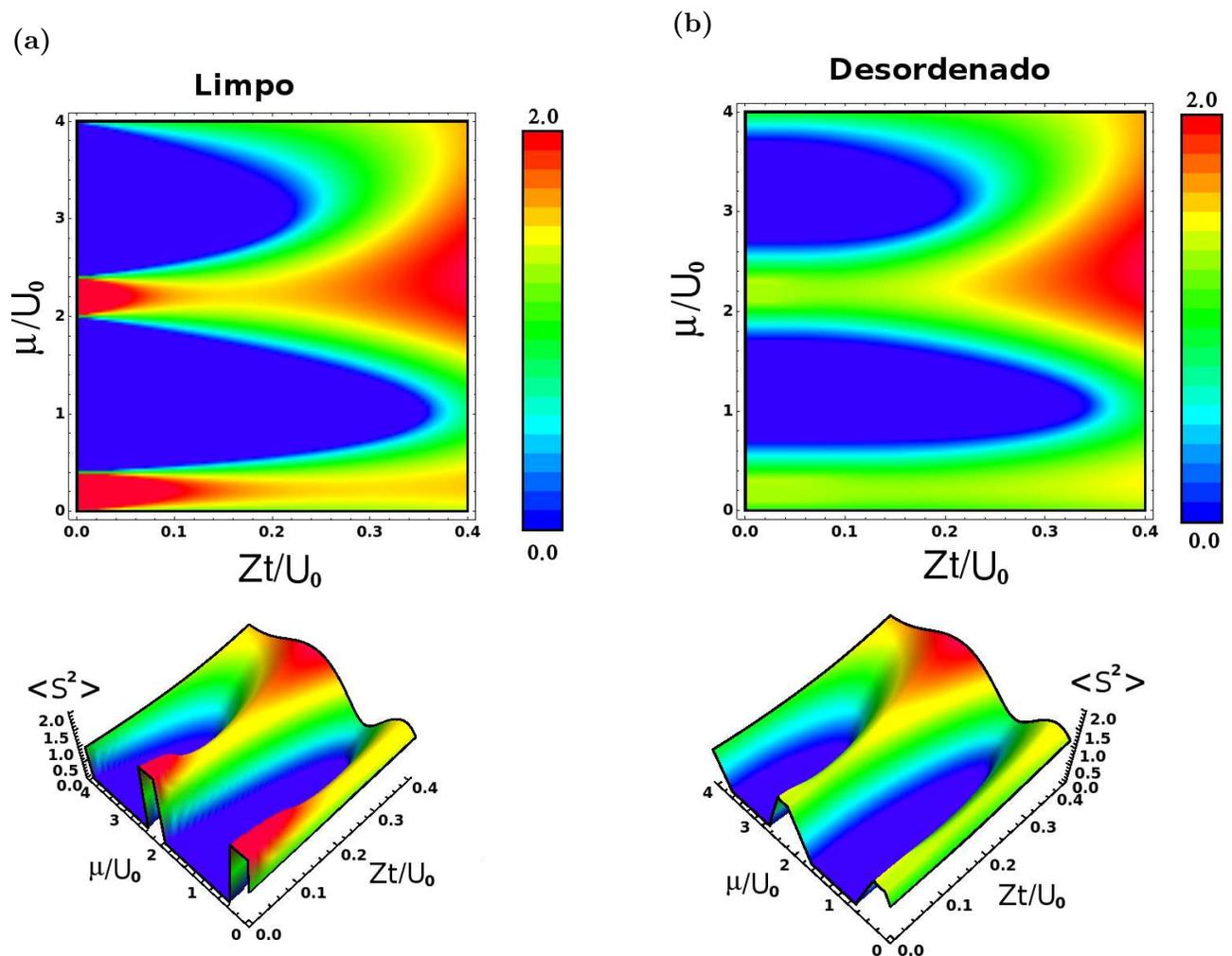


Figura 4.13 Valor esperado do quadrado do operador do *spin* $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ no plano $(Zt/U_0, \mu/U_0)$, (a) caso limpo e (b) caso desordenado.

1, e $\langle \mathbf{S}^2 \rangle = 0$ nos lóbulos de Mott com ocupação par e *spin* total 0. Na Fig. 4.13(b) apresenta-se $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ para o caso desordenado. Note-se que ainda para os lóbulos de Mott caracterizados com ocupação par, $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ é zero, pois estes lóbulos são mais robustos na presença de efeitos da desordem, como foi discutido anteriormente. Agora para os lóbulos de Mott caracterizados por ocupação ímpar, $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ no caso desordenado oscila entre zero e dois como é mostrado na escala de cores da Fig. 4.13(b).

A distribuição de probabilidade do valor esperado do quadrado do operador de *spin*, $P(y_2)$ onde $y_2 = \langle \mathbf{S}^2 \rangle$, é mostrada na Fig. 4.14 para dois valores de μ/U_0 e diversos valores do parâmetro de *hopping* Zt/U_0 . Observa-se que na Fig. 4.14(a), a distribuição apresenta um comportamento bimodal para pontos de Zt/U_0 movendo-se da fase superfluido à fase vidro de Bose. Tal comportamento torna-se interessante, pois isso mostra que a fase vidro além de apresentar flutuação da ocupação por sítio, também é caracterizada pela flutuação de *spin*. Entretanto na Fig. 4.14(b) para pontos de Zt/U_0 indo da fase superfluido a isolante de Mott, a distribuição volta novamente a ter um comportamento de uma função delta Dirac, pois $\langle \mathbf{S} \rangle$ é nulo para estes lóbulos caracterizados por ocupação par.

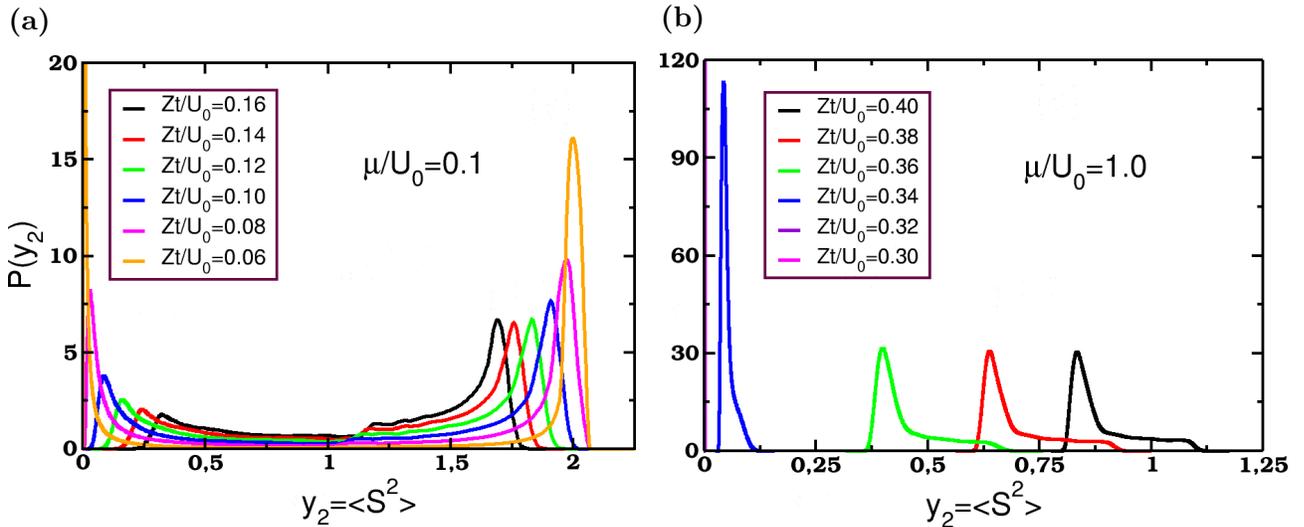


Figura 4.14 Distribuição de probabilidade $P(\langle S^2 \rangle)$ em função de $\langle S^2 \rangle$ para vários valores dos parâmetros Zt/U_0 . Os valores do potencial químico usados no cálculo foram (a) $\mu/U_0 = 0.1$ e (b) $\mu/U_0 = 1.0$.

4.5 Variando a desordem

Nesta seção estudamos o regime de desordem forte ($\Delta \geq U$). Em particular, será analisado como a desordem induz a transição de fase. Tinha-se discutido na seção 4.4 que os lóbulos de Mott caracterizados por ocupação par e *spin* total zero são mais robustos com relação a desordem, favorecendo a formação de estados singletos. Isso se deve ao fato de que interação proveniente do *spin* produz uma forte localização nas partículas por sítio. A tarefa é estudar como a desordem forte pode destruir esses lóbulos de Mott. Escolhendo o valor de potencial químico $\mu/U_0 = 1.0$ e o *hopping* $Zt/U_0 = 0.3$ apresenta-se na Fig. 4.15 as distribuições das grandezas parâmetro de ordem, fração do condensado, flutuação da ocupação e valor esperado do quadrado do operador de *spin*, para distintos valores da intensidade da desordem. O valor $\Delta/U_0 = 1.0$ corresponde à fase superfluido, e quando a desordem é incrementada entra-se na fase vidro de Bose. Isso pode ser evidenciado por exemplo no comportamento das distribuições das componentes do parâmetro de ordem $P(\psi_\alpha)$ (ver Fig. 4.15(a)). Nota-se que para o valor de desordem $\Delta/U_0 = 1.0$, a distribuição $P(\psi_\alpha)$ tem suporte em valores de $\psi_\alpha \neq 0$ característica da fase superfluido, e quando a Δ/U é incrementada, $P(\psi_\alpha)$ torna-se continuamente uma função delta de Dirac. Este comportamento na distribuição $P(\psi_\alpha)$ sinaliza a fase vidro de Bose. As características das outras distribuições apresentadas na Fig. 4.15 são similares ao comportamento quando é fixo um valor de Δ/U e varia-se o parâmetro de *hopping* Zt/U da fase superfluido à fase vidro de Bose. Tal análise foi apresentada na seção 4.4.

4.6 Conclusões

Apresentou-se um estudo dos efeitos da desordem sobre o modelo de Bose-Hubbard para partículas com *spin*-1. Tal análise foi feita utilizando-se a teoria estocástica de campo médio. Para caracterizar as fases presentes nesse modelo foram calculadas os valores médios e as distribuições das principais grandezas, tais como o parâmetro de ordem, a fração do condensado, o desvio padrão da ocupação e o quadrado do operador de *spin*.

Ressalte-se que no estudo apresentado considerou-se apenas o acoplamento antiferromagnético, onde o parâmetro de interação U_2 é positivo. Isso leva, no caso do sistema homogêneo, ao

comportamento $\psi_{-1} = \psi_1$ e $\psi_0 = 0$ nas componentes do parâmetro de ordem. No caso desordenado, observa-se um comportamento similar nas distribuições das componentes do parâmetro de ordem ($P(\psi_{-1}) = P(\psi_1)$ e $P(\psi_0) = \delta(0)$).

Outro ponto relevante apresenta-se na Fig. 4.16(a), onde a distribuição $P(x)$ é traçada em função de $x = \log(\psi_{-1})$ para distintos valores do parâmetro de *hopping* Zt/U_0 perto da região crítica e para um valor do potencial químico $\mu/U_0 = 0.1$. Na Fig. 4.16(b) apresenta-se $\log(P(x))$ em função de $x = \log(\psi_{-1})$. Nota-se que existe um comportamento linear ($\log(P(x)) \sim -\beta x$)

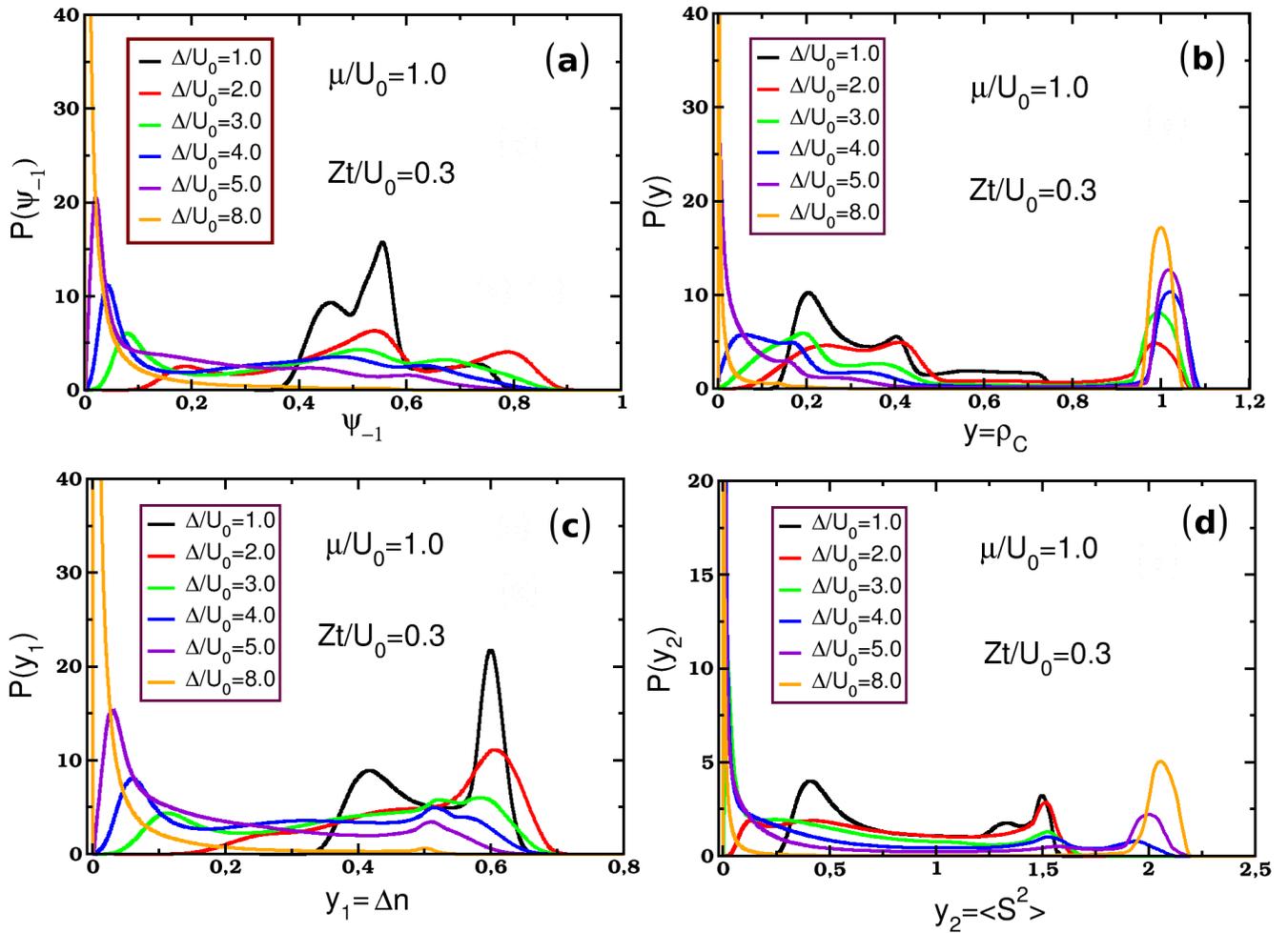


Figura 4.15 Distribuições de probabilidade das grandezas: (a) parâmetro de ordem, (b) fração do condensado, (c) desvio padrão da ocupação e (d) valor esperado do operador de *spin* ao quadrado, para vários valores da desordem Δ/U_0 .

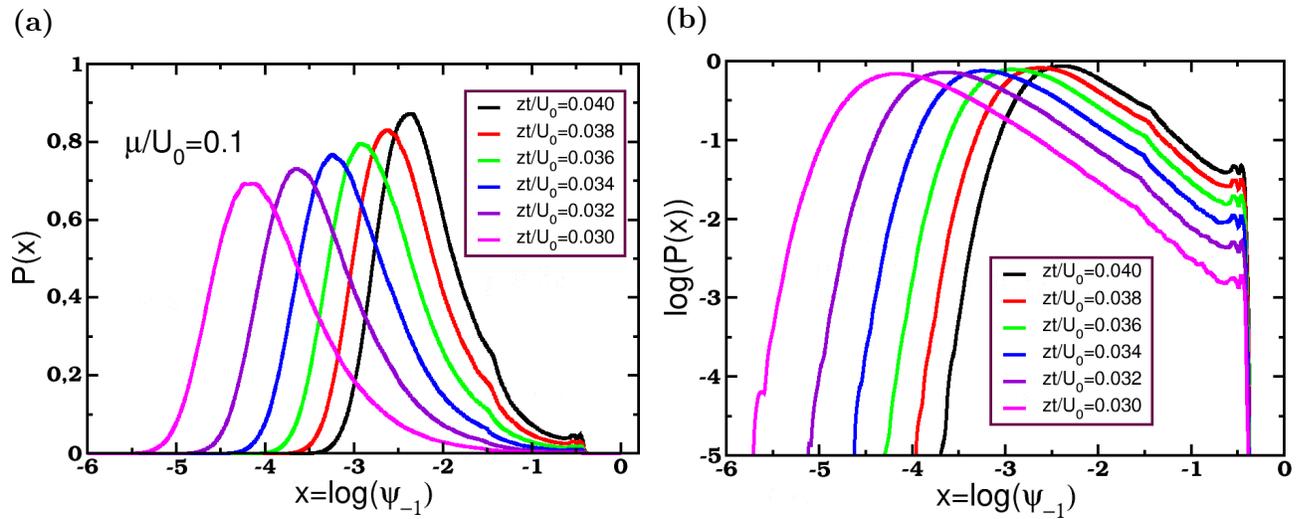


Figura 4.16 (a) Comportamento na região crítica de $P(x)$ em função de $x = \log(\psi_{-1})$. (b) Em uma escala log-log apresenta-se $\log(P(x))$ em função de x . Os parâmetros utilizados no cálculo foram $U_2/U_0 = 0.3 = \Delta/U_0$ e $\mu/U_0 = 0.1$.

para valores de ψ_{-1} “grandes” ($\psi_{-1} \simeq 10^{-3}$). Tal comportamento em $P(x)$ leva a uma lei de potência nas distribuições das componentes do parâmetro de ordem $P(\psi_{-1}) \sim \psi_{-1}^\beta$ no ponto crítico da transição. O expoente β neste caso é $\beta = 0.76 < 1$. Este comportamento é similar ao estudado na seção 3.4 do capítulo anterior.

5

Considerações Finais

Sistemas atômicos ultra-frios tem-se tornado muito atraentes como ferramentas de investigação na Física de Matéria Condensada. As correlações induzidas pelas interações atômicas, desordem e o *spin*, dão origem a fenômenos interessantes. Dentre eles, pode-se citar a transição de fase superfluido-isolante de Mott [13]. Neste trabalho foram estudadas as distintas fases quânticas no modelo de impureza única de Anderson para bósons [19, 20], e no modelo de Bose-Hubbard desordenado para partículas com *spin* zero [14] e um [66]. Mostrou-se que a inclusão de pequenos campos externos no modelo de impureza única bosônica de Anderson permite definir o parâmetro de ordem (parâmetro superfluido), que caracteriza a transição de fases. Alguns dos resultados obtidos foram comparados com outros já conhecidos, decorrentes de um estudo onde foi utilizado o método do grupo de renormalização numérico (*NRG*) [19, 20]. Enquanto a transição de fase nas referências [19, 20] foi assinalada através do valor do *gap*, nós utilizamos o parâmetro de ordem superfluido como critério, obtendo bons resultados.

Também foram estudados os efeitos de desordem sobre a transição de fase superfluido-isolante de Mott. Mostrou-se em particular o primeiro estudo analítico dentro da teoria estocástica de campo médio [33, 34], que permitiu determinar o diagrama de fases do modelo de Bose-Hubbard desordenado perto do ponto crítico da transição de fases.

Finalmente, efeitos do *spin*, juntamente com a desordem, foram considerados no modelo de Bose-Hubbard. No âmbito da teoria estocástica de campo médio, foram determinadas as distribuições de distintas grandezas físicas, assim como os valores médios que ajudaram a caracterizar a transição de fases.

Decorrentes deste estudo, surgem desafios teóricos interessantes como a caracterização das

fases quânticas no modelo de impureza bosônica generalizada, onde sejam levados em conta efeitos de interação entre a impureza e o reservatório [18]. Também seria interessante considerar os efeitos de temperatura finita no modelo desordenado de Bose-Hubbard com *spin*-1, caracterizando os casos de interações ferromagnética e anti-ferromagnética dentro da teoria estocástica de campo médio.

Outro estudo de interesse é a versão bosônica do modelo de Anderson desordenado da rede, cuja contra-parte fermiônica tem sido estudada utilizando a teoria dinâmica de campo médio, que inclui efeitos de localização de Anderson [81]. Surge também o desafio de traçar um paralelo experimental que permita a verificação de alguns dos modelos estudados, e o teste de importantes conceitos utilizados, como o parâmetro de ordem (parâmetro superfluido).

Apêndices

A

Função de Green não interagente

Neste apêndice apresenta-se o cálculo para a função de Green não interagente $G_0(\omega)$ introduzida na Eq. 2.16,

$$G_0(\omega) = -2\pi i N |\gamma_0|^2 \delta(\omega) + \sum_k \frac{|\gamma_k|^2}{\omega - E_k + i\eta} \quad (\text{A.1})$$

e mostra-se que o segundo termo em $G_0(\omega)$ pode ser reescrito de acordo com a Eq. 2.20,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(\omega) &= \sum_k \frac{|\gamma_k|^2}{\omega + i\eta - E_k} \\ &= \frac{1}{\omega + i\eta + \mu_0 - \mathcal{J}_0(\omega)}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde $\mathcal{J}_0(\omega)$,

$$\mathcal{J}_0(\omega) = \sum_n \frac{V_n^2}{\omega + i\eta - \varepsilon_n}. \quad (\text{A.3})$$

Considere-se o hamiltoniano não interagente escrito de forma geral como:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} b_i^\dagger b_j \quad (\text{A.4})$$

e seja a função de Green local para qualquer sítio j , definida de acordo com:

$$iG_j(t) = \langle \Phi_0 | T[b_j(t)b_j^\dagger(0)] | \Phi_0 \rangle \quad (\text{A.5})$$

e onde T é o operador de ordenamento temporal, $|\Phi_0\rangle$ é o estado fundamental não interagente do sistema

$$|\Phi_0(N)\rangle = |N, 0, 0\dots\rangle = \frac{(a_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle \quad (\text{A.6})$$

onde N bósons ocupam o estado de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ e nenhum outro estado é ocupado.

Utilizando,

$$T[b_j(t)b_j^\dagger(0)] = \begin{cases} b_j(t)b_j^\dagger(0), & t > 0, \\ b_j^\dagger(0)b_j(t), & t < 0, \end{cases}$$

e,

$$b_j(t) = e^{iHt}b_j(0)e^{-iHt}.$$

obtem-se,

$$\begin{aligned} iG_j(t) &= \Theta(t) \langle \Phi_0 | b_j(t)b_j^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle \\ &+ \Theta(-t) \langle \Phi_0 | b_j^\dagger(0)b_j(t) | \Phi_0 \rangle \\ &= e^{iE_0t} \langle \Phi_0 | b_j(0)e^{-iHt}b_j^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle \Theta(t) \\ &+ e^{-iE_0t} \langle \Phi_0 | b_j^\dagger(0)e^{iHt}b_j(0) | \Phi_0 \rangle \Theta(-t). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Expandimos agora os operadores b_j^\dagger e b_j em um novo conjunto de operadores a_k^\dagger e a_k , que criam e destroem partículas no espaço k

$$\begin{aligned} b_j &= \sum_k c_{jk}a_k \\ &= c_{j0}a_0 + \sum'_k c_{jk}a_k, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

onde o símbolo \sum' significa que o termo $k = 0$ é excluído da soma. Dessa forma

$$\langle b_j(0)e^{-iHt}b_j^\dagger(0) \rangle = \sum_{kq} \langle \Phi_0 | a_k e^{-iHt} a_q^\dagger | \Phi_0 \rangle c_{jk} c_{jq}^*$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_k |c_{jk}|^2 \langle \Phi_0 | a_k e^{-iHt} a_k^\dagger | \Phi_0 \rangle \\
&= |c_{j0}|^2 \langle \Phi_0 | a_0 a_0^\dagger | \Phi_0 \rangle \\
&\quad + \sum'_k |c_{jk}|^2 \langle \Phi_0 | a_k e^{-iHt} a_k^\dagger | \Phi_0 \rangle \\
&= |c_{j0}|^2 (N+1) + \sum'_k |c_{jk}|^2 e^{-iE_k t},
\end{aligned}$$

e,

$$\begin{aligned}
\langle b_j^\dagger(0) e^{iHt} b_j(0) \rangle &= \sum_{kq} \langle \Phi_0 | a_k^\dagger e^{iHt} a_q | \Phi_0 \rangle c_{jk}^* c_{jq} \\
&= \sum_k |c_{jk}|^2 \langle \Phi_0 | a_k^\dagger e^{iHt} a_k | \Phi_0 \rangle \\
&= |c_{j0}|^2 \langle \Phi_0 | a_0^\dagger a_0 | \Phi_0 \rangle \\
&\quad + \sum'_k |c_{jk}|^2 \langle \Phi_0 | a_k^\dagger e^{iHt} a_k | \Phi_0 \rangle \\
&= |c_{j0}|^2 N.
\end{aligned}$$

Assim, obtemos para $G_j(t)$ a expressão:

$$\begin{aligned}
iG_j(t) &= |c_{j0}|^2 \left(e^{iE_0 t} (N+1) \Theta(t) + e^{-iE_0 t} N \Theta(-t) \right) \\
&\quad + \sum'_k |c_{jk}|^2 e^{-iE_k t} \Theta(t) e^{iE_0 t}.
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Como o fenômeno de condensação de Bose-Einstein (*BEC*) acontece quando $E_0 = 0$, segue que

$$\begin{aligned}
iG_j(t) &= |c_{j0}|^2 \left((N+1) \Theta(t) + N \Theta(-t) \right) \\
&\quad + \sum'_k |c_{jk}|^2 e^{-iE_k t} \Theta(t) e^{iE_0 t},
\end{aligned}$$

e utilizando a relação $\Theta(t) + \Theta(-t) = 1$, encontramos

$$\begin{aligned} iG_j(t) &= |c_{j0}|^2 N + |c_{j0}|^2 \Theta(t) \\ &\quad + \sum'_k |c_{jk}|^2 e^{-iE_k t} \Theta(t) e^{iE_0 t} \\ &= |c_{j0}|^2 N + \sum_k |c_{jk}|^2 e^{-iE_k t} \Theta(t). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A transformada de Fourier $G_j(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_j(t) e^{i\omega t}$, permite escrever

$$\begin{aligned} G_j(\omega) &= -i |c_{j0}|^2 N \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt \\ &\quad - i \sum_k |c_{jk}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} e^{-iE_k t} \Theta(t) dt, \end{aligned}$$

onde se obtém

$$G_j(\omega) = -2\pi i N |c_{j0}|^2 \delta(\omega) + \sum_k \frac{|c_{jk}|^2}{\omega - E_k + i\eta}. \quad (\text{A.11})$$

No caso particular do hamiltoniano de impureza única não interagente,

$$\hat{H} = -\mu_0 b_0^\dagger b_0 + \sum_n \varepsilon_n b_n^\dagger b_n + \sum_n V_n (b_n^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_n), \quad (\text{A.12})$$

os coeficientes c_{jk} definidos em A.8 podem ser calculados em termos dos parâmetros V_n e ε_n do hamiltoniano acima. Expandimos primeiramente os operadores b_0 e b_n em termos de a_k e a_k^\dagger

$$\begin{aligned} b_0 &= \sum_k \gamma_k a_k \\ b_n &= \sum_k \nu_{nk} a_k. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Escrevemos então o hamiltoniano na forma diagonal

$$\hat{H} = \sum_k E_k a_k^\dagger a_k, \quad (\text{A.14})$$

com o propósito de encontrar os coeficientes μ_k , ν_{jk} e o espectro E_k . Assim,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\mu_0 b_0^\dagger b_0 + \sum_n \varepsilon_n b_n^\dagger b_n + \sum_n V_n (b_n^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_n) \\ &= \sum_k E_k a_k^\dagger a_k. \end{aligned}$$

Avaliando o comutador $[b_0, H]$,

$$\begin{aligned} [b_0, H] &= -\mu_0 b_0 + \sum_n V_n b_n \\ &= \sum_k E_k [b_0, a_k^\dagger a_k], \end{aligned}$$

$$\sum_k \left(-\mu_0 \gamma_k + \sum_n V_n \nu_{nk} \right) a_k = \sum_k E_k \gamma_k a_k.$$

onde

$$(E_k + \mu_0) \gamma_k = \sum_n V_n \nu_{nk}. \quad (\text{A.15})$$

De maneira similar o processo pode ser repetido para b_n , encontrando

$$\nu_{nk} = \frac{V_n}{E_k - \varepsilon_n} \gamma_k. \quad (\text{A.16})$$

O espectro E_k é determinado, ao substituir a Eq. (A.16) na Eq. (A.15),

$$E_k + \mu_0 - \sum_n \frac{V_n^2}{E_k - \varepsilon_n} = 0. \quad (\text{A.17})$$

Utilizando a condição de normalização

$$|\gamma_k|^2 + \sum_n |\nu_{nk}|^2 = 1,$$

segue,

$$|\gamma_k|^2 = \frac{1}{1 + \sum_n \frac{V_n^2}{(E_k - \varepsilon_n)^2}}. \quad (\text{A.18})$$

Portanto, a função de Green do sítio zero encontrada é:

$$G_0(\omega) = -2\pi i N |\gamma_0|^2 \delta(\omega) + \sum_k \frac{|\gamma_k|^2}{\omega - E_k + i\eta}. \quad (\text{A.19})$$

A seguir utilizamos o método de equações de movimento para mostrar que o segundo termo da equação acima coincide com o introduzido na Eq. 2.20

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(\omega) &= \sum_k \frac{|\gamma_k|^2}{\omega + i\eta - E_k} \\ &= \frac{1}{\omega + i\eta + \mu_0 - \mathcal{J}_0(\omega)}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

A.1 Equações de movimento

Definamos:

$$iG_0(t) = \langle T[b_0(t)b_0^\dagger(0)] \rangle \quad (\text{A.21})$$

$$iG_n(t) = \langle T[b_n(t)b_n^\dagger(0)] \rangle. \quad (\text{A.22})$$

Diferenciando em relação a t ,

$$i\partial_t G_0(t) = \delta(t) - \langle T[[b_0(t), H]b_0^\dagger(0)] \rangle \quad (\text{A.23})$$

$$i\partial_t G_n(t) = \langle T[[b_n(t), H]b_n^\dagger(0)] \rangle. \quad (\text{A.24})$$

Avaliando os comutadores para o hamiltoniano da Eq. A.12, temos:

$$[b_0, H] = -\mu_0 b_0 + \sum_n V_n b_n \quad (\text{A.25})$$

$$[b_n, H] = \varepsilon_n b_n + V_n b_0. \quad (\text{A.26})$$

Assim,

$$i\partial_t G_0(t) = \delta(t) + i\mu_0 G_0(t) - i \sum_n V_n G_n(t), \quad (\text{A.27})$$

$$i\partial_t G_n(t) = -i\varepsilon_n G_n(t) - iV_n G_0(t). \quad (\text{A.28})$$

Tomando a transformada de Fourier

$$(-\omega - \mu_0)G_0(\omega) = -1 - \sum_n V_n G_n(\omega), \quad (\text{A.29})$$

$$(-\omega + \varepsilon_n)G_n(\omega) = -V_n G_0(\omega). \quad (\text{A.30})$$

Resolvendo as equações acima para $G_0(\omega)$, obtém-se,

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu_0 - \sum_n \frac{V_n^2}{\omega - \varepsilon_n}}. \quad (\text{A.31})$$

Nota-se também que $G_0(\omega)$ pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} G_0(\omega) &= \sum_k \frac{B_k}{\omega - E_k}, \\ &= \frac{1}{f(\omega)}. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

onde,

$$f(\omega) = \omega + \mu_0 - \sum_n \frac{V_n^2}{\omega - \varepsilon_n}. \quad (\text{A.33})$$

Os coeficientes B_k , podem ser determinados segundo,

$$\left. \frac{df}{d(\omega)} \right|_{\omega=E_k} = \frac{1}{B_k}.$$

Assim,

$$B_k = \frac{1}{1 + \sum_n \frac{V_n^2}{(E_k - \varepsilon_n)^2}}. \quad (\text{A.34})$$

Estes coeficientes coincidem exatamente com $|\gamma_k|^2$, obtido na Eq. A.18.

B

BEC no B-SIAM

Neste apêndice é deduzida a Eq. 2.26 para a constante de acoplamento crítica do modelo de impureza única não interagente onde o condensado de Bose-Einstein (*BEC*) ocorre,

$$\alpha_c = -\frac{\mu_0}{2\omega_c}s, \quad s \geq 0. \quad (\text{B1})$$

Começamos escrevendo a função de Green obtida no apêndice anterior

$$\mathcal{G}_0(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu_0 - \mathcal{J}_0(\omega)} \quad (\text{B2})$$

onde $\mathcal{J}_0(\omega)$

$$\mathcal{J}_0(\omega) = \sum_m \frac{V_n^2}{\omega + i\eta - \varepsilon_n}. \quad (\text{B3})$$

Para encontrar a constante crítica, determinamos os pólos de $G_0(\omega)$ através da equação:

$$\omega + \mu_0 = \bar{\Delta}(\omega) = P.V. \int \frac{dx}{\pi} \frac{\Delta_0(x)}{\omega - x}, \quad (\text{B4})$$

onde $\bar{\Delta}(\omega)$ é o valor principal (*P.V.*) da função $\mathcal{J}_0(\omega)$.

Utilizando a expressão para $\Delta_0(\omega)$

$$\Delta_0(x) = 2\pi\alpha\omega_c^{1-s}x^s, \quad 0 < x < \omega_c, \quad (\text{B5})$$

segue que

$$\omega_0 + \mu_0 = 2\alpha\omega_c^{1-s} \int_0^{\omega_c} dx \frac{x^s}{\omega_0 - x}, \quad (\text{B6})$$

onde denotamos $\omega = \omega_0$, o pólo procurado.

Fazendo a mudança de variáveis, $x = x/\omega_c$, $\varepsilon_0 = -\mu_0/\omega_c$ and $y_0 = -\omega_0/\omega_c > 0$, segue que

$$y_0 + \varepsilon_0 = 2\alpha I(s, y_0), \quad (\text{B7})$$

onde

$$I(s, y_0) = \int_0^1 dx \frac{x^s}{x + y_0}. \quad (\text{B8})$$

Para os casos onde s é inteiro ($s = 0, 1, 2, \dots$) a integral acima fornece

$$\begin{aligned} I(0, y_0) &= \ln \left(1 + \frac{1}{y_0} \right), \\ I(1, y_0) &= 1 - y_0 \ln \left(1 + \frac{1}{y_0} \right), \\ &\vdots \\ I(n, y_0) &= (-y_0)^n \ln \left(1 + \frac{1}{y_0} \right) + \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(-y_0)^j}{n-j}. \end{aligned} \quad (\text{B9})$$

Quando s não é inteiro $I(s, y_0)$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned} I(s, y_0) &= \frac{1}{(1+s)(1+y_0)} F \left[1, 1; 2+s; \frac{1}{1+y_0} \right] \\ &= \frac{1}{s(1+y_0)} F \left[1, 1; 1-s; \frac{y_0}{1+y_0} \right] - \frac{\pi y_0^s}{\sin(\pi s)}, \end{aligned} \quad (\text{B10})$$

onde F é a função hipergeométrica generalizada, definida como

$$F[a, b, c, z] = \frac{\Gamma[c]}{\Gamma[b]\Gamma[c-b]} \int_0^1 \frac{t^{b-1}(1-t)^{c-b-1}}{(1-tz)^a} dt,$$

$$\operatorname{Re}(a) > 0, \quad \operatorname{Re}(c - a) > 0,$$

e Γ é a função gama. Perto do ponto crítico pode-se considerar $y_0 = -\omega_0/\omega_c \ll 1$, o qual nos dá

$$F \left[1, 1; 1 - s; \frac{y_0}{1 + y_0} \right] \approx 1 + \frac{1}{1 - s} \left(\frac{y_0}{1 + y_0} \right) + \mathcal{O} \left(\frac{y_0}{1 + y_0} \right)^2$$

e segue que

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 + y_0} F \left[1, 1; 1 - s; \frac{y_0}{1 + y_0} \right] &\approx 1 - y_0 + \frac{y_0}{1 - s} + \mathcal{O}(y_0^2), \\ &= 1 + \frac{s}{1 - s} y_0 + \mathcal{O}(y_0^2). \end{aligned}$$

Assim,

$$I(s, y_0) = \frac{1}{s} + \frac{y_0}{1 - s} - \frac{\pi}{\sin(\pi s)} y_0^s + \mathcal{O}(y_0^2).$$

Portanto,

$$\begin{aligned} y_0 + \varepsilon_0 &= 2\alpha I(s, y_0), \\ &= \frac{2\alpha}{s} \left(1 - \frac{\pi s}{\sin(\pi s)} y_0^s + \frac{s}{1 - s} y_0 + \mathcal{O}(y_0^2) \right). \end{aligned} \tag{B11}$$

Agora podemos analisar os casos seguintes:

1) $0 < s < 1$:

Como y_0^s é maior que y_0 , pois $y_0 \ll 1$, da Eq. B11, segue que

$$y_0 + \varepsilon_0 = \frac{2\alpha}{s} \left(1 - \frac{\pi s}{\sin(\pi s)} y_0^s + \mathcal{O}(y_0) \right). \tag{B12}$$

Assim, existe solução para y_0 se $\varepsilon_0 \leq \frac{2\alpha}{s}$ e esta solução é única. Assim o valor crítico de α para o qual um estado localizado com energia negativa se separa do contínuo é

$$\alpha = \alpha_c = -\frac{\mu_0 s}{2\omega_c} \quad (\text{B13})$$

2) $s > 1$

Aqui y_0 domina em relação a y_0^s , já que $y_0 \ll 1$. Assim, segue que

$$y_0 + \varepsilon_0 = \frac{2\alpha}{s} \left(1 - \frac{s}{s-1} y_0 + \mathcal{O}(y_0^r) \right), \quad r = \min(s, 2) \quad (\text{B14})$$

O valor crítico de α neste caso é o mesmo que o encontrado acima.

3) $s = 0$

Neste caso, segue da Eq. B9,

$$y_0 + \varepsilon_0 = 2\alpha \ln \left(1 + \frac{1}{y_0} \right) \approx 2\alpha \ln \left(\frac{1}{y_0} \right) \quad (\text{B15})$$

Para este caso encontramos $\alpha_c = 0$.

4) $s = 1$

Da Eq. B9, temos

$$y_0 + \varepsilon_0 = 2\alpha \left[1 - y_0 \ln \left(1 + \frac{1}{y_0} \right) \right] \approx 2\alpha \left[1 - y_0 \ln \left(\frac{1}{y_0} \right) \right]. \quad (\text{B16})$$

O valor crítico é

$$\alpha_c = -\frac{\mu_0}{2\omega_c}. \quad (\text{B17})$$

Nota-se que todos os casos analisados podem ser escrito em só uma equação para a constante crítica α_c

$$\alpha_c = -\frac{\mu_0}{2\omega_c} s, \quad s \geq 0. \quad (\text{B18})$$

C

Transformação canônica

Este apêndice é dedicado ao cálculo do valor esperado ($\langle b_0 \rangle$) considerado na Eq. 2.32

$$\langle b_0 \rangle = -\lambda \sum_k \gamma_k^2 \Gamma_k, \quad \Gamma_k = 1 - \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n (E_k - \varepsilon_n)}, \quad (\text{C1})$$

onde,

$$\lambda = \frac{\varphi}{\mu_0 + \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n}}. \quad (\text{C2})$$

Para esse propósito considera-se o hamiltoniano de impureza única não interagente na presença do termo $\varphi(b_0^\dagger + b_0)$,

$$\hat{H} = -\mu_0 b_0^\dagger b_0 - \varphi(b_0^\dagger + b_0) + \sum_j \varepsilon_j b_j^\dagger b_j + \sum_j V_j (b_j^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_j). \quad (\text{C3})$$

Aplicando a transformação canônica,

$$\begin{aligned} H' &= e^S H e^{-S} \\ &= S + [S, H] + \frac{1}{2!} [S, [S, H]] + \dots, \end{aligned} \quad (\text{C4})$$

onde

$$S = \lambda(b_0^\dagger - b_0) + \sum_m \eta_m (b_m^\dagger - b_m), \quad (\text{C5})$$

e os parâmetros λ e η_m serão determinados. Calculando os comutadores, segue que

$$[S, H] = \lambda\mu_0(b_0^\dagger + b_0) + 2\lambda\varphi - \lambda \sum_n V_n(b_n^\dagger + b_n) - \sum_n \eta_n \varepsilon_n (b_n^\dagger + b_n) - (b_0^\dagger + b_0) \sum_n \eta_n V_n. \quad (C6)$$

$$\frac{1}{2!}[S, [S, H]] = -\lambda^2\mu_0 + 2\lambda \sum_n \eta_n V_n + \sum_n \eta_n^2 \varepsilon_n. \quad (C7)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} H' &= -\mu_0 b_0^\dagger b_0 + \sum_n \varepsilon_n b_n^\dagger b_n + \sum_n V_n (b_n^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_n) \\ &\quad - \left(\varphi - \lambda\mu_0 + \sum_n \eta_n V_n \right) (b_0^\dagger + b_0) \\ &\quad - \sum_j \left(\lambda V_n + \eta_n \varepsilon_n \right) (b_n^\dagger + b_n) \\ &\quad + 2\lambda\varphi - \lambda^2\mu_0 + 2\lambda \sum_n \eta_n V_n + \sum_n \eta_n^2 \varepsilon_n. \end{aligned} \quad (C8)$$

Para eliminar os termos lineares em $b_0^\dagger + b_0$ e $b_n^\dagger + b_n$, escolhe-se

$$\begin{aligned} \varphi - \lambda\mu_0 + \sum_n \eta_n V_n &= 0 \\ \lambda V_n + \eta_n \varepsilon_n &= 0, \end{aligned} \quad (C9)$$

encontrando

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\varphi}{\mu_0 + \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n}}, \\ \eta_j &= -\lambda \frac{V_n}{\varepsilon_n}. \end{aligned} \quad (C10)$$

Assim o hamiltoniano H' fica:

$$H' = -\mu_0 b_0^\dagger b_0 + \sum_n \varepsilon_n b_n^\dagger b_n + \sum_n V_n (b_n^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_n) + \frac{\varphi^2}{\mu_0 + \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n}}. \quad (\text{C11})$$

Como foi mostrado no apêndice anterior o hamiltoniano acima, pode ser escrito na forma diagonal

$$H' = \sum_k E_k a_k^\dagger a_k + \frac{\varphi^2}{\mu_0 + \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n}}. \quad (\text{C12})$$

Portanto, segue que

$$\begin{aligned} H' |0\rangle &= \frac{\varphi^2}{\mu_0 + \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n}} |0\rangle \\ &= E'_0 |0\rangle, \\ &= e^S H e^{-S} |0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{C13})$$

onde $|0\rangle = |n_{a_1} = 0, n_{a_2} = 0, \dots\rangle$. Utilizando a expressão acima encontramos uma equação de autovalores para o hamiltoniano de interesse H ,

$$H |\Phi_0\rangle = E'_0 |\Phi_0\rangle. \quad (\text{C14})$$

onde,

$$E'_0 = \frac{\varphi^2}{\mu_0 + \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n}}, \quad |\Phi_0\rangle = e^{-S} |0\rangle. \quad (\text{C15})$$

Utilizando,

$$b_0 = \sum_k \gamma_k a_k, \quad b_n = \sum_k \nu_{nk} a_k, \quad (\text{C16})$$

e,

$$\nu_{nk} = \frac{V_n}{E_k - \varepsilon_n} \gamma_k, \quad (\text{C17})$$

reescrevemos S em termos dos operadores a_k e a_k^\dagger

$$\begin{aligned} S &= \lambda \sum_k \gamma_k (a_k^\dagger - a_k) - \lambda \sum_{nk} \frac{V_j}{\varepsilon_n} \nu_{nk} (a_k^\dagger - a_k) \\ &= \lambda \sum_k \left(1 - \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n (E_k - \varepsilon_n)} \right) \gamma_k (a_k^\dagger - a_k). \end{aligned} \quad (\text{C18})$$

Assim determinamos para o estado fundamental $|\Phi_0\rangle$ a expressão:

$$|\Phi_0\rangle = e^{-S} |0\rangle, \quad (\text{C19})$$

$$= e^{-\lambda \sum_k \gamma_k \Gamma_k (a_k^\dagger - a_k)} |0\rangle, \quad (\text{C20})$$

onde

$$\Gamma_k = 1 - \sum_j \frac{V_j^2}{\varepsilon_j (E_k - \varepsilon_j)} \quad (\text{C21})$$

Deve-se notar que $|\Phi_0\rangle$ é um estado coerente de a_k , segue que

$$a_k |\Phi_0\rangle = -\lambda \gamma_k \Gamma_k |\Phi_0\rangle, \quad (\text{C22})$$

e, portanto,

$$\langle a_k \rangle = -\lambda \gamma_k \Gamma_k. \quad (\text{C23})$$

Usando-se $b_0 = \sum_k \gamma_k a_k$, chega-se à expressão desejada

$$\langle b_0 \rangle = -\lambda \sum_k \gamma_k^2 \Gamma_k, \quad \Gamma_k = 1 - \sum_n \frac{V_n^2}{\varepsilon_n (E_k - \varepsilon_n)}, \quad (\text{C24})$$

que foi utilizada na Eq. 2.32.

Por outro lado, a ocupação da impureza $n_0 = \langle b_0^\dagger b_0 \rangle$ é

$$\langle b_0^\dagger b_0 \rangle = \sum_{kp} \gamma_k^* \gamma_p \langle a_k^\dagger a_p \rangle. \quad (\text{C25})$$

Utilizando a Eq. C22, encontramos que

$$\begin{aligned} \langle b_0^\dagger b_0 \rangle &= \sum_{kp} \gamma_k^* \gamma_p (-\lambda^* \gamma_k^* \Gamma_k^*) (-\lambda \gamma_p \Gamma_p) \\ &= \langle b_0 \rangle \langle b_0 \rangle^* \\ &= |\langle b_0 \rangle|^2. \end{aligned} \quad (\text{C26})$$

Referências Bibliográficas

- [1] ANDERSON, M. H., ENSHER, J. R., MATTHEWS, M. R., WIEMAN, C. E. & CORNELL, E. A. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science* **269**, 198 (1995).
- [2] DAVIS, K. B., MEWES, M. O., ANDREWS, M. R., VAN DRUTEN, N. J., DURFEE, D. S., KURN, D. M. & KETTERLE, W. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [3] BRADLEY, C. C., SACKETT, C. A., TOLLETT, J. J. & HULET, R. G. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
- [4] GRIMM, R., WEIDEMULLER, M. & OVCHINNIKOV, Y. B. Optical dipole traps for neutral atoms. *Adv. At., Mol., Opt. Phys* **42**, 95 (2000).
- [5] ANDREWS, M. R., TOWNSEND, C. G., MIESNER, H.-J., DURFEE, D. S., KURN, D. M. & KETTERLE, W. Observation of Interference Between Two Bose Condensates. *Science* **275**, 637 (1997).
- [6] BLOCH, I., HANSCH, T. W. & ESSLINGER, T. Measurement of the spatial coherence of a trapped Bose gas at the phase transition. *Nature* **403**, 166 (2000).
- [7] MATTHEWS, M. R., ANDERSON, B. P., HALJAN, P. C., HALL, D. S., WIEMAN, C. E. & CORNELL, E. A. Vortices in a Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2498 (1999).

-
- [8] MADISON, K. W., CHEVY, F., WOHLLEBEN, W. & DALIBARD, J. Vortex Formation in a Stirred Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 806 (2000).
- [9] ABO-SHAER, J. R., RAMAN, C., VOGELS, J. M. & KETTERLE, W. Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates. *Science* **292**, 476 (2001).
- [10] GREINER, M. & REGAL, CINDY A. ANDJIN, D. S. Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas. *Nature* **426**, 537 (2003).
- [11] JOCHIM, S., BARTENSTEIN, M., ALTMAYER, A., HENDL, G., RIEDL, S., CHIN, C., HECKER DENSCHLAG, J. & GRIMM, R. Bose-Einstein Condensation of Molecules. *Science* **302**, 2101 (2003).
- [12] ZWIERLEIN, M. W., STAN, C. A., SCHUNCK, C. H., RAUPACH, S. M. F., GUPTA, S., HADZIBABIC, Z. & KETTERLE, W. Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 250401 (2003).
- [13] GREINER, M., MANDEL, O., ESSLINGER, T., HANSCH, T. W. & BLOCH, I. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* **415**, 39 (2002).
- [14] FISHER, M. P. A., WEICHMAN, P. B., GRINSTEIN, G. & FISHER, D. S. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [15] SHESHADRI, K., KRISHNAMURTHY, H., PANDIT, R. & RAMAKRISHNAN, T. Superfluid and Insulating Phases in an Interacting-Boson Model: Mean-Field Theory and the RPA. *Europhys. Lett* **22**, 257 (1993).
- [16] JAKSCH, D., BRUDER, C., CIRAC, J. I., GARDINER, C. W. & ZOLLER, P. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).
- [17] RECATI, A., FEDICHEV, P. O., ZWIRGER, W., VON DELFT, J. & ZOLLER, P. Atomic Quantum Dots Coupled to a Reservoir of a Superfluid Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 040404 (2005).

- [18] JAKSCH, D. & ZOLLER, P. The cold atom Hubbard toolbox. *Annals of Physics* **315**, 52 (2005).
- [19] LEE, H.-J. & BULLA, R. Quantum phase transitions in the bosonic single-impurity Anderson model. *Eur. Phys. J. B* **56**, 199 (2007).
- [20] LEE, H.-J., BYCZUK, K. & BULLA, R. Numerical renormalization group for the bosonic single-impurity Anderson model: Dynamics. *Phys. Rev. B* **82**, 054516 (2010).
- [21] LEE, T. D., HUANG, K. & YANG, C. N. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Bose System of Hard Spheres and Its Low-Temperature Properties. *Phys. Rev.* **106**, 1135 (1957).
- [22] HUBBARD, J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **281**, 401 (1964).
- [23] VAN OOSTEN, D., VAN DER STRATEN, P. & STOOF, H. T. C. Quantum phases in an optical lattice. *Phys. Rev. A* **63**, 053601 (2001).
- [24] FETTER, A. L. & WALECKA, J. D. *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, 1971).
- [25] GOLDENFELD, N. *Lectures On Phase Transitions And The Renormalization Group* (Westview Press, 1992).
- [26] CAPOGROSSO-SANSONE, B., PROKOF'EV, N. V. & SVISTUNOV, B. V. Phase diagram and thermodynamics of the three-dimensional Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. B* **75**, 134302 (2007).
- [27] ANDERS, P., GULL, E., POLLET, L., TROYER, M. & WERNER, P. Dynamical Mean Field Solution of the Bose-Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 096402 (2010).
- [28] SEMERJIAN, G., TARZIA, M. & ZAMPONI, F. Exact solution of the Bose-Hubbard model on the Bethe lattice. *Phys. Rev. B* **80**, 014524 (2009).

- [29] BYCZUK, K. & VOLLHARDT, D. Correlated bosons on a lattice: Dynamical mean-field theory for Bose-Einstein condensed and normal phases. *Phys. Rev. B* **77**, 235106 (2008).
- [30] HU, W.-J. & TONG, N.-H. Dynamical mean-field theory for the Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. B* **80**, 245110 (2009).
- [31] METZNER, W. & VOLLHARDT, D. Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).
- [32] GEORGES, A., KOTLIAR, G., KRAUTH, W. & ROZENBERG, M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [33] BISSBORT, U. & HOFSTETTER, W. Stochastic Mean-Field Theory for the Disordered Bose-Hubbard Model. *Europhys. Lett* **86**, 50007 (2009).
- [34] BISSBORT, U., THOMALE, R. & HOFSTETTER, W. Stochastic mean-field theory: Method and application to the disordered Bose-Hubbard model at finite temperature and speckle disorder. *Phys. Rev. A* **81**, 063643 (2010).
- [35] NIELSEN, M. A. & CHUANG, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [36] CALDEIRA, A. O. & LEGGETT, A. J. Path integral approach to quantum Brownian motion. *Physica A: Statistical and Theoretical Physics* **121**, 587 (1983).
- [37] LEGGETT, A. J., CHAKRAVARTY, S., DORSEY, A. T., FISHER, M. P. A., GARG, A. & ZWERGER, W. Dynamics of the dissipative two-state system. *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
- [38] ZIPKES, C., PALZER, S., SIAS, C. & KOHL, M. A trapped single ion inside a Bose-Einstein condensate. *Nature* **464**, 388 (2010).

- [39] WILSON, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [40] BULLA, R., LEE, H.-J., TONG, N.-H. & VOJTA, M. Numerical renormalization group for quantum impurities in a bosonic bath. *Phys. Rev. B* **71**, 045122 (2005).
- [41] BULLA, R., COSTI, T. A. & PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 395 (2008).
- [42] YUKALOV, V. I. Bose-Einstein condensation and gauge symmetry breaking. *Laser Physics Letters* **4**, 632 (2007).
- [43] WHITE, M., PASIENSKI, M., MCKAY, D., ZHOU, S. Q., CEPERLEY, D. & DEMARCO, B. Strongly Interacting Bosons in a Disordered Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 055301 (2009).
- [44] PASIENSKI, M., MCKAY, D., WHITE, M. & DEMARCO, B. disordered insulator in an optical lattice. *Nature* **1038**, 1745 (2010).
- [45] KRAUTH, W., TRIVEDI, N. & CEPERLEY, D. Superfluid-insulator transition in disordered boson systems. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2307 (1991).
- [46] KISKER, J. & RIEGER, H. Bose-glass and Mott-insulator phase in the disordered boson Hubbard model. *Phys. Rev. B* **55**, R11981 (1997).
- [47] SENGUPTA, P., RAGHAVAN, A. & HAAS, S. Disorder-enhanced phase coherence in trapped bosons on optical lattices. *New J. Phys.* **9**, 103 (2007).
- [48] PROKOF'EV, N. & SVISTUNOV, B. Superfluid-Insulator Transition in Commensurate Disordered Bosonic Systems: Large-Scale Worm Algorithm Simulations. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 015703 (2004).
- [49] DANG, L., BONINSEGNI, M. & POLLET, L. Disorder-induced superfluidity. *Phys. Rev. B* **79**, 214529 (2009).

- [50] POLLET, L., PROKOF'EV, N. V., SVISTUNOV, B. V. & TROYER, M. Absence of a Direct Superfluid to Mott Insulator Transition in Disordered Bose Systems. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 140402 (2009).
- [51] GURARIE, V., POLLET, L., PROKOF'EV, N. V., SVISTUNOV, B. V. & TROYER, M. Phase diagram of the disordered Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. B* **80**, 214519 (2009).
- [52] ROTH, R. & BURNETT, K. Phase diagram of bosonic atoms in two-color superlattices. *Phys. Rev. A* **68**, 023604 (2003).
- [53] LÜHMANN, D.-S., BONGS, K., SENGSTOCK, K. & PFANNKUCHE, D. Localization and delocalization of ultracold bosonic atoms in finite optical lattices. *Phys. Rev. A* **77**, 023620 (2008).
- [54] LOUIS, P. & TSUBOTA, M. Bosons in Disordered Optical Potentials. *Journal of Low Temperature Physics* **148**, 351 (2007) 10.1007/s10909-007-9392-z.
- [55] SINGH, K. G. & ROKHSAR, D. S. Real-space renormalization study of disordered interacting bosons. *Phys. Rev. B* **46**, 3002 (1992).
- [56] RAPSCH, S., SCHOLLWÖCK, U. & ZWERGER, W. Density matrix renormalization group for disordered bosons in one dimension. *Europhys. Lett* **46**, 559 (1999).
- [57] ROKHSAR, D. S. & KOTLIAR, B. G. Gutzwiller projection for bosons. *Phys. Rev. B* **44**, 10328 (1991).
- [58] KRAUTH, W., CAFFAREL, M. & BOUCHAUD, J.-P. Gutzwiller wave function for a model of strongly interacting bosons. *Phys. Rev. B* **45**, 3137 (1992).
- [59] BUONSANTE, P., PENNA, V., VEZZANI, A. & BLAKIE, P. B. Mean-field phase diagram of cold lattice bosons in disordered potentials. *Phys. Rev. A* **76**, 011602 (2007).

- [60] BUONSANTE, P., MASSEL, F., PENNA, V. & VEZZANI, A. Mean-field description of ultracold bosons on disordered two-dimensional optical lattices. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40**, F265 (2007).
- [61] DAMSKI, B., ZAKRZEWSKI, J., SANTOS, L., ZOLLER, P. & LEWENSTEIN, M. Atomic Bose and Anderson Glasses in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 080403 (2003).
- [62] SHESHADRI, K., KRISHNAMURTHY, H. R., PANDIT, R. & RAMAKRISHNAN, T. V. Percolation-Enhanced Localization in the Disordered Bosonic Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4075 (1995).
- [63] KRUTITSKY, K. V., PELSTER, A. & GRAHAM, R. Mean-field phase diagram of disordered bosons in a lattice at non-zero temperature. *New J. Phys.* **8**, 187 (2006).
- [64] YUKALOV, V. I. & GRAHAM, R. Bose-Einstein-condensed systems in random potentials. *Phys. Rev. A* **75**, 023619 (2007).
- [65] ABOU-CHACRA, R., THOULESS, D. J. & ANDERSON, P. W. A selfconsistent theory of localization. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **6**, 1734 (1973).
- [66] HO, T.-L. Spinor Bose Condensates in Optical Traps. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 742 (1998).
- [67] OHMI, T. & MACHIDA, K. Bose-Einstein Condensation with Internal Degrees of Freedom in Alkali Atom Gases. *Journal of the Physical Society of Japan* **67**, 1822 (1998).
- [68] MUKERJEE, S., XU, C. & MOORE, J. E. Topological Defects and the Superfluid Transition of the $s = 1$ Spinor Condensate in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 120406 (2006).
- [69] TSUCHIYA, S., KURIHARA, S. & KIMURA, T. Superfluid–Mott insulator transition of spin-1 bosons in an optical lattice. *Phys. Rev. A* **70**, 043628 (2004).

- [70] KIMURA, T., TSUCHIYA, S. & KURIHARA, S. Possibility of a First-Order Superfluid–Mott-Insulator Transition of Spinor Bosons in an Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 110403 (2005).
- [71] PAI, R. V., SHESHADRI, K. & PANDIT, R. Phases and transitions in the spin-1 Bose-Hubbard model: Systematics of a mean-field theory. *Phys. Rev. B* **77**, 014503 (2008).
- [72] LEWENSTEIN, M., SANPERA, A., AHUFINGER, V., DAMSKI, B., DE, A. S. & SEN, U. Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond. *Adv. Phys.* **56**, 243 (2007).
- [73] HORAK, P., COURTOIS, J.-Y. & GRYNBERG, G. Atom cooling and trapping by disorder. *Phys. Rev. A* **58**, 3953 (1998).
- [74] BOIRON, D., MENNERAT-ROBILLIARD, C., FOURNIER, J.-M., GUIDONI, L., SALOMON, C. & GRYNBERG, G. Trapping and cooling cesium atoms in a speckle field. *Eur. Phys. J. D* **7**, 373 (1999).
- [75] GAVISH, U. & CASTIN, Y. Matter-Wave Localization in Disordered Cold Atom Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 020401 (2005).
- [76] MASSIGNAN, P. & CASTIN, Y. Three-dimensional strong localization of matter waves by scattering from atoms in a lattice with a confinement-induced resonance. *Phys. Rev. A* **74**, 013616 (2006).
- [77] DIENER, R. B., GEORGAKIS, G. A., ZHONG, J., RAIZEN, M. & NIU, Q. Transition between extended and localized states in a one-dimensional incommensurate optical lattice. *Phys. Rev. A* **64**, 033416 (2001).
- [78] GIMPERLEIN, H., WESSEL, S., SCHMIEDMAYER, J. & SANTOS, L. Ultracold Atoms in Optical Lattices with Random On-Site Interactions. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 170401 (2005).
- [79] CHIN, C., GRIMM, R., JULIENNE, P. & TIESINGA, E. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).

- [80] ŁĄCKI, M., PAGANELLI, S., AHUFINGER, V., SANPERA, A. & ZAKRZEWSKI, J. Disordered spinor Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. A* **83**, 013605 (2011).
- [81] AGUIAR, M. C. O., MIRANDA, E. & DOBROSAVLJEVIĆ, V. Localization effects and inelastic scattering in disordered heavy electrons. *Phys. Rev. B* **68**, 125104 (2003).