

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN

Sobre a dinâmica das colisões atômicas frias controladas em redes ópticas

por

Reginaldo de Jesus Costa Farias

com orientação desenvolvida pelo

Prof. Dr. Marcos César de Oliveira

*Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas
como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.*

Este exemplar corresponde à redação final da Tese de Doutorado defendida pelo aluno Reginaldo de Jesus Costa Farias e aprovada pela comissão julgadora em 28 de junho de 2011.



Prof. Dr. Marcos César de Oliveira.

Campinas – SP

Inverno – 2011

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

F225s	<p>Farias, Reginaldo de Jesus Costa, 1978- Sobre a dinâmica das colisões atômicas frias controladas em redes ópticas / Reginaldo de Jesus Costa Farias. -- Campinas, SP : [s.n.], 2011.</p> <p>Orientador: Marcos César de Oliveira. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.</p> <p>1. Bose-Hubbard, Modelo de. 2. Emaranhamento de estados. 3. Condensados de Bose-Einstein em redes ópticas. 4. Colisões controladas. 5. Transição de fase quântica. I. Oliveira, Marcos César de, 1969- II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física “Gleb Wataghin”. III. Título.</p>
-------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: On the dynamic of the cold atomic controlled collisions in optical lattices

Palavras-chave em inglês:

Bose-Hubbard model
Entanglement of states
Bose-Einstein condensates in optical lattices
Controlled collisions
Quantum phase transition

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Titulação: Doutor em Ciências

Banca Examinadora:

Marcos César de Oliveira [Orientador]
Kyoko Furuya
Silvio Antonio Sachetto Vitiello
Eduardo Inácio Duzzioni
Gilberto Aparecido Prativiera

Data da Defesa: 28-06-2011

Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
REGINALDO DE JESUS COSTA FARIAS – RA 38455, APRESENTADA E APROVADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN” DA UNIVERSIDADE ESTADUAL
DE CAMPINAS, EM 28/06/2011.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Marcos César de Oliveira – DFMC/IFGW/UNICAMP

(Orientador do Candidato)

Profa. Dra. Kyoko Furuya – DFMC/IFGW/UNICAMP

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

Prof. Dr. Gilberto Aparecido Prativiera – FEA-RP/USP

Prof. Dr. Eduardo Inácio Duzzioni – INFIS/UFU

Algumas palavras

Há um pequeno e privilegiado grupo de pessoas que realmente sabe discernir entre as escolhas durante a vida e, naturalmete, sempre sabe do seu *querer*. Há um segundo que prefere não arriscar e na maioria das vezes opta pela segurança do *não querer* para encontrar seus caminhos. Dessa observação, que sempre me recorda as obras do notável poeta checo Rainer Maria Rilke, concluí que pertencço ao segundo e aparentemente maior grupo. E, desta vez, não me lembrei de apenas um, porém dois trechos do clássico “Cartas a um jovem poeta”. O primeiro deles, que certamente é o mais conhecido do autor, encontra-se na primeira carta [1]. Ei-lo:

“... Pergunta se os seus versos são bons... Pois bem – usando da licença que me deu de aconselhá-lo – peço-lhe que deixe tudo isso. O senhor está olhando para fora, e é justamente o que menos deveria fazer neste momento. Ninguém o pode aconselhar ou ajudar, – ninguém. Não há senão um caminho. Procure entrar em si mesmo. Investigue o motivo que o manda escrever; examine se estende suas raízes pelos recantos mais profundos de sua alma; confesse a si mesmo: morreria, se lhe fosse vedado escrever? Isto acima de tudo: pergunte a si mesmo na hora mais tranqüila de sua noite: ‘Sou mesmo forçado a escrever?’ Escave dentro de si uma resposta profunda. Se for afirmativa, se puder contestar àquela pergunta severa por um forte e simples ‘sou’, então construa a sua vida de acordo com essa necessidade. Sua vida, até em sua hora mais indiferente e anódina, deverá tornar-se o sinal e o testemunho de tal pressão...”

Já o segundo, que muito se fez presente nos últimos anos, pertence à terceira carta. Transcrevo-lhe:

“... Aí o tempo não serve de medida: um ano nada vale. Dez anos não são nada. Ser artista

não significa calcular e contar, mas sim amadurecer como a árvore que apressa a sua seiva e enfrenta tranquila as tempestades da primavera, sem medo de que depois dela não venha nenhum verão. O verão há de vir. Mas virá só para os pacientes, que aguardam num grande silêncio intrépido, como se diante deles estivesse a eternidade. Aprendo-o diariamente, no meio de dores a que sou agradecido: a paciência é tudo...”

Invadido pelo peculiar sentimento humanista do momento que dedico igualmente esta tese a dois grupos. O primeiro deles é representado pelas pessoas que têm a oportunidade e que realmente fazem de suas profissões o seu maior instrumento de dedicação. Todos os meus professores e professoras que me incentivaram e fizeram parte da minha formação justificam e merecem esta dedicatória. Gostaria de citá-los nominalmente, mas reservo ao meu coração a nobreza e a distinção de guardar a cada um deles.

O segundo grupo, representado pelos meus pais, é igualmente merecedor. A eles devo toda a minha educação e o esforço pela minha instrução. Aos distintos de alma e espírito Maria Piedade da Costa e Antonio Negrão Farias dedico mais esta conquista como parte do que sou sabedor de não compensar todo o processo. No entanto, pleno conhecedor de que isto é o todo que posso humildemente oferecer-lhes: a minha gratidão.

Palavras e sentimentos...

Considero que os créditos de uma conquista são tão importantes quanto esta. Portanto, entendo que apesar do risco de injustamente esquecer alguém, ainda assim devemos citar pessoas e aproveitar para falarmos de fatos, experiências e sentimentos.

O mentor deste trabalho foi o inspirador professor Dr. Marcos César de Oliveira. Com o vigor da juventude e a maturidade peculiar aos sábios e experientes conselheiros ele soube conduzir esta tese e me manter calmo e sereno durante as muitas dificuldades que enfrentei. O professor Marcos encontrou em mim um candidato ao doutoramento com muitas dúvidas sobre o que fazer e por onde seguir e me transformou num estudante com uma nova visão da Física e da vida.

Semelhantemente agradeço à notável professora Dra. Kioko Furuya. Sempre muito paciente e com uma diferenciada persistência ela sempre se mostrou solícita e se tornou autora de muitos comentários profícuos durante o meu doutoramento. Carinhosamente registro meus agradecimentos a essa distinta profissional.

Aos renomados professores Dr. E. Miranda, Dr. P. H. Sakanaka, Dr. F. C. da Cruz, Dr. M. A. M. de Aguiar e Dr. E. Zacarias também sinceramente agradeço pelas orientações eficazes e atenção exemplar em diversos momentos da minha passagem pelo IFGW.

Aos meus familiares agradeço do fundo dos mais nobres sentimentos humanos. Desde os momentos afetivos, sempre com as mais confortantes palavras, até os mais racionais, com o indispensável apoio financeiro, eu sempre contei com os meus avós João Gomes e Maria Costa; meus pais Maria Piedade da Costa e Antonio Negrão Farias; os meus sábios e incentivadores irmãos Rildo, Rideci, Rosinaldo, Rosângela e Reinaldo; e com os inspiradores rebentos Farias: Ranieri,

Gabriel e Raíssa. Registro o companheirismo de Malu Nagai, que me confortou, incentivou e mostrou muito do que há de belo na vida. Também registro a amizade das amigas Marina Otani, Alice Yamanaka, Geni Morita e Camila Nunes.

Tão importante quão prazeroso foi o convívio com os muitos amigos na Unicamp: A. F. Schwartz, E. A. Chagas, G. G. Rigolin, L. F. Haruna, R. Missori, T. R. de Oliveira, F. Nicácio, M. Cornélio, F. Steinhoff, J. P. da Silva e O. P. de Sá Neto, L. F. Semião, P. P. Muñoz, V. N. Duarte, A. A. Soares, K. Marx, R. Fernandes, P. A. Z. Sire, J. Garcia, E. M. dos Santos, C. Y. Seko, M. B. Pio, R. A. Batista, F. Arretche, J. W. de Menezes, V. A. Meza e D. A. B. Serra.

Os préstimos providenciais dos ‘amigos e irmãos’ J. C. Guedes, J. C. G. Tedesco, R. M. de Almeida, A. M. de Carvalho, A. E. Bernardini, José (Pepito), W. Mello Jr e S. A. de Carvalho foram-me indispensáveis. Dignamente registro as confortantes palavras dos estimados amigos R. S. Wiederkehr, F. M. Rezina, F. Massa, E. de Patto Lima, A. P. Scaravelli, A. Alvim, K. Castelo Branco e G. W. Cousseau. Igualmente reconheço o empenho dos profissionais da Secretaria de Pós-Graduação e agradeço ao carinho das secretárias de graduação: Júlia, Clotilde e Rose. Unidos a estes venho encontrando uma profícua fonte de sabedoria junto aos professores Dr. A. A. M. Laganá, Dr. M. A. Guaranha e R. Nicolosi além dos muitos profissionais da FATEC/Santo André.

Embora o início desta jornada acontecera longe do meu querido Pará, na minha amada Amazônia, da mesma forma ele aconteceu no coração do meu maravilhoso Brasil, na minha adorada São Paulo. Agradeço a indicação ao doutoramento pelos professores da Universidade de São Paulo Dr. M. S. D. Cattani e Dra. M. C. B. Salvadori e a receptividade do professor Dr. A. O. Caldeira quando vim para a Unicamp. Registro o incentivo durante a minha graduação na UFPA dos professores Dr. M. C. de Lima, Dr. S. V. L. Pinheiro, Dra. S. Perez, Dr. L. Brito, Dr. D. Alves, Dr. F. Medeiros, Dr. V. S. Alves, Dr. J. M. F. Bassalo e Dr. P. T. S. Alencar. Estes profissionais enriqueceram minhas opiniões e pensamentos.

À Coordenação de Pessoal de Nível Superior agradeço ao financiamento dos dois primeiros meses de trabalho e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico pelos quarenta e seis meses restantes desta tese sob o processo 142215/2004-0.

Abstract

Starting from a mathematical derivation of the Bose–Hubbard Model (BHM) we analyze the developing of bipartite and multipartite entanglement through the Mott insulator–superfluid quantum phase transition, among the modes of an optical lattice to the simplest situations of two, three and four atoms (N) deposited in such optical lattice with equal number of sites (M), where a filling factor $\nu = N/M = 1$ per lattice site is considered. We present an investigation about the controlled dynamic of a Bose-Einstein condensate in a double well driven by an external time dependent potential. Beyond we present some preliminar notes on codifications and quantum operations in cold controlled collisions among atoms in multiples wells.

Resumo

Partindo de uma derivação matemática do modelo de Bose-Hubbard, desenvolvemos os cálculos para o emaranhamento bi e multipartido, através da transição Isolante de Mott–superfluida, entre os modos de uma rede óptica para as situações mais simples de dois, três e quatro átomos (N) depositados nestas com igual número de sítios M , ocasionando um fator de preenchimento $\nu = N/M$ unitário. Apresentamos uma investigação sobre o controle da dinâmica de um condensado de Bose-Einstein aprisionado em um poço duplo através da ação de um potencial externo dependente do tempo. Apresentamos também uma investigação preliminar de codificação e operações quânticas embasadas em colisões controladas entre átomos em múltiplos poços.

Conteúdo

Dedicatória	v
Agradecimentos	vii
Abstract	viii
Resumo	x
Apresentação	xv
Introdução	1
1 Fundamentações	3
1.1 O resfriamento atômico	3
1.2 A utilização dos condensados de Bose-Einstein	6
1.3 As potencialidades das redes ópticas	12
1.4 As transições de fase	13
1.5 Um recurso para computação quântica	15
2 A derivação dos modelos	17
2.1 O operador hamiltoniano	19
2.2 O modelo de gráficos completamente conectados	24
2.3 O modelo estendido de Bose-Hubbard	25
2.4 O modelo de Bose-Hubbard	27

3	A evolução do emaranhamento na transição de fase	29
3.1	A entropia linear	30
3.2	A negatividade	31
3.3	Uma abordagem perturbativa	32
3.4	Alguns resultados	33
3.5	Uma relação de ρ para o modelo GCC	38
3.6	Um estudo da transição entre as fases isolante de Mott e superfluida	39
4	Um estudo da dinâmica de populações	45
4.1	Aspectos do potencial de poço duplo	45
4.2	Uma análise numérica para a dinâmica das populações.	49
4.3	Análise através dos operadores de momentum angular.	52
5	A viabilidade de uma codificação para computação quântica.	57
5.1	O modelo.	57
5.2	A obtenção de um operador hamiltoniano efetivo	59
5.3	O desenvolvimento de uma codificação de <i>bits</i> quânticos.	66
5.4	Algumas portas quânticas.	67
5.4.1	A porta de fase	67
5.4.2	A porta <i>controlled not</i>	68
	Conclusões	71
	Apêndice A - Notas sobre a derivação dos modelos	73
	Apêndice B - Representações da equação da entropia linear reduzida a um sítio.	75
	Apêndice C - A equação de Gross-Pitaevskii	79
	Referências	81

Apresentação

Para o conforto de ambos os leitores, iniciantes e iniciados, procurei escrever esta tese contemplando duas partes. A primeira delas, que resolvi denominar simplesmente de Fundamentações, é preambular e aborda tanto pontos históricos como também outros conceitos que serão utilizados ao longo de todo o texto. Ela está toda compreendida no primeiro capítulo e aborda quase que totalmente de maneira qualitativa conceitos desde o resfriamento atômico até as transições de fase, formando assim as vertentes que sustentarão os demais capítulos.

A partir do segundo capítulo apresentaremos a derivação dos modelos físicos que exploraremos. Mostraremos os elementos gerais da obtenção partindo de suas fundamentações e, quando necessário, algumas peculiaridades destas. Em sua grande parte, a análise destes iniciada a partir do Capítulo 3 forma o corpo da originalidade desta tese.

No terceiro capítulo analisaremos o emaranhamento através dos cálculos da entropia linear reduzida a um sítio e da negatividade para os modelos derivados no Capítulo 2. Neste falaremos da distribuição do emaranhamento multipartido e bipartido em tais sistemas, o que originou a primeira publicação desta tese. Faremos uma relação da evolução das duas medidas citadas para o emaranhamento em função de um parâmetro perturbativo e mostraremos uma relação delas com a transição de fase quântica presente nos modelos de Bose-Hubbard (BHM) e de gráficos completamente conectados (GCC).

Já no quarto capítulo realizaremos a abordagem introdutória para a consolidação de um algoritmo para computação quântica que será apresentado no Capítulo 5. Falaremos da dinâmica e do controle das populações de um condensado de Bose-Einstein em poço duplo através de um

potencial externo dependente do tempo. A partir destes dois últimos capítulos há uma discussão estendida e detalhada sobre alguns resultados que serão submetidos para publicação brevemente.

No quinto e último capítulo mostramos uma aplicação do modelo estendido de Bose-Hubbard (EBHM). Nele há os detalhes de uma derivação que culmina com o desenvolvimento de duas portas lógicas quânticas denominadas *porta de fase* e *controlled not*.

Os Apêndices, que naturalmente se encontram no final do corpo da tese, foram desenvolvidos para um maior conforto e melhor compreensão deste texto. Neles apresentamos tanto tópicos de uma relativa simplicidade até outros que exigem um pouco mais de maturidade do leitor. No entanto, o intuito é sempre o do esclarecimento das ideias apresentadas durante o texto da tese, mas que se mostrariam demasiadamente longas ou mesmo prolixas para a oportunidade.

Alguns tópicos complementares da derivação dos modelos desenvolvidos no segundo capítulo são apresentados no Apêndice A. Já o apêndice B traz a verificação da equação obtida para o operador densidade reduzido para o modelo GCC. Esta se constitui numa generalização para o cálculo da entropia linear reduzida a um sítio.

O último apêndice aborda em linhas gerais os elementos do desenvolvimento da equação de Gross-Pitaevskii utilizada no quarto capítulo como ferramenta para a descrição semiclássica da dinâmica populacional lá discutida.

Introdução

Certamente os registros mais antigos sobre o início do processo de contagem evidenciam uma das maiores descobertas da humanidade. Desde registros egípcios, babilônicos, gregos, indianos, árabes, dentre muitos outros, é extasiante observar a evolução dessas ideias até os dias atuais em diversos problemas que requerem cada vez mais técnicas apuradas e melhores desenvolvimentos nas suas soluções.

Inicialmente utilizando pedras, marcas em ossos, na argila ou mesmo na areia, a humanidade sempre percebeu a beleza matemática resolvendo problemas práticos cujas soluções algumas vezes se mostravam como um entretenimento, e, em outras, significava a sobrevivência de todo um povo. Foi se mostrando como solução eficaz para muitos dos nossos problemas que todo esse processo se incorporou aos povos e às suas culturas. Assim nascia aquela que se revelaria uma das mais fundamentais das ciências.

No contexto dos avanços trazidos pela matemática fomos capazes de perceber que poderíamos mecanizar a nossa maneira de calcular. O ganho e a agilidade que essas ideias poderiam trazer era tão grande que muitos pensadores sonharam em desenvolver aparatos que pudessem torná-las factíveis. Porém, muitos encontraram entraves nas limitações tecnológicas existentes em suas épocas. Isso, que impossibilitou a maioria daqueles sonhos, ainda assim não fez a humanidade desistir da sua busca.

Muito tempo depois, já no início do século XX, presenciamos o nascimento da mecânica quântica: uma teoria que aos poucos foi se mostrando promissora em resolver muitos problemas práticos. Foi ela quem possibilitou, por exemplo, a compreensão dos fenômenos que levaram à

invenção do transistor e ao grande desenvolvimento da indústria eletrônica: entrávamos na era dos computadores. E, a mesma mecânica quântica que nos possibilitou avanços como os da eletrônica, ainda trouxe outras compreensões para a criação de algoritmos quânticos. Hoje percebemos que estes podem nos auxiliar a resolver problemas computacionais anteriormente pouco tratáveis.

Com o desenvolvimento dos *lasers* nas últimas décadas e a utilização de muitos outros recursos como os condensados de Bose-Einstein, íons aprisionados, átomos artificiais e diversos outros sistemas que consideram a interação entre a luz e a matéria, percebemos que estamos diante de uma nova revolução na nossa maneira de calcular. Todos esses conhecimentos, que em sua maioria foram possibilitados pela mecânica quântica, parecem nos colocar diante de uma nova revolução: o início da realização prática das ideias que podem nos levar aos tão sonhados computadores embasados em algoritmos quânticos.

É neste cenário que presenciamos espaço para fenômenos que antes desconhecíamos que estivessem tão intimamente relacionados. O tratamento de elementos da teoria dos números, as transições de fases clássicas e quânticas, o emaranhamento em sistemas biológicos e outros sistemas que vem ganhando uma nova interpretação vêm nos mostrando muito do que a nossa percepção até então ignorava: as relações sutis entre as propriedades do mundo microscópico e a do mundo da nossa escala cotidiana.

Assim, quando verificamos os saltos que essa teoria quântica nos possibilitou, percebemos que podemos utilizar as diversas vertentes do nosso conhecimento para resolvermos problemas e alcançarmos avanços antes pouco sonhados. É observando todo esse desenvolvimento ao longo de milhares de anos que certamente há algo a reconhecer: jamais poderemos desprezar a capacidade de inventividade do ser humano.

Neste pequeno trabalho, utilizando as propriedades de um sistema quântico que também trata da interação entre a luz e a matéria, vamos tentar pôr um pouco de contribuição à viabilidade de uma codificação em computação quântica. Vamos verificar que nele também está presente o emaranhamento e a sua relação com uma transição de fase quântica bem particular. Aqui também temos mais uma dentre muitas outras propostas já feitas para portas lógicas quânticas.

Capítulo 1

Fundamentações

1.1 O resfriamento atômico

Desde os primeiros trabalhos experimentais sobre o resfriamento atômico que se confirmou a posição destacada da interação eletromagnética, o que consolidou a importância desta também para a física de baixas energias. Verificou-se que tal interação está na base não apenas de alguns processos como os de coesão dos átomos nas moléculas, mas também se encontra no âmago dos processos de emissão e absorção da luz. Assim, tornou-se evidente a necessidade do completo conhecimento desta para o estudo do resfriamento dos sistemas atômicos. Com isto explica-se, por exemplo, a sua atuação em relação aos graus de liberdade externos dos átomos, exemplificados pela posição e pelo momento linear do centro de massa; bem como dos internos, tais como a configuração e a polarização dos *spins* [2–7].

A manipulação dos referidos graus internos mostrou-se possível através do bombeamento óptico, que se utiliza da troca do momento angular entre os átomos e a luz circularmente polarizada com o intuito de se provocar alterações no estado de *spin* dos átomos. Já a manipulação dos graus externos se utiliza de forças radiativas provenientes da troca de momento linear entre a luz e os átomos [2–7].

Na formulação das tais manipulações se observou a existência de duas categorias de efeitos conhecidos como dissipativos e reativos. A partir de então utilizou-se tal terminologia para se

explicar, por exemplo, o resfriamento de um meio atômico cuja frequência de ressonância poderia ser ou não sintonizada àquela proveniente de um *laser*; criando, assim, o mecanismo que suportou esta primeira técnica denominada resfriamento Doppler¹.

Não demorou muito para perceber-se que o mecanismo por ora comentado possuía um limite. A própria radiação utilizada para se ‘frear’ os átomos de uma amostra como se estes se movimentassem num meio viscoso desempenha um fator limitante. Esta era a principal responsável, próximo ao limite Doppler de resfriamento, pelas causas perturbativas de aquecimento de uma amostra ocasionado pela troca de momento entre os fótons do *laser* e os átomos desta [8]. Para os átomos de sódio, por exemplo, tal limite foi previsto e confirmado no valor aproximado de $240\mu K$. Valores diferentes foram obtidos para diversos outros elementos, porém quase na mesma ordem de grandeza de centenas de microkelvins [5, 8].

Neste regime do limite Doppler de temperatura, ao se utilizar a aproximação da medida da extensão espacial do pacote de onda através do comprimento de onda térmico de de Broglie, percebe-se que este ainda é muito pequeno. Utilizando-se a relação $\lambda_{dB} = 2\pi\hbar/\sqrt{2M\kappa_B T}$ é possível estimá-lo na ordem de $10nm$, lembrando-se que tal valor depende da espécie atômica em questão.

A luz da verdade trouxe às técnicas de resfriamento a *laser* outros efeitos até então ignorados. A consideração dos vários níveis de energia de um átomo poderia, por exemplo, melhorar o processo de resfriamento através de uma regra de seleção do momentum angular, fazendo uso, portanto, dos graus internos de liberdade. Assim, as discussões então correntes mostraram que tal limite de resfriamento poderia ainda ser incrementado. Ou seja, ainda era possível dissipar energia cinética dos átomos constituintes de uma amostra e, conseqüentemente, aprisioná-los em potenciais menores que os até então obtidos. Portanto, tal relação nos mostra que acima ou próximo à temperatura limite Doppler, o comprimento de onda de de Broglie ainda é, no mínimo, uma ou duas ordens de magnitude menor que um comprimento de onda óptico. Isso evidencia

¹Uma maneira simplificada de se compreender tal técnica é partir da consideração de um sistema de dois níveis e considerar um campo externo, ambos com frequências, de transição e de oscilação, respectivamente, bem determinadas. Esse é um assunto de relativa simplicidade porém muito rico para a compreensão dos mecanismos de resfriamento. Discussões bem elaboradas podem ser encontradas nas obras de P. Meystre [5] e Scully e Zubairy [6].

que sua dinâmica ainda é bem descrita em termos da óptica geométrica. Porém, para se alcançar o regime da óptica ondulatória, é necessário ainda resfriar uma certa amostra abaixo do limite Doppler.

A elaboração desenvolvida por C. Cohen-Tannoudji e colaboradores [7,8] e a sua consequente observação por D. W. Phillips e colaboradores [4] do primeiro mecanismo eficaz para esta finalidade ficou conhecido como resfriamento por gradiente de polarização, ou resfriamento Sisyphus a campo fraco.

Na sua forma mais simples, o resfriamento por gradiente de polarização resulta do movimento de um átomo com dois estados fundamentais degenerados associados a dois potenciais ópticos fora de fase. Sob condições apropriadas, o átomo preferencialmente salta através de um bombeamento óptico de um para o outro estado fundamental quando ele se encontra próximo ao máximo do potencial inicial e, portanto, no mínimo do potencial final. Como resultado, o átomo em geral move-se “ladeira acima”, e perde energia cinética no processo².

Na verdade, qualquer mecanismo de resfriamento deve contar com alguma forma de dissipação de energia. No presente caso, como em muitas situações de resfriamento a *laser*, esta dissipação é sustentada pela emissão espontânea. Portanto, todo o processo resulta de uma transição virtual para a variedade dos estados excitados, seguida por transições estimuladas para o estado fundamental, o que pode, obviamente, levar os átomos a decaírem espontaneamente para esse estado.

Foi na tentativa de se continuar utilizando os métodos a *laser* para resfriamento que se descobriu uma limitação dos mesmos. E, em contraste aos métodos de resfriamento citados até o momento, o resfriamento evaporativo surgiu como decorrente de um efeito bastante simples. A ideia para o seu mecanismo é semelhante àquela que leva, por exemplo, ao resfriamento do conteúdo de uma xícara de café. Com o passar do tempo este esfria assim que as moléculas mais energéticas escapam da xícara e as restantes alcançam novamente o equilíbrio térmico, baixando

²Esta denominação está embasada na personagem mitológica grega Sisyphus condenada por Zeus a rolar uma pedra eternamente, em Hades (o inferno), colina acima, por ter delatado o sequestro de Égina, filha de Asopo, pelo próprio Zeus.

sua temperatura; refletindo uma consequência direta dos átomos ou mesmo das moléculas que possuem uma energia ligeiramente superior à energia térmica média. O resfriamento evaporativo de amostras atômicas funciona exatamente da mesma forma, exceto pelo fato de que a temperatura e a densidade das amostras nesse caso são muito diferentes das usuais, ou seja, são muito pequenas. A primeira proposta para tal técnica surgiu no trabalho de Hijmans [9] e sua demonstração experimental foi realizada com átomo de hidrogênio *spin*-polarizados.

A obtenção de um resfriamento eficiente por esta técnica exige que o limite superior da distribuição correspondente a altas energias da distribuição térmica dos átomos deve ser constantemente repopulada por colisões, de forma que uma distribuição de equilíbrio possa ser mantida e o processo de resfriamento sustentado. Portanto, uma condição salutar para o resfriamento evaporativo é que a amostra tenha uma densidade suficientemente baixa de forma que as colisões se tornem raras e tenhamos também um concomitante tempo longo para um novo alcance do equilíbrio térmico.

1.2 A utilização dos condensados de Bose-Einstein

Sabe-se que o trabalho de S. N. Bose realizado em 1925 e referendado por A. Einstein precisou de mais de 70 anos para a sua confirmação experimental. Esta, ocorrida apenas em 1995 e em dois experimentos independentes, que culminou com o prêmio Nobel de Física em 2000, demorou por diversos fatores. A principal limitação foi tecnológica e se deu pelo não desenvolvimento até então das técnicas de resfriamento brevemente comentadas na seção anterior. Desde então, dentro desta nova fronteira da Física, abriu-se um grande número de possibilidades de experimentos que vão das transições quânticas de fases até protocolos de computação quântica passando pelas mais diversas vertentes e aplicações científicas.

Um fato interessante destaca-se por um total desconhecimento de Bose a respeito das estatísticas quânticas, cujo desenvolvimentos ocorreram apenas alguns anos mais tarde. Desde então percebe-se quão visionário foi o trabalho recheado pela forte intuição de Bose.

Mesmo com tais desenvolvimentos, uma compreensão mais apurada do fenômeno da con-

densação de Bose-Einstein hoje torna-se mais evidente através do embasamento na Física Estatística. Portanto, procurarei fundamentar esta Seção no capítulo destinado à condensação de Bose-Einstein desenvolvida na referência [10]. Considero ainda igualmente importantes os trabalhos de Courteille e colaboradores [11] e indispensáveis as leituras das referências [12–14].

Hoje sabemos que as propriedades de um gás ideal de bósons podem ser obtidas por meio de uma grande função de partição dependente da temperatura, do volume e do potencial químico na qual realizamos uma soma sobre todos os estados de partícula única

$$\ln \Xi(T, V, \mu) = - \sum_j \ln \{1 - e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}\} \quad (1.1)$$

A partir de tal relação podemos determinar, no limite termodinâmico, grandezas como a pressão

$$p(T, \mu) = -k_B T \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln \Xi(T, V, \mu), \quad (1.2)$$

determinada em função da temperatura e do potencial químico, bem como para o valor esperado do número de ocupações dos orbitais

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1}, \quad (1.3)$$

o número termodinâmico de partículas

$$N = \sum_j \langle n_j \rangle = \sum_j \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1} \quad (1.4)$$

e a energia interna do sistema

$$U = \sum_j \epsilon_j \langle n_j \rangle = \sum_j \frac{\epsilon_j}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1}. \quad (1.5)$$

Durante tais derivações é notório que tais grandezas só fazem sentido para um potencial químico estritamente negativo.

No limite clássico de altas temperaturas observamos que o potencial químico é negativo, $\mu < 0$. Já no contexto quântico, com o número de partículas fixo, à medida que a temperatura diminui o potencial químico aumenta e pode eventualmente se anular, dando origem a um fenômeno peculiar,

denominado condensação de Bose-Einstein, que mantém certo paralelismo com a transição de superfluidez no hélio líquido e com a condensação do pares de Cooper na agora centenária teoria BCS da supercondutividade.

A partir do número termodinâmico de partículas é possível obtermos o potencial químico μ em termos da temperatura e da densidade $\rho = N/V$, embora não seja possível escrevermos uma expressão analítica para ele. No entanto, no limite clássico, que funciona para altas temperaturas, é relativamente fácil mostrarmos que

$$\frac{\mu}{k_B T} = \ln \left[\frac{1}{\gamma} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right)^{3/2} \right] + \ln \left(\frac{N}{V} \right) - \frac{3}{2} \ln(T), \quad (1.6)$$

na qual $\gamma = 2S + 1$ é a multiplicidade do *spin*. Portanto, para densidades fixas e temperaturas suficientemente altas, o potencial químico é negativo. Recorrendo a métodos numéricos, para um determinado valor de densidade, podemos obter as três curvas esboçadas na figura (1.1a) representando o potencial químico contra a temperatura no caso de férmions (curva azul), bósons (curva vermelha) e partículas clássicas livres (curva preta). Para altas temperaturas, as três curvas são idênticas. À medida que a temperatura diminui, o potencial químico dos férmions (ou das partículas clássicas) pode-se tornar positivo, mas o potencial químico dos bósons atinge o limite $\mu \rightarrow 0_-$, numa determinada temperatura T_0 e ‘gruda’ no valor $\mu = 0$ para qualquer T inferior ou igual a T_0 , $T \leq T_0$.

Determinamos o valor da temperatura T_0 tomando $\mu = 0$ na equação para o número termodinâmico de partícula e utilizando o espectro de energia usual de partículas livres

$$\epsilon_j = \epsilon_{\vec{\kappa},\sigma} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad (1.7)$$

e, notando que a soma pode ser transformada numa integral convergente no limite termodinâmico, temos

$$N = \gamma V \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{e^{\beta_0 \epsilon} - 1}, \quad (1.8)$$

que nos fornece a temperatura de Bose-Einstein

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2m\kappa_B} \left[\frac{4\pi^2}{\gamma \Gamma(3/2) \zeta(3/2)} \right]^{2/3} (N/V)^{2/3}. \quad (1.9)$$

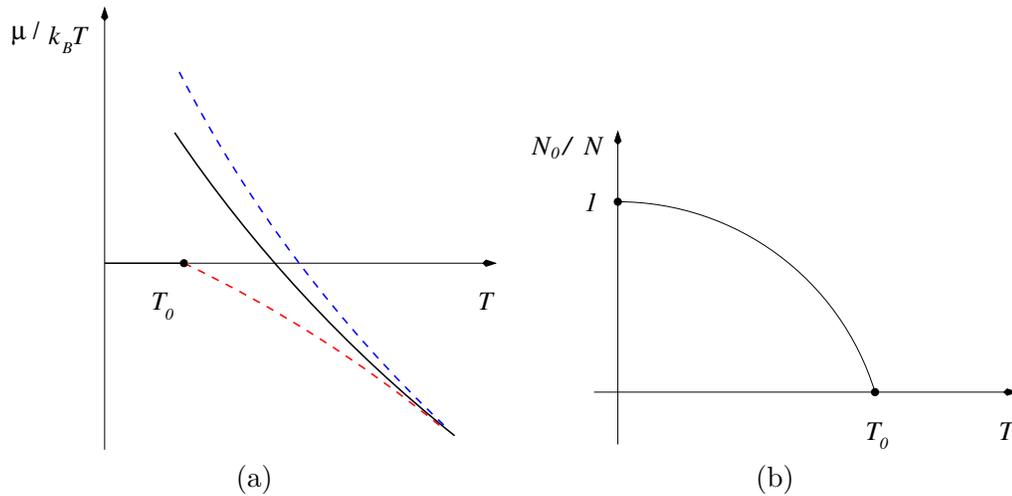


Figura 1.1: (a) Comportamento do potencial químico em função da temperatura, a uma densidade fixa, para as diferentes estatísticas. Observe que a linha cheia indica o limite clássico e a temperatura T_0 sinaliza a condensação de Bose-Einstein. (b) A fração de partículas condensadas em função da temperatura ao longo da região de coexistência ($\mu = 0$, com $T < T_0$).

Abaixo de T_0 o gás de bósons livre apresenta características bastante peculiares, que foram historicamente associadas ao comportamento superfluido do hélio líquido, embora seja pouco razoável desprezar as interações entre partículas num sistema denso e fortemente interagente como tal. Em 1995, Ketterle e Cornell, independentemente, conduziram experimentos que detectaram a existência de um condensado de Bose-Einstein num gás diluído de átomos de rubídio confinados magneticamente e resfriados por evaporação abaixo da temperatura de $170\eta K$ [13, 14]. Um sistema diluído desse tipo está mais próximo de um gás de bósons livres do que o hélio superfluido ou dos supercondutores metálicos [15].

Podemos obter a ordem de grandeza da temperatura de Bose-Einstein por meio de uma argumentação puramente qualitativa. Vamos supor que $\epsilon_0 \approx \kappa_B T_0$ seja a energia de ponto zero para localizar uma partícula numa região de volume V/N , com dimensão típica $\Delta x \approx (V/N)^{1/3}$. Como $\Delta x \Delta p \approx \hbar$, devemos ter $\Delta p = \hbar(V/N)^{-1/3}$. Escrevendo a energia de ponto zero na forma $\epsilon_0 \approx \kappa_B T_0 \approx (1/2m)(\Delta p)^2$, temos $T_0 \approx (h^2/2m\kappa_B)(N/V)^{2/3}$, que tem a mesma ordem de

grandeza da temperatura de Bose-Einstein dada pela equação (1.9).

Voltando à expressão para o número de partículas, escrevemos

$$\frac{N}{V} = \left[\frac{1}{V} \frac{z}{z-1} \right] + \frac{1}{V} \sum_{j \neq 0} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_j} - 1}. \quad (1.10)$$

Observamos que em tal expressão, o limite $z = e^{\beta \mu} \rightarrow 1$ deve ser tomado no limite termodinâmico, $V \rightarrow \infty$. Escrevemos então, com a razão N/V fixa e $T \leq T_0$, no limite $\mu \rightarrow 0$ e $V \rightarrow \infty$, $(1/V)(z/z-1) \rightarrow N_0/V$, na qual N_0/V é a densidade de partículas no estado com energia nula, ou seja, no condensado de Bose-Einstein, e

$$\frac{1}{V} \sum_{j \neq 0} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_j} - 1} \rightarrow \gamma \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{e^{\beta \epsilon} - 1} = \frac{N_e}{V}, \quad (1.11)$$

na qual N_e/V é a densidade de partículas nos estados excitados. Portanto,

$$N = N_0 + N_e. \quad (1.12)$$

Como a equação (1.8) fixa o número total de partículas, também podemos escrever

$$\frac{N}{V} = \gamma \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{e^{\beta_0 \epsilon} - 1}, \quad (1.13)$$

na qual β_0 é o inverso da temperatura de Bose-Einstein. Isso nos fornece a relação

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right]. \quad (1.14)$$

Na figura (1.1b) representamos N_0/N contra a temperatura T , ao longo da região de coexistência entre um condensado macroscópico e os estados excitados (isto é, para $\mu = 0$, com $T \leq T_0$, num diagrama de fase de μ contra T). Deve-se notar que $N_0 \rightarrow N$ para $T \rightarrow T_0$. Nas vizinhanças de T_0 ainda podemos escrever

$$\frac{N_0}{N} \approx \frac{3}{2} \frac{T_0 - T}{T_0}. \quad (1.15)$$

Uma abordagem mais sofisticada para o gás de bósons indica que $(N_0/N)^{1/2}$ é proporcional ao módulo do ‘parâmetro de ordem’ da transição: anula-se para $T \geq T_0$ e comporta-se, para

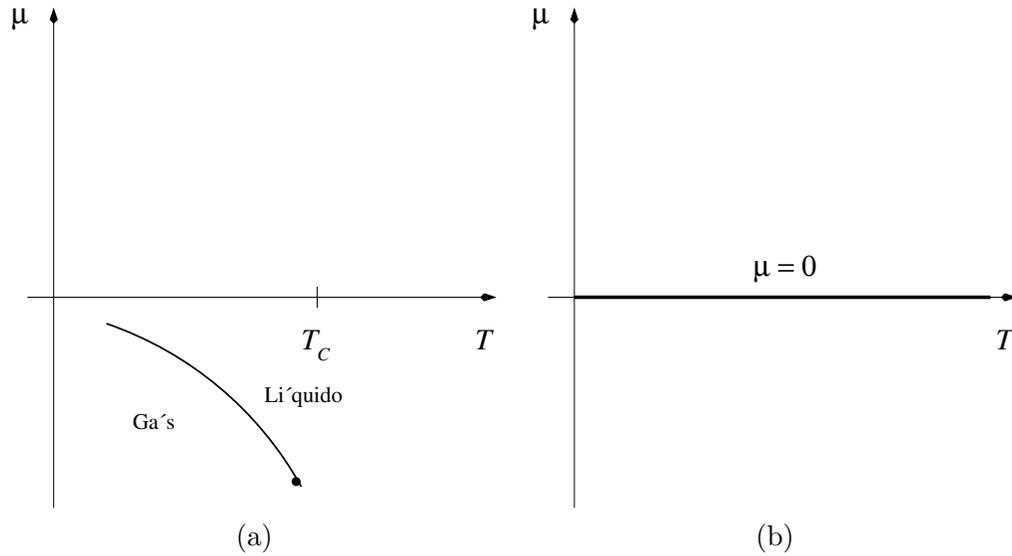


Figura 1.2: (a) Representação de um esquema do diagrama de fases de um fluido simples, nas vizinhanças do ponto crítico, em termos do potencial químico e da temperatura. Observe que a linha cheia é uma curva de coexistência de duas fases distintas que se tornam idênticas no ponto crítico. Em (b) representamos o mesmo tipo de diagrama para um gás de bósons livres.

$T \rightarrow T_{0-}$, de acordo com a lei assintótica $(T_0 - T)^\beta$, com o expoente crítico $\beta = 1/2$, que é um comportamento característico das transições de fases de segunda ordem na aproximação de campo médio. No entanto, a temperatura T_0 depende da densidade e não define um ponto crítico usual, como no caso do ponto crítico da transição líquido gás. No diagrama de fases, em termos de μ e T , há uma linha de coexistência (ou seja, de transições de primeira ordem) entre o condensado de Bose-Einstein e os estados excitados, ao longo do eixo $\mu = 0$, até a temperatura T_0 , de acordo com a figura (1.2).

Essa linha de transições de primeira ordem, no entanto, não pode ser cruzada, pois o gás de bósons livres não tem sentido físico para $\mu > 0$. Vale a pena também enfatizar que a condensação de Bose-Einstein, ao contrário da condensação usual de um fluido no espaço real, representa uma condensação de partículas no espaço de momentos (pois ocorre uma ocupação macroscópica dos estados de partícula única com momento nulo).

Hoje, dentro de um contexto acalorado por diversas propostas, tem-se mostrado vários exemplos eficazes para a obtenção de codificação de computação quântica. Isto abre portas também para a utilização dos condensados de Bose-Einstein, como proposto por Jaksch e colaboradores [16, 17], na elegante discussão sobre a utilização de condensados em redes ópticas. Citamos ainda os trabalhos de Anderlini e colaboradores [18] como proposta real e promissora, que se destaca no que hoje observamos no âmbito das aplicações dos tais condensados.

Consolida-se a cada dia, em virtude de novos experimentos com átomos ultrarresfriados, a ideia de que estamos no início de uma era de transformações científicas com grandes consequências tecnológicas. Em breve possivelmente isto representará transformações até mesmo superiores à que foi o transistor em meados do século passado, ocasionando grandes revoluções num breve futuro.

1.3 As potencialidades das redes ópticas

Em 1928 o físico suíço Felix Bloch publicou um trabalho pioneiro no qual ele apresentou um formalismo embasado no movimento dos elétrons sobre uma rede metálica perfeita [19–22]. Esta consistia de um potencial periódico uni-dimensional e com uma energia cinética muito maior que a energia dos movimentos eletrônicos através do metal. Esse método empregado por Bloch ficou conhecido como *tight binding*, e através dele Bloch resolveu a equação de Schrödinger por intermédio da análise de Fourier e da teoria de grupos [19–22].

Bloch demonstrou que a função de onda do elétron em um autoestado de energia de uma rede periódica perfeita é, na forma tridimensional, fornecida pela função de Bloch $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r})$, na qual $u(\vec{r} + \vec{a}) = u(\vec{r})$; \vec{a} é o período da rede; \vec{k} é o ‘vetor de onda do cristal’ e \vec{r} é a coordenada do elétron. Essa foi a mesma ideia que fundamentou o conceito das redes ópticas aqui comentadas e que hoje é largamente utilizada em diversos experimentos em física.

Já para estendermos este conceito para as redes ópticas, lembremos que nos cursos de Física Básica, através do princípio de superposição, aprendemos que uma combinação linear qualquer de ondas num determinado meio também é uma onda possível nesse meio. Como exemplo, con-

sideremos a superposição de duas ondas progressivas harmônicas de mesma frequência que se propagam em sentidos opostos, que é justamente a ideia apresentada para a reprodução experimental de uma rede óptica, na qual um aparato bastante simples pode ser pensado como um feixe de *laser* refletido sobre ele mesmo. Portanto, para duas equações de onda dadas por $y_1(x, t) = A\cos(kx - \omega t)$ e $y_2(x, t) = A\cos(kx + \omega t)$, sabemos que a resultante da soma desses dois feixes nos fornece $y = y_1 + y_2 = A[\cos(kx - \omega t) + \cos(kx + \omega t)] = 2A\cos(kx)\cos(\omega t)$. Observemos que o resultado expresso por $y(x, t) = 2A\cos(kx)\cos(\omega t)$ não representa a propagação de um sinal, pois ele se constitui do produto entre duas funções, uma dependente do tempo e a outra da posição. Neste caso, a forma do feixe permanece sempre a mesma com mudanças apenas na sua amplitude e no seu sinal, caracterizando uma onda estacionária.

A obtenção experimental dessa condição acima é realizada através de um feixe de *laser* refletido sobre si mesmo, o que se constitui no que denominamos uma rede óptica. Estas são consideradas como um ambiente muito interessante para a realização de diversos experimentos em Física por se mostrarem como ‘cristais de luz’ livres de imperfeições. Ainda assim, é necessária a introdução de uma componente magnética para o completo aprisionamento de uma amostra atômica. No entanto, a estrutura da rede óptica depende tão pura e simplesmente do feixe de *laser* [23, 24].

Há ainda que se comentar sobre possíveis ‘imperfeições’ na rede ocasionando uma quebra de simetria translacional devida ao termo magnético. Uma interpretação possível pode ser desenvolvida de maneira análoga à apresentada por Andreev e Lifshitz em 1969 [25]. Neste, um tratamento que prevê tais imperfeições é desenvolvido no ambiente de uma rede cristalina. Tal trabalho tornou-se notável pela época de sua publicação, bem antes da grande ‘explosão’ do potencial das redes ópticas corroborada pelos experimentos que poderiam ser desenvolvidos a partir delas.

1.4 As transições de fase

Embora seja vasta a produção bibliográfica fundamentada nos fenômenos de transições de fases, sejam estas clássicas ou quânticas, é interessante discorrer sobre alguns pontos históricos e

técnicos para familiarizar o leitor com um dos problemas abordados por este texto. Um ensaio esclarecedor sobre as transições de fase e que discorre sobre diversos exemplos interessantes é realizado na referência [26], na qual procurei embasar esta discussão.

Sabemos que em Física faz-se referência a uma transição de fase quando se observa uma mudança abrupta nas propriedades de um certo sistema para um conjunto bem definido de variáveis de estado. E como tais mudanças podem ocorrer num número muito grande em concordância com a variação das mais diversas variáveis ou modelos, não demorou para naturalmente surgir uma necessidade de classificação dessas transições. A primeira tentativa neste sentido foi realizada por Ehrenfest, que as agrupou embasado no grau de não-analiticidade envolvido da energia livre [26]. Assim, as transições foram classificadas sob este esquema. Ou seja, as transições são de primeira ordem quando envolvem uma mudança descontínua na densidade, que é a primeira derivada da energia livre em relação ao potencial químico. Já as transições de segunda ordem apresentam uma descontinuidade na segunda derivada da energia livre. No entanto, por não contemplar os casos nos quais a derivada da energia livre diverge, que se mostra possível apenas no limite termodinâmico, tal elaboração não se mostrou eficaz. Por exemplo, na transição ferromagnética a capacidade térmica diverge a infinito [26]. Surgiu então uma elaboração moderna de classificação das transições de fase agrupando-lhes em duas grandes categorias similares ao esquema de Ehrenfest.

A primeira classe de transições de fases envolve um calor latente. Durante tais transições um sistema absorve ou emite uma quantidade fixa e tipicamente grande de energia. Como a energia não pode ser instantaneamente transferida entre o sistema e a sua vizinhança, as transições de fase de primeira ordem estão associadas com regimes de ‘fase mista’ nos quais algumas partes do sistema já completaram a transição enquanto outras ainda não. Estes são sistemas muito difíceis de serem estudados. Contudo, muitas transições de fase estão nessa categoria, incluindo a própria condensação de Bose-Einstein.

A segunda classe de transição é a de fases contínuas, também chamadas de transições de segunda ordem. A esta não está associada um calor latente. Exemplos de transições desta categoria

são as ferromagnéticas e as superfluidas. Há outras transições de fases infinitas costumeiramente denominadas contínuas. Dentre estas encontra-se a transição denominada BKT (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless), para a qual encontramos uma manifestação que discutiremos no terceiro capítulo deste texto.

Porém, um aspecto salutar para a discussão que ora se desenvolve está relacionada em função de qual parâmetro uma transição de fase ocorre. Dentro desse estudo classificamos uma transição como clássica quando ela é movida pelo efeito térmico e portanto caracterizada por uma temperatura de transição denominada temperatura crítica. Com esta observação procura-se descrever o comportamento singular das grandezas físicas de um sistema através de comportamentos assintóticos em função de uma variável térmica [27].

Para uma transição de fase quântica, tais descrições são caracterizadas pela variação de um parâmetro não térmico. Este pode ser um campo magnético, um potencial químico ou outro parâmetro que se mostre conveniente. Disto conclui-se que tais transições necessariamente ocorrem à temperatura efetivamente nula [27, 28]. Dentro deste contexto, há a viabilidade de se detectar uma transição de fase quântica através de flutuações quânticas, por exemplo, do número total N de partículas. Para isso, é necessário que calculemos $\Delta N^2 = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$, que naturalmente será função de um parâmetro não térmico que poderemos variar para determinarmos tal transição. Reservamos os detalhes dessa discussão para uma apresentação mais apurada no terceiro capítulo deste texto.

1.5 Um recurso para computação quântica

Observamos que a definição de emaranhamento está embasada no tipo de estado que se utiliza para uma medida. Dizemos que um estado puro é emaranhado ou não local se, e somente se, seu estado vetorial não pode ser expresso como um produto de estados puros de suas partes. Observe que a partir desta definição podemos equivalentemente definir quando um estado não está emaranhado.

Dizemos ainda que estados mistos surgem quando uma ou ambas as partes de um estado

inicialmente puro emaranhado interage com outros graus quânticos de liberdade, resultando numa evolução não unitária do estado puro em um outro estado.

Do conceito de emaranhamento é possível, por exemplo, perceber-se as diferenças acentuadas entre as propriedades do mundo clássico daquele regido pelas leis da mecânica quântica. Grosso modo, dizemos que o emaranhamento é uma forma de medir correlações em sistemas quânticos, o que o torna um recurso importante cuja medida ou caracterização corrobora as propriedades pelas quais podemos distingui-los dos sistemas clássicos.

Além das importâncias citadas, a utilização do emaranhamento como recurso para a implementação de protocolos de informação quântica está consolidada. Esta é evidenciada não apenas pela quantidade de publicações recentes que abrangem assuntos como a codificação superdensa e o teleporte quântico [29–31], como também por outras aplicações trazidas ao campo da computação quântica com um número crescente de exemplos nos últimos anos.

Uma análise mais aprofundada sobre os fundamentos da mecânica quântica nos mostra que o emaranhamento está embasado na propriedade de linearidade da referida teoria. Sabemos então que um espaço vetorial dotado de uma métrica é o ponto de partida para uma descrição ondulatória da natureza. Consigo, essa descrição traz o princípio de superposição, graças à linearidade garantida pelos postulados da mecânica quântica.

Faremos nesta tese uma descrição dos diversos tipos de emaranhamento presentes no modelo de Bose-Hubbard, que desenvolveremos a partir do próximo capítulo e que terá uma continuidade no terceiro capítulo deste texto.

Capítulo 2

A derivação dos modelos

A descrição apresentada neste capítulo sobre a obtenção dos modelos a serem explorados está embasada em sua quase totalidade nos trabalhos seminais de F. Haldane [32] e M. Fisher e colaboradores [33]. Juntas elas fornecem um tratamento rigoroso e bastante completo, além de desenvolverem algumas aplicações interessantes para a compreensão dos sistemas de átomos frios abordados por diversos autores na vasta literatura sobre o assunto. E, embora seja salutar a busca de fontes complementares durante uma pesquisa, é saudável que o leitor interessado nesses sistemas comece explorando tais referências.

Outro trabalho relevante e que traz uma abordagem detalhada sobre o desenvolvimento e a obtenção dos operadores hamiltonianos bastante utilizado neste texto foi realizado por B. Robertson [34]. Nele há um tratamento didático e introdutório à análise das referências [16] e [17], ambas capitaneadas por D. Jaksch, e recheadas de aplicações muito interessantes aos sistemas bosônicos de átomos frios.

Portanto, iniciamos esta discussão argumentando que uma descrição fiel de um sistema de átomos aprisionados num potencial periódico, como o de uma rede óptica, deve obviamente considerar as diversas interações presentes entre os átomos e o campo de aprisionamento. Neste caso, começaremos com a derivação de um modelo que considere em primeira ordem as interações de colisão entre os átomos presentes em um mesmo sítio da rede. Estas são conhecidas como autocolisões. Além dessas, consideramos ainda as colisões entre os bósons localizados em sítios distintos

e a estas denominaremos colisões cruzadas.

Um outro termo de relevância salutar que observamos surgir em nossos cálculos é o de ‘tunelamento’, comumente denominado *hopping*¹, correspondente ao ‘salto’ de bósons de um sítio para outro, contíguo ou não. Nesse mesmo hamiltoniano verificaremos a presença de um termo correspondente ao aprisionamento por um campo magnético responsável pela quebra da simetria translacional do que definimos por rede óptica, cuja consideração foi comentada na Seção 1.3.

Dentre os modelos explorados nesta tese há um experimentalmente pouco factível que considera o *hopping* entre quaisquer sítios. Este é conhecido como gráfico completamente conectado (GCC), cuja representação é ilustrada na figura (2.1a). E, embora sejamos levados à ideia de que as interações ocorram num plano, é oportuno enfatizar que esse modelo recupera os resultados obtidos através de uma teoria de campo médio, pois ele considera infinitas interações no limite de um sistema como muitos bósons e sítios. Este é um modelo que recentemente despertou o interesse de alguns grupos de pesquisa, como pode ser verificado nas publicações [35–37].

Em seguida apresentaremos o modelo estendido de Bose-Hubbard, que ainda considera as colisões cruzadas. Estas introduzem peculiaridades na dinâmica colisional deste sistema em virtude da superposição das funções de onda de partícula única responsável pela descrição matemática da distribuição espacial dos bósons. Este modelo, embora sem fenomenologia consolidada, possui um rico diagrama de fases extensamente discutido nas referências [38–42].

Após essas obtenções faremos uma particularização para o modelo de Bose-Hubbard, cujas interações de colisão cruzada são desprezadas, permanecendo apenas os termos de ‘tunelamento’ e de autocolisão. Esses dois outros modelos estão esquematizados nas figuras (2.1b-c).

É imprescindível ainda lembrar que o modelo mais conhecido e consagrado experimentalmente, simplesmente denominado modelo de Hubbard, foi desenvolvido para sistemas fermiônicos e descreve com eficácia o movimento dos elétrons em uma rede cristalina [43]. Portanto, o trabalho de F. Haldane [32] utilizado nos estudos de M. Fisher e colaboradores [33] e D. Jaksch e colabo-

¹O termo *hopping* não possui uma tradução consolidada pela comunidade científica brasileira. Portanto, quando necessário, vou utilizá-lo ou tão somente farei referência como à transferência ou ‘tunelamento’, embora este também não possua registro no Vocabulário Ortográfico da Língua Portuguesa.

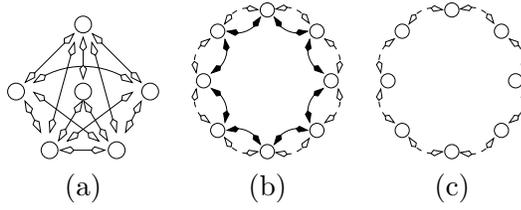


Figura 2.1: (a) GCC, (b) EBHM e (c) BHM. Nas três figuras as setas claras representam o ‘tunelamento’ (*hopping*) e as bolas representam a autocolisão. Em (b) as setas escuras representam a colisão cruzada.

radores [16, 17], constitui-se numa adaptação do modelo fermiônico para bósons com *spin* nulo, denominado modelo de Bose-Hubbard. Este também apresenta uma vasta gama fenomenológica que recentemente veio à luz do conhecimento humano. Tais resultados reveladores de fenômenos físicos ricos e de notável beleza serão oportunamente comentados neste texto.

2.1 O operador hamiltoniano

O ponto de partida para a derivação do hamiltoniano de cada um dos modelos que pretendemos explorar é a consideração do operador consagrado na literatura que fielmente descreve um sistema de muitos corpos

$$\mathcal{H} = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_1(\mathbf{r}) + V_T(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

e que, portanto, faremos uso para a dinâmica dos bósons localizados em um potencial confinador usualmente harmônico denotado por $V_1(\mathbf{r})$, que no nosso problema de interesse representa o potencial da rede óptica. Observe que $\psi(\mathbf{r})$ é um operador bosônico de campo para átomos em um determinado estado atômico interno e $V_T(\mathbf{r})$ descreve o potencial adicional confinante, que geralmente é proveniente de um campo magnético. A introdução deste causa uma assimetria no problema, invalidando a afirmação sobre as redes ópticas serem ‘cristais perfeitos de luz’. De fato, vimos no Capítulo 1 que o potencial periódico formado por elas trazem a possibilidade de vários estudos e simulações em física da matéria condensada. De qualquer forma, desenvolveremos

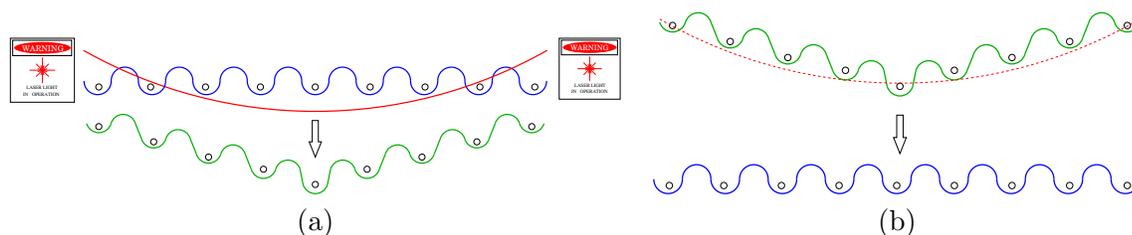


Figura 2.2: Representação unidimensional idealizada de uma rede óptica (a) com presença do campo magnético combinado com o potencial da rede e, ainda, (b) a consideração da invariância translacional sem o campo magnético.

nossos cálculos considerando essa tal invariância translacional para o problema. Uma abordagem que envolva o termo $V_T(\mathbf{r})$ só é possível com a utilização de outras técnicas mais sofisticadas. Mas, essa aproximação não causa grandes consequências para as nossas análises, pois, em sua maioria, os campos utilizados em experimento de condensação de Bose-Einstein são muito pequenos e, portanto, a deformação que causam no potencial da rede óptica é pequena. Uma ideia da influência da adição do termo correspondente ao campo magnético é mostrada na figura 2.2.

Nesse mesmo operador ainda observamos a presença do termo $V_2(\mathbf{r})$, que descreve o potencial de interação entre os bósons que se encontram no mesmo sítio. Este é aproximado por um potencial de contato²

$$V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.2)$$

no qual a_s representa o comprimento de espalhamento de onda s , m a massa dos átomos e $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é a função delta de Dirac.

Lembramos que é preciso escrevermos o operador (2.1) em segunda quantização. A expansão dos operadores de campo $\psi(\mathbf{r})$ depende da escolha de uma base de funções, que é convenientemente escolhida como um conjunto completo ortonormal de funções de onda de partícula única. Denotaremos tal base por $\{u_k(r)\}$ e, de acordo com essa escolha, as funções de onda obedecem à

²Nos livros-textos dos cursos fundamentais em Física tal potencial é ainda referido como de *esfera dura* ou mesmo *infinito*.

relação de ortogonalidade

$$\sum_k u_k(r)u_k^*(r') = \delta(r - r'). \quad (2.3)$$

Nesta representação escreveremos o operador de destruição bosônico $\psi(r)$ como

$$\psi(r) = \sum_k \hat{a}_k u_k(r) \quad (2.4)$$

e similarmente o seu adjunto denominado operador de criação bosônico

$$\psi^\dagger(r) = \sum_k \hat{a}_k^\dagger u_k^*(r), \quad (2.5)$$

nas quais os operadores \hat{a} e \hat{a}^\dagger são respectivamente escritos como

$$\hat{a}_k = \int u_k(r)\psi(r)d^3r \quad (2.6)$$

e

$$\hat{a}_k^\dagger = \int u_k^*(r)\psi^\dagger(r)d^3r. \quad (2.7)$$

Os operadores (2.6) e (2.7) satisfazem a relação usual de comutação bosônica.

Fazemos ainda as considerações dos autoestados de energia como funções de Bloch. Sabemos que uma superposição apropriada destes estados fornece um conjunto de funções de Wannier que estão bem localizadas no sítios da rede [44, 45]. Além disso, este desenvolvimento atenta para o pequeno valor da energia do estado fundamental quando comparada à energia de excitação para as bandas superiores. Portanto, expandimos os operadores de campo na base de funções de Wannier e tomamos somente os termos do mais baixo estado vibracional. Dessa forma, separamos os termos do hamiltoniano em três modalidades na forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_s, \quad (2.8)$$

com \mathcal{H}_c correspondendo à parte cinética, \mathcal{H}_t ao aprisionamento e \mathcal{H}_s ao termo colisional.

Essa separação nos ajuda a realizar uma análise apurada de cada termo. Isto nos revela a manifestação das interações envolvidas na dinâmica do problema para finalmente escrevermos

tal operador apropriada e convenientemente em segunda quantização. Vamos conduzir esse desenvolvimento a partir de agora que, mesmo com alguns detalhes matemáticos, ainda assim se mostrará em linhas gerais de uma visão interessante. Inicialmente consideramos um potencial de poço duplo simétrico e em seguida argumentamos a extensão para o potencial de uma rede óptica. Assim, comecemos pela parcela \mathcal{H}_c na equação (2.8), que se escreve como

$$\mathcal{H}_c = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \hat{\psi}^\dagger(r_1) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(r_2) \delta(r_1 - r_2), \quad (2.9)$$

que, com a utilização da relação (2.3), escreve-se

$$\mathcal{H}_c = \sum_k \int d^3r_1 \int d^3r_2 \hat{\psi}^\dagger(r_1) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(r_2) u_k(r_1) u_k^*(r_2), \quad (2.10)$$

para finalmente tomar a forma

$$\mathcal{H}_c = \sum_k \int d^3r_1 \hat{\psi}^\dagger(r_1) u_k(r_1) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \int d^3r_2 \hat{\psi}(r_2) u_k^*(r_2), \quad (2.11)$$

que se expressa convenientemente por

$$\mathcal{H}_c = E \sum_{k=1}^2 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (2.12)$$

ou ainda explicitamente referindo-se aos dois modos do potencial

$$\mathcal{H}_c = E \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b} \right). \quad (2.13)$$

Para o termo \mathcal{H}_t procedemos de maneira análoga. Neste encontramos

$$\mathcal{H}_t = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(r) V_1(r) \hat{\psi}(r), \quad (2.14)$$

que se reescreve como

$$\mathcal{H}_t = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \hat{\psi}^\dagger(r_1) V_1(r_2) \hat{\psi}(r_2) \delta(r_1 - r_2) \quad (2.15)$$

para tomar a forma

$$\mathcal{H}_t = \sum_{k,\ell} \int d^3r_1 \hat{\psi}^\dagger(r_1) u_k(r_1) \int d^3r_2 V_1(r_2) u_k^*(r_2) \int d^3r_3 \hat{\psi}(r_3) u_\ell(r_2) u_\ell^*(r_3), \quad (2.16)$$

expressa ainda por

$$\mathcal{H}_t = \sum_{k,\ell} a_k^\dagger a_\ell \int d^3 r_2 u_k^*(r_2) V_1(r_2) u_\ell(r_2), \quad (2.17)$$

que fica explicitamente escrita como

$$\mathcal{H}_t = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b} \right) \langle V \rangle_{aa,bb} + \left(\hat{b}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{b} \right) \langle V \rangle_{ab,ba}, \quad (2.18)$$

na qual definimos

$$\langle V \rangle_{aa,bb} = \int d^3 r u_i^*(r) V(r) u_i(r) \quad (2.19)$$

e

$$\langle V \rangle_{ab,ba} = \int d^3 r u_i^*(r) V(r) u_j(r). \quad (2.20)$$

Procedendo de maneira análoga encontramos para a terceira parcela, \mathcal{H}_s , a forma

$$\mathcal{H}_s = \sum_{k,\ell,m,n} a_k^\dagger a_\ell^\dagger a_m a_n \int d^3 r u_k^*(r) u_\ell^*(r) u_m(r) u_n(r), \quad (2.21)$$

que após um desenvolvimento algébrico laborioso nos fornece

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_s = & \frac{U_0}{2\hbar} \left\{ \hbar \left[\left(\hat{a}^\dagger \right)^2 \left(\hat{a} \right)^2 + \left(\hat{b}^\dagger \right)^2 \left(\hat{b} \right)^2 \right] \left(\int d^3 r |u_i|^4 - \int d^3 r u_i^* u_j u_i^* u_j \right) + \right. \\ & + 2\hbar \left(\hat{a}^\dagger N \hat{b} + \hat{b}^\dagger N \hat{a} \right) \int d^3 r u_i^* u_j^* u_i u_j + \\ & \left. + \hbar \left[N(N - 2\mathcal{I}) + \left(\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a} \right)^2 \right] \int d^3 u_i^* u_j u_i^* u_j \right\}, \quad (2.22) \end{aligned}$$

que se reescreve na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_s = & (\kappa - \eta) \hbar \left[\left(\hat{a}^\dagger \right)^2 \left(\hat{a} \right)^2 + \left(\hat{b}^\dagger \right)^2 \left(\hat{b} \right)^2 \right] + \\ & + 2\Lambda \hbar \left(\hat{a}^\dagger N \hat{b} + \hat{b}^\dagger N \hat{a} \right) + \eta \hbar N(N - 2\mathcal{I}) + \eta \hbar \left(\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a} \right)^2. \quad (2.23) \end{aligned}$$

As considerações para tal potencial de poço duplo nos levam ao hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \hbar [2\Lambda(N - \mathcal{I}) + \Omega] \left(\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a} \right) + \hbar \eta \left(\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a} \right)^2 + \\ & + \hbar (\kappa - \eta) \left[\left(\hat{a}^\dagger \right)^2 \left(\hat{a} \right)^2 + \left(\hat{b}^\dagger \right)^2 \left(\hat{b} \right)^2 \right] + \hbar \eta N(N - 2), \quad (2.24) \end{aligned}$$

para o qual definimos $\kappa = U_0/(2\hbar V_{eff})$ como o parâmetro de autocolisão. Os parâmetros $\eta = (U_0/2\hbar) \int d^3r u_i^* u_j u_i^* u_j$ e $\Lambda = (U_0/2\hbar) \int d^3r u_i^* u_j u_i^* u_i$ representam os termos de colisões cruzadas e $V_{eff}^{-1} = \int d^3r |u_i|^4$ corresponde ao volume efetivo de cada um dos modos em consideração. Em tais definições utilizamos $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ e durante todo o cálculo assumimos que o número total de partículas é uma quantidade conservada. O termo $N(N-2I)$, que se constitui numa constante de movimento, é denominado invariante de Casimir.

Analogamente podemos pensar num problema de uma rede óptica na qual temos ℓ sítios. Fazendo um tratamento com as mesmas considerações do potencial de poço duplo simétrico encontramos o hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\ell} (\kappa - \eta) N_{\ell} (N_{\ell} - I) + \sum_{\ell} \left\{ [2\Lambda (N_{\ell} - I) + \Omega] \left(\hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1} + h.c. \right) \right\} + \\ & + 2 \sum_{\ell} \eta N_{\ell} N_{\ell+1} + \sum_{\ell} \eta \left(\hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1} \hat{a}_{\ell+1} + \hat{a}_{\ell+1}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \hat{a}_{\ell} + N_{\ell} + N_{\ell+1} \right) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Faremos então a particularização dos três modelos mais abordados na literatura e que estudaremos nesta tese partindo dessa que é a forma mais geral do operador hamiltoniano.

Observe o leitor que podemos perfeitamente obter o operador (2.24) a partir de (2.25) simplesmente tomando o caso particular de dois modos para a rede, o que nos proporciona um potencial simétrico de poço duplo.

2.2 O modelo de gráficos completamente conectados

Dentre os modelos apresentados nesta tese este é o único que faz a consideração do ‘tunelamento’ entre quaisquer sítios da rede. No entanto, não consideramos as colisões cruzadas, ou seja, os termos η e Λ são nulos. A taxa de autocolisão continua sendo considerada e aqui representadas por κ . Portanto, o leitor deve observar que embora este modelo ‘recupere’ um termo de ‘tunelamento’ completo durante a sua derivação, ainda sim ele é desenvolvido sem a abordagem de uma extensão espacial das funções de onda que permitam a consideração dos termos de colisão cruzada. Este modelo encontra uma abordagem motivante na literatura no trabalho de G.

Mazzarela e colaboradores [46], que traz uma discussão bastante interessante, dentre outras, das fases quânticas que se manifestam nele.

A representação do operador hamiltoniano nesta configuração fica escrita como

$$\mathcal{H} = \kappa \sum_i N_i (N_i - I) - \Omega \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i), \quad (2.26)$$

na qual os parâmetros Ω e κ permanecem com as definições anteriores e novamente o termo μ não é considerado por tratarmos o problema no *ensemble* microcanônico. Esta é uma asserção reforçada pela conservação assumida durante a construção do modelo sobre o número de bósons.

No Capítulo 3 discutiremos a relação entre a evolução do emaranhamento multipartido e do bipartido com a transição de fase quântica entre as fases isolante de Mott (IM) e superfluida (SF) que ocorre tanto neste modelo como no modelo de Bose-Hubbard, que discutiremos nas próximas seções.

2.3 O modelo estendido de Bose-Hubbard

Embora muitos resultados experimentais tenham sido obtidos no estudo de transição quântica de fases de sistemas hamiltonianos fortemente correlacionados, há uma notável limitação nesses modelos [47]. A maioria deles, como o tratamento para átomos frios em redes ópticas, é essencialmente tratada como sistemas nos quais apenas as interações entre átomos localizados do mesmo sítio são levadas em consideração, isto é, desprezam-se as interações entre átomos de sítios vizinhos.

Observou-se recentemente uma grande relevância na consideração de tais termos [48]. Demonstrou-se em uma formulação quântica exata que os termos de colisão cruzada entre átomos aprisionados em um poço duplo de potencial podem aumentar significativamente a taxa de ‘tunelamento’ para uma configuração especial de aprisionamento levando a um regime efetivo de Rabi de oscilação de população entre os poços.

Uma consideração análoga e estendida para vários sítios de uma rede óptica nos leva ao modelo mais completo neste aspecto. Este possui um diagrama de fases bastante rico como proposto por

Scarola e Das Sarma [38,39] e também por Pai [40] e é expresso pelo hamiltoniano obtido a partir do operador (2.25)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\ell} (\kappa_{\ell} - \eta_{\ell,\ell+1}) N_{\ell} (N_{\ell} - I) + \sum_{\ell} \left\{ [2\Lambda_{\ell,\ell+1} (N_{\ell} - I) + \Omega_{\ell,\ell+1}] (\hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1} + h.c.) \right\} + \\ & + 2 \sum_{\ell} \eta_{\ell,\ell+1} N_{\ell} N_{\ell+1} + \sum_{\ell} \eta_{\ell,\ell+1} \left(\hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1} \hat{a}_{\ell+1} + \hat{a}_{\ell+1}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \hat{a}_{\ell} + N_{\ell} + N_{\ell+1} \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Este, que considera os termos de interação entre bósons localizados em sítios vizinhos³, além do tunelamento entre sítios vizinhos, é amplamente conhecido na literatura como hamiltoniano estendido de Bose-Hubbard. O estudo deste modelo tem levado a discussões interessantes no campo de transições de fases quânticas [38–41] propondo a existência de duas novas fases denominadas ondas de densidade e supersólida, além das fases isolante de Mott e superfluida previstas pelo modelo de Bose-Hubbard e comprovadas em experimentos recentes [47]. Estas novas fases apresentam propriedades tanto cristalinas como superfluidas.

A previsão dessas novas fases é obtida através de um tratamento teórico no qual se considera um regime de baixas densidades. Isto equivale a desprezar a influência dos termos de dupla ocupação, $(\hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1} \hat{a}_{\ell+1} + \hat{a}_{\ell+1}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \hat{a}_{\ell}) \approx 0$, e considerar apenas o termo mais significativo para o problema $2 \sum_{\ell} \eta_{\ell,\ell+1} N_{\ell} N_{\ell+1}$. Esse termo adicional leva à fase denominada ondas de densidade que é caracterizada por uma densidade semi-inteira na ocupação dos sítios da rede.

Como consequência direta das dimensões envolvidas na solução do problema, pode surgir uma terceira fase denominada supersólida. Embora esta ainda seja um motivo de intensos debates entre os experimentalistas [42], os modelos teóricos sugerem que ao se considerar duas ou mais dimensões ela se manifeste como uma fase intermediária na transição entre as fases superfluida e ondas de densidade. Em modelos bosônicos unidimensionais não há a evidência de previsão dessa fase [38–41].

³conhecidos também como termos de interação *off site*.

2.4 O modelo de Bose-Hubbard

De acordo com os comentários no início deste Capítulo, a primeira descrição eficaz para o modelo bosônico foi desenvolvida por M. Fisher e colaboradores [33] no trabalho em que se desenvolve um estudo teórico seguido de uma elegante aplicação para um meio poroso constituído por *Vycor*⁴.

A principal diferença deste modelo para os demais aqui comentados reside na simplicidade em considerarmos o termo de ‘tunelamento’ apenas entre sítios vizinhos, o que também é verdade para o modelo estendido, e de colisões entre bósons localizados no mesmo sítio, o que se representa pelo operador

$$\mathcal{H} = \kappa \sum_{\ell} N_{\ell} (N_{\ell} - I) - \Omega \sum_{\ell} \left(\hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell+1} + h.c. \right) \quad (2.28)$$

Uma representação dos termos do operador dado pela equação (2.28) é apresentada na figura (2.3)

Vários experimentos abrangendo segmentos relacionados aos pontos quânticos, fenômenos de transição de fases quânticas e observações fenomenológicas em ilhas supercondutoras como junções de Josephson, foram apresentados e eficazmente explicados pelo modelo ora apresentado. No entanto, talvez o maior sucesso e a conseqüente grande divulgação deste aconteceu após os experimentos realizados por Greiner e colaboradores [47]. Nesse trabalho é conduzida uma minuciosa e elegante demonstração sobre a transição de fase quântica entre as superfluida e isolante de Mott numa rede óptica tridimensional. Tal transição, prevista para ocorrer no valor $\kappa/\Omega = 5, 6z$, na qual z refere-se ao número de primeiros vizinhos, é observada para o valor aproximado de $\kappa/\Omega \approx 36$, mostrando uma excelente concordância com o valor teórico proposto. No desenvolvimento desse trabalho, os parâmetros de autocolisão e de ‘tunelamento’ foram controlados pela intensidade do conjunto de *lasers* que formaram a rede óptica.

Seguiram-se então outros trabalhos de cunho experimentais em arranjos uni, bi e tridimensionais mostrando transições de fases para ambos, todos trazendo à tona a relevância para a com-

⁴*Vycor é um vidro com alta resistência a choques térmicos e mecânicos desenvolvido pela empresa Corning Incorporated. Esse material é composto por 96% de sílica, mas ao contrário da tal, ele pode ser facilmente manipulado em uma grande variedade de formas mostrando uma excelente versatilidade para aplicações industriais e tecnológicas.*

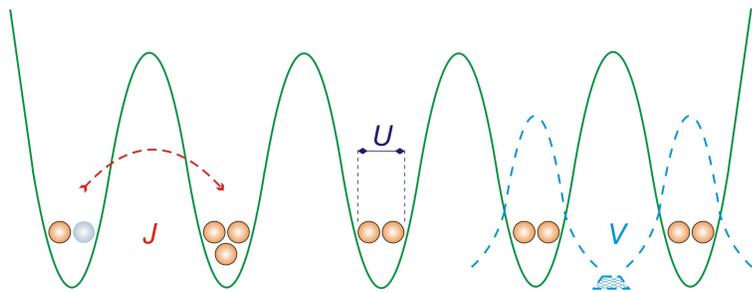


Figura 2.3: Representação esquemática do modelo de Bose-Hubbard mostrando qualitativamente o que ocorre com cada parte descrita pelo hamiltoniano 2.28 que identificamos como ‘tunelamento’ $\Omega(J)$ e autocolisão $\kappa(U)$ quando há uma ocupação maior ou menor dos sítios da rede. O termo V de colisão cruzada não ocorre para tal modelo.

preensão de tais sistemas com uma quantidade de informações físicas tão ricamente interessantes e explicadas pelo modelo. Dentre esses, destacam-se Stöferle e colaboradores [49] e também de Hadzibabic e colaboradores [50], que são experimentos análogos aos desenvolvidos na referência [47], porém, respectivamente, para uma e duas dimensões e com uma notável importância corroborada pela quantidade de citações realizada pela comunidade científica internacional. Dentre outros trabalhos são notáveis ainda os experimentos e as descrições de M. Albiez e colaboradores [51], que comentaremos brevemente no Capítulo 4. Como complemento destas, também se mostram interessantes as leituras das referências [52–54].

Capítulo 3

A evolução do emaranhamento na transição de fase

Diversos ensaios sobre o conceito e a importância do emaranhamento são abordados por uma ampla bibliografia especializada. Portanto, não pretendemos desenvolver um profundo apanhado histórico tampouco realizar uma abordagem que se mostre repetitiva sobre o tema. Nossa intenção é apenas apresentar argumentos que justifiquem o cálculo de duas das suas modalidades do nosso interesse.

Uma breve pesquisa sobre a quantificação do emaranhamento revela um vasto número de propostas relacionadas à sua medida [55–58]. Portanto, para uma compreensão diferenciada e muito além do breve comentário que apresentamos na Seção 1.5 deste texto, indicamos como obras fundamentais os trabalhos de Nielsen e Chuang [59], da família Horodecki [60] e de Amico [61]. Para um eloquente e diferenciado tratamento em língua portuguesa são indispensáveis as leituras das obras do professor A. F. R. de Toledo Piza [62] e da tese de doutoramento de G. G. Rigolin [30].

Neste texto nos ocuparemos dos cálculos de duas modalidades de emaranhamento, a saber, a primeira denominada emaranhamento multipartido, que faremos através do cálculo da entropia linear reduzida a um sítio; e o emaranhamento bipartido, que realizaremos através do cálculo da negatividade. Para tanto, vamos primeiramente apresentar e comentar tais definições.

3.1 A entropia linear

A entropia linear reduzida a um sítio é uma medida de todos os tipos de emaranhamento presente num determinado sistema. A partir dela podemos inferir a existência de outras modalidades quanto às partições de um sistema. Sua definição é proveniente da entropia de von Neumann, matemático húngaro, que propôs como quantificação para um dado estado quântico ρ a função

$$S = -Tr(\rho \cdot \log \rho), \quad (3.1)$$

com a função logarítmica tomada na base 2.

De maneira operacional podemos linearizar tal expressão para um estado genérico normalizado $|\psi_{ij\dots n}\rangle$ definindo o operador densidade

$$\rho_{ij\dots n} = |\psi_{ij\dots n}\rangle \langle \psi_{ij\dots n}|, \quad (3.2)$$

com o intuito de efetuarmos a operação de traço parcial em todos os $N - 1$ sítios da rede. Neste caso, resta a grandeza ρ_i relativa ao sítio i e representada por

$$\rho_i = Tr_{j\dots n} \rho_{ij\dots n}. \quad (3.3)$$

Em particular, a operação de traço parcial é realizada com a finalidade de se determinar o emaranhamento de um sítio com todos os outros da rede, ou seja, esta é uma medida de todas as formas de emaranhamento presentes num sistema, o que justifica a denominação multipartido. Para um sistema bipartido, por exemplo, escrevemos simplesmente

$$\rho_A = Tr_B \rho_{AB}. \quad (3.4)$$

Verificaremos que em alguns casos aplicados aos modelos desenvolvidos no Capítulo 2 é indiferente calcularmos ρ_A ou ρ_B . Tal propriedade será encontrada para o problema $N = M = 2$ ou 3. Observaremos também o primeiro dos resultados diferentes que surgirá para $N = M = 4$ e pelo fato do sistema global ser puro. Assim, definimos a entropia linear reduzida a um sítio por

$$S = \frac{d}{d-1} (1 - Tr \rho_i^2), \quad (3.5)$$

na qual d representa a dimensão do espaço de Hilbert do sistema [59, 63].

3.2 A negatividade

Como discutimos nesta tese o conceito de negatividade como recurso para a medida de emaranhamento, é válida uma abordagem adicional como consolidação desta. Portanto, dizemos que para um dado estado genérico ρ que descreve um sistema bipartido definido num espaço de Hilbert $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ compartilhado por duas partes, aqui representados simplesmente por A e B, dizemos que ρ^{TA} representa a transposição parcial de ρ em relação ao subsistema A, que é um operador hermitiano cujos elementos de matriz são

$$\langle i_A, j_B | \rho^{TA} | k_A, l_B \rangle \equiv \langle k_A, j_B | \rho | i_A, l_B \rangle \quad (3.6)$$

para uma base de produtos fixa $|i_A, j_B\rangle \equiv |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B \subset \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ [57].

Definimos ainda a operação de traço-norma de qualquer operador hermitiano A como $\|A\| \equiv \text{tr} \sqrt{A^\dagger A}$, que é igual à soma dos valores absolutos dos autovalores de A . Como para uma matriz densidade todos os autovalores são positivos, observamos que $\|\rho\| = \text{tr} \rho = 1$. A transposição parcial ρ^{TA} também satisfaz a relação $\text{tr} [\rho^{TA}] = 1$, mas uma vez que esta nova matriz pode ter autovalores negativos $\mu_i < 0$ sua traço-norma escreve-se, em geral, como

$$\|\rho^{TA}\| = 1 + 2 \left| \sum_i \mu_i \right| \equiv 1 + 2\mathcal{N}(\rho). \quad (3.7)$$

Desta forma, a negatividade $\mathcal{N}(\rho)$ – a soma $|\sum_i \mu_i|$ dos autovalores negativos μ_i de ρ^{TA} – mede quão ρ^{TA} afasta-se de ser uma grandeza positiva definida [57]. Isto relaciona o conceito de negatividade com a quantidade traço-norma da transposição parcial ρ^{TA} através de

$$\mathcal{N}(\rho) \equiv \frac{\|\rho^{TA}\| - 1}{2}, \quad (3.8)$$

que corresponde ao valor absoluto da soma dos autovalores negativos de ρ^{TA} . Deve-se ainda citar que, para estados não emaranhados, o valor de $\mathcal{N}(\rho)$ dado pela equação (3.8) torna-se nulo. Isto é uma consequência da linearidade observada para tais estados, uma vez que neste contexto os estados não apresentam correlações quânticas. A análise quantitativa desenvolvida nesta tese para a negatividade é interpretada como uma medida do emaranhamento bipartido entre os modos de

uma rede óptica e, embora o desenvolvimento do cálculo da entropia linear reduzida a um sítio seja também uma medida de emaranhamento, estas não são equivalentes.

3.3 Uma abordagem perturbativa

A maneira mais simples de investigarmos a evolução do emaranhamento na transição entre as fases quânticas isolante de Mott e superfluida é através do desenvolvimento de um tratamento perturbativo. Assim, podemos determinar o estado do sistema puro assumindo como estado inicial o correspondente à fase isolante de Mott proveniente da equação (A-3).

Portanto, propomos uma teoria perturbativa de Rayleigh-Schrödinger na qual consideramos um sistema simples com o número de átomos (N) igual ao número de sítios (M). Nesses cálculos sempre consideramos o estado inicial como um isolante de Mott com fator de preenchimento dos sítios da rede iguais a $\nu = N/M = 1$, representado por $|\mathbf{1}\rangle = |111 \cdots 1\rangle$.

Assumimos como o operador não perturbado $\mathcal{H}_0 = \kappa \sum_i N_i (N_i - I)$ e tomamos o termo de tunelamento $\mathcal{W} = \lambda \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i)$ como a parte perturbativa. Nesta definimos $\lambda = \Omega/\kappa$ como o parâmetro perturbativo. E, como neste caso estamos lidando com o ensemble microcanônico, o potencial químico μ não é considerado. Isto é corroborado por considerarmos a conservação do número total de partículas.

Nossos cálculos contemplam as duas modalidades diferentes de emaranhamento apresentadas nas seções (3.1) e (3.2). Assim, comparamos os resultados obtidos para a entropia linear reduzida a um sítio com aqueles provenientes dos cálculos sobre a negatividade, que se constitui numa forma de quantificarmos emaranhamento bipartido.

Como conhecemos o comportamento da mudança de propriedades do estado fundamental de um determinado sistema em função do emaranhamento [63–67], mostramos dentro de uma análise quantitativa a transição para o 1D-BH. Estendemos então tal raciocínio para o modelo 1D-GCC e concluímos que, embora não seja possível determinarmos com eficácia o ponto da transição entre as fases, ainda assim a distinção entre elas é perfeitamente observada através do comportamento de ambas as modalidades de emaranhamento em função do parâmetro perturbativo λ .

A obtenção dos nossos resultados é toda analítica e pode perfeitamente ser comparada com os resultados numéricos encontrados por Buonsante e Zanardi [35, 36]. Além disso, obtemos para a configuração GCC uma relação combinatorial para a entropia linear reduzida a um sítio, com a qual investigamos alguns aspectos da transição na Seção 3.6.

3.4 Alguns resultados

Quando utilizamos a entropia linear reduzida a um sítio na sua situação mais simples e imediata para uma rede óptica ($N = M = 2$), que corresponde ao potencial de um poço duplo simétrico, estamos na verdade fazendo uma medida do emaranhamento multipartido desse sistema. De maneira análoga, a definição dada pela equação (3.8) é usada para se calcular o emaranhamento bipartido. Neste caso, escrevemos o hamiltoniano como

$$\mathcal{H}_2 = \kappa [N_1 (N_1 - 1) + N_2 (N_2 - 1)] - \Omega (\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2), \quad (3.9)$$

na qual tomamos $\mathcal{W} = -\Omega (a_1 a_2^\dagger + h.c.)$ como a perturbação para ambos os modelos, BHM e GCC.

Nessa primeira situação não há muitas observações a serem feitas em relação aos cálculos para a transposição parcial. Apenas calculamos ρ_{12} diretamente para em seguida aplicarmos a equação (3.8).

A correção em primeira ordem para o estado com $\lambda = \Omega/\kappa$ nos mostra que este se escreve como

$$|\Psi\rangle = \frac{|11\rangle + \sqrt{2}\lambda (|02\rangle + |20\rangle)}{\sqrt{1 + 4\lambda^2}}, \quad (3.10)$$

que é então utilizado para a determinação do operador densidade ρ_{12} através da equação (3.2), para o qual encontramos

$$\begin{aligned} \rho_{12} = & \frac{1}{1 + 4\lambda^2} [|11\rangle \langle 11| + |02\rangle \langle 02| + |20\rangle \langle 20| + |02\rangle \langle 20| + |20\rangle \langle 02|] + \\ & + \lambda\sqrt{2} (|11\rangle \langle 02| + |11\rangle \langle 20| + |20\rangle \langle 11| + |02\rangle \langle 11|). \end{aligned} \quad (3.11)$$

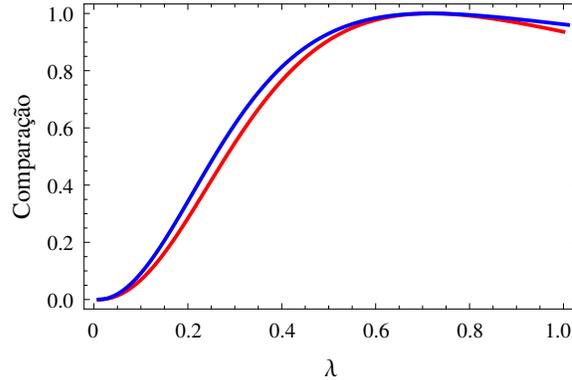


Figura 3.1: Gráfico mostrando a entropia linear reduzida a um sítio (curva azul) e a negatividade (curva vermelha) para $N = M = 2$.

A operação de traço parcial nos mostra que a entropia linear reduzida a um sítio calculada através da equação (3.5) fica explicitamente expressa por

$$S = \frac{3}{2} \left[1 - \frac{1 + 8\lambda^4}{(1 + 4\lambda^2)^2} \right]. \quad (3.12)$$

No comportamento desta, curva azul, observamos um aumento do emaranhamento em função do parâmetro perturbativo. Observamos ainda que, por se encontrar na fase isolante de Mott, para $\lambda = 0$ a equação (3.12) nos retorna o valor $S = 0$ para tal configuração.

Interpretamos o crescimento do emaranhamento como uma indicação de que quanto mais o estado se encontra na fase superfluida, maior é o emaranhamento entre os modos da rede. A mesma análise é realizada para a interpretação do emaranhamento bipartido (curva vermelha). Há um crescimento deste em relação à mudança entre as fases. Conforme mencionado no final da Seção (3.2), não há obrigatoriedade dessas medidas coincidirem. No entanto, ainda é possível compararmos as duas. Neste caso, como todo o emaranhamento presente no sistema é apenas entre os dois modos, podemos verificar a boa concordância deste com o multipartido (curva azul).

Outra situação possível se dá quando $N = M = 3$. Novamente neste caso não há distinção entre os modelos BHM e GCC, como podemos observar no termo de tunelamento no hamiltoniano

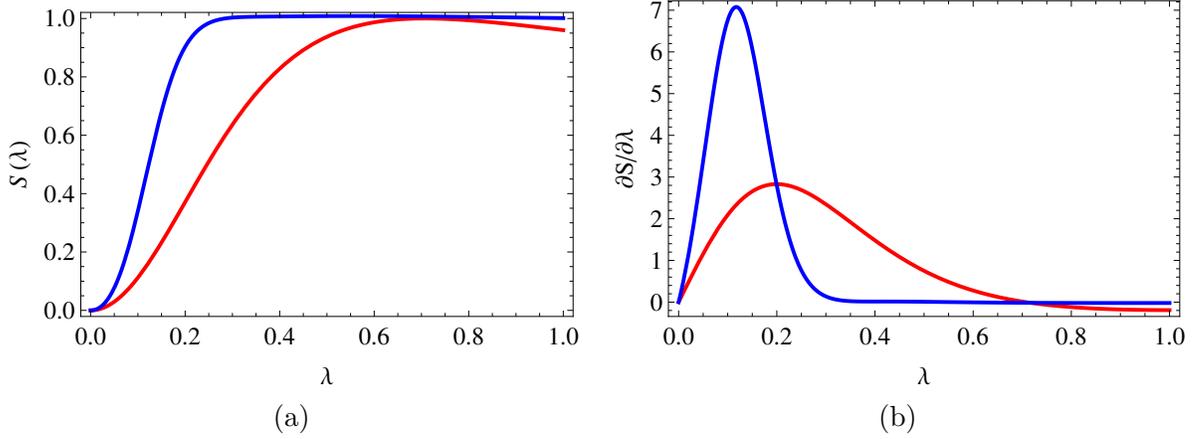


Figura 3.2: (a) Entropia linear reduzida a um sítio e (b) suas correspondentes derivadas como função do parâmetro λ para $N = M = 2$ (curva vermelha) e 3 (curva azul) para as configurações 1D-BH e GCC, respectivamente.

abaixo

$$\mathcal{H} = \kappa [N_1 (N_1 - I) + N_2 (N_2 - I) + N_3 (N_3 - I)] + \Omega \left(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 + h.c. \right). \quad (3.13)$$

Observamos que como todos os sítios são vizinhos entre si, basta realizarmos o cálculo pra ρ_{12} , pois ele é igual a ρ_{13} que, por sua vez também é igual a ρ_{23} e isto é consequência da condição periódica de contorno. Novamente observamos um crescimento dos dois tipos de emaranhamento em função do parâmetro perturbativo, de acordo com a linha vermelha da figura (3.2-a). Como nesta situação não há diferença entre as curvas, deixemos para mostrá-las explicitamente em outras configurações.

Seguindo o raciocínio, descrevemos a primeira situação em que os modelos BHM e GCC não mais coincidem. Isto ocorre para $N = M = 4$. Neste caso temos a mesma expressão não perturbada para o hamiltoniano. No entanto, as partes perturbativas ficam escritas como

$$\mathcal{W}_{BHM} = -\Omega \left(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_4 + h.c. \right) \quad (3.14)$$

para o BHM e

$$\mathcal{W}_{GCC} = -\Omega \left(\hat{a}_4^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + h.c. \right) \quad (3.15)$$

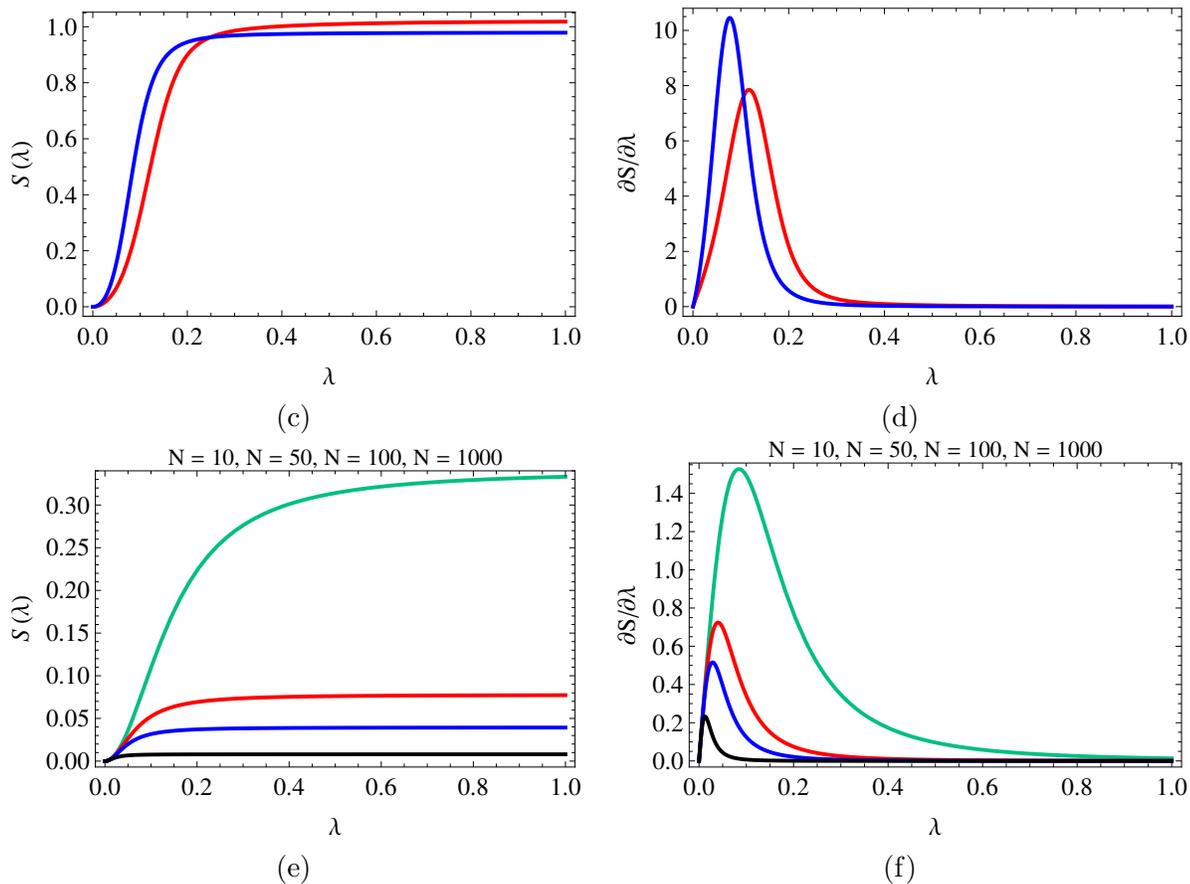


Figura 3.3: (c) Entropia linear reduzida a um sítio e (d) suas respectivas derivadas como função do parâmetro λ para as situações $N = M = 4$ nas configurações 1D-BH (linha vermelha) e GCC (linha azul). (e) Entropia linear reduzida a um sítio e (f) suas correspondentes derivadas como função do parâmetro λ para $N = M = 10$ (curva verde), 50 (curva vermelha), 100 (curva azul) and 1000 (curva preta) calculadas em primeira ordem para a configuração 1D-BH.

para o GCC.

Numa forma de esclarecer a diferença da evolução do sistema sob perturbação, apresentamos o estado não-normalizado para cada um dos modelos quando estes começam a apresentar evoluções distintas. Para o modelo BHM com $N = M = 4$, o estado é escrito como

$$\begin{aligned}
|\psi(\lambda)\rangle_{BHM} = & \alpha_1 |1111\rangle + \\
& +\alpha_2 (|2011\rangle + |1120\rangle + |1201\rangle + |0112\rangle + |2110\rangle + |1021\rangle + |1102\rangle + |0211\rangle) + \\
& +\alpha_3 (|2101\rangle + |1210\rangle + |1012\rangle + |0121\rangle) + \\
& +\alpha_4 (|2200\rangle + |0022\rangle + |0220\rangle + |2002\rangle) + \\
& +\alpha_5 (|2020\rangle + |0202\rangle) + \\
& +\alpha_6 (|3010\rangle + |1030\rangle + |0103\rangle + |0301\rangle) + \\
& +\alpha_7 (|3100\rangle + |1003\rangle + |0301\rangle + |0310\rangle + |1300\rangle + |3001\rangle + |0103\rangle + |0013\rangle) + \\
& +\alpha_8 (|0004\rangle + |0040\rangle + |0400\rangle + |4000\rangle), \tag{3.16}
\end{aligned}$$

na qual $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = (1 + 26\lambda^2)\sqrt{2}\lambda$, $\alpha_3 = \sqrt{2}\lambda^2(6 + \frac{364}{3}\lambda^2)$, $\alpha_4 = 4\lambda^2(1 + 26\lambda^2)$, $\alpha_5 = 2\lambda^2(1 + \frac{104}{3}\lambda^2)$, $\alpha_6 = \frac{2\sqrt{6}}{3}\lambda^2(1 + \frac{260}{3}\lambda^2)$, $\alpha_7 = \frac{26\sqrt{6}}{9}\lambda^3$ e $\alpha_8 = \frac{26\sqrt{3}}{27}\lambda^4$.

Já para o modelo GCC com $N = M = 4$, temos

$$\begin{aligned}
|\psi(\lambda)\rangle_{GCC} = & \beta_1 |1111\rangle + \tag{3.17} \\
& +\beta_2 (|2011\rangle + |1120\rangle + |1201\rangle + |0112\rangle + |2110\rangle + |1021\rangle) + \\
& +\beta_3 (|2200\rangle + |0022\rangle + |0220\rangle + |2002\rangle + |2020\rangle + |0202\rangle) + \\
& +\beta_4 (|3010\rangle + |1030\rangle + |0103\rangle + |0301\rangle + |3100\rangle + |1003\rangle + \\
& + |0031\rangle + |0310\rangle + |1300\rangle + |3001\rangle + |0103\rangle + |0013\rangle) + \\
& +\beta_5 (|0004\rangle + |0040\rangle + |0400\rangle + |4000\rangle), \tag{3.18}
\end{aligned}$$

na qual $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = \sqrt{2}\lambda + 6\sqrt{2}\lambda^2 + 4(10\sqrt{2} + 1)\lambda^3$, $\beta_3 = 4\lambda^2 + 6\left(4 + \frac{\sqrt{2}}{3}\right)\lambda^3$, $\beta_4 = \frac{2\sqrt{3}}{3}\lambda^2 + \frac{4}{3}\left(4\sqrt{6} + \frac{\sqrt{3}}{3}\right)\lambda^3$, $\beta_5 = \frac{8\sqrt{3}}{9}\lambda^2 + \frac{4\sqrt{3}}{27}\lambda^3$.

Facilmente notamos que no modelo BHM a evolução do estado em termos do parâmetro de perturbação é separável em duas classes de polinômios de potências pares e ímpares em λ . Já no modelo GCC observamos uma presença de todas as potências em λ , pois neste modelo o *hopping* acontece entre todos os sítios possíveis. Ainda nesta configuração temos uma observação muito interessante proveniente da relação da negatividade. Nesta, como uma função do parâmetro perturbativo para dois primeiros vizinhos, \mathcal{N}_{13}^2 torna-se menor que \mathcal{N}_{12}^2 , mas não muito menor, como acontece, por exemplo, em cadeias de *spin* [63,67]. Disto iniciamos uma discussão desse em relação à monogamia de emaranhamento.

De acordo com a observação da figura (3.5-b), a curva correspondente a $\rho_{12}(\lambda)$ (curva azul) apresenta um declive no mesmo intervalo que $\rho_{13}(\lambda)$ (curva cor-de-rosa) apresenta um aclave. Isto, como veremos, é interpretado como consequência da monogamia de emaranhamento, na qual há um vínculo entre as espécies deste que limita o crescimento arbitrário de um deles. Uma análise desses tópicos foi desenvolvida e publicada durante o período do doutoramento [68].

3.5 Uma relação de ρ para o modelo GCC

Como o sistema que estamos estudando é puro, podemos determinar o emaranhamento multipartido através do cálculo da entropia linear reduzida a um sítio utilizando a relação (3.5). Usando as equações (A-2) e (A-3) é possível derivarmos uma expressão analítica para o estado reduzido a um sítio e, portanto, para S na configuração GCC, considerando-se um estado global normalizado. Tal estado é dado pela distribuição dos N átomos nos M sítios, considerando-se o número de ocupação de cada sítio por um símbolo: $|\psi\rangle \equiv |\mathcal{D}\rangle = \sum_i \alpha_i |\mathbf{i}\rangle$, na qual \mathcal{D} é a forma combinatorial que distingue o número de distribuições de N partículas em $M = N$ sítios,

$$\mathcal{D} = \binom{2N-1}{N}. \quad (3.19)$$

Nesta última relação ainda escrevemos α_i como um número complexo que caracteriza a contribuição de cada estado combinatorial $|\mathbf{i}\rangle$ na descrição dos estados físicos $|\psi\rangle$. Tal coeficiente complexo está relacionado ao custo energético de uma dada ocupação. Por exemplo, o estado

de menor energia possível na fase isolante de Mott ocorre com a ocupação simples de cada sítio: $|\mathbf{1}\rangle = |111 \cdots 1\rangle$, cujo coeficiente é α_1 . Números de ocupação maiores são energeticamente mais custosos uma vez que as interações entre os átomos que estão no mesmo sítio tornam-se mais fortes a levam a um estado altamente instável. Portanto, o vínculo determinado por $|\alpha_i|^2 \geq |\alpha_{i+1}|^2$ deve ser respeitado.

Na verdade, podemos ainda interpretar os α_i 's relacionados às correlações de um sítio com o restante da rede. Uma vez que estamos lidando somente com as interações de dois corpos, α_i está portanto relacionado a estas e obviamente é uma função de λ . A continuidade desta função é o que determina a transição de fase quântica de isolante de Mott para superfluida. Aqui α_i é uma série de potência truncada do parâmetro de perturbação λ . Portanto, iniciando com o estado $|\mathbf{1}\rangle$, após uma relação combinatorial e a operação de traço parcial sobre $N - 1$ sítios, é possível, por indução, chegar à relação reduzida a um sítio para $\nu = 1$ e N arbitrário.

$$\rho_{N,1} = (N - 2)! \sum_{i=1}^{f(N)} \sum_{j=0}^N |\alpha_i|^2 A_{ij} |j\rangle \langle j|, \quad (3.20)$$

na qual $f(N)$ é a função partição inteira de N , isto é, o número de maneiras diferentes de escrevermos N e $A_{ij} = \left(\sum_{\ell=0}^N r_{\ell}^{ij} \right) / \left(\prod_{\ell=0}^N r_{\ell}^{ij}! \right)$ representa todas as possibilidades de arranjos distintos no qual o termo de população j surge para escrevermos uma ocupação de índice i . Portanto, r_{ℓ}^{ij} é o número de vezes que um número ℓ aparece na decomposição de j numa dada ocupação determinada por i . Exemplificamos a contagem de tais símbolos através do desenvolvimento do Apêndice B.

3.6 Um estudo da transição entre as fases isolante de Mott e superfluida

Dentre as investigações para as propostas de estudo do modelo de Bose-Hubbard que nos ocupamos nesta tese, surge ainda neste capítulo um questionamento sobre uma transição quântica de fase à temperatura efetivamente nula. Verificamos que é possível a sua sinalização, por exemplo, pela entropia linear de um determinado sistema [65]. E, para se responder a essa questão, deve-se

em primeiro lugar conhecer a ordem da transição envolvida. Isso deve ser feito analisando-se a evolução do estado fundamental relativo a um parâmetro não térmico, que neste caso naturalmente escolheremos como a razão $\lambda = \Omega/\kappa$.

Antes de entrarmos nas discussões adicionais sobre a entropia linear, façamos alguns outros comentários. Em primeiro lugar, notamos que o crescimento de N nos leva ao desenvolvimento da teoria perturbativa em termos de ordens mais altas para obtermos o estado correto para a descrição do sistema em consideração. Contudo, como os coeficientes α_i vão se tornando cada vez menores, uma teoria desenvolvida em primeira ou segunda ordem já se mostra interessante para a análise do emaranhamento multipartido (EM). Em segundo lugar, observamos a possibilidade de S sinalizar a transformação de fase quântica (TFQ). Para isso, analisamos a primeira derivada de S em relação ao parâmetro λ no limite termodinâmico, ou seja, com N e $f(N)$ tendendo ao infinito. Para um número infinito de ocupações, cada um dos coeficientes $|\alpha_i|$ tendem a zero e A_{ij} se mostra apenas como um valor constante. Portanto, escrevemos

$$\frac{\partial S}{\partial \lambda} = -2 \frac{d}{d-1} \sum_{i=1}^{\infty} |\alpha_i|^2 \sum_{j=0}^{\infty} A_{ij}^2 \frac{\partial |\alpha_i|^2}{\partial \lambda}. \quad (3.21)$$

Neste limite, cada i -ésimo termo no somatório tende a zero e as únicas excessões são as derivadas de α_i , que podem ser divergentes ou ainda apresentarem valores muito grandes. Para uma TFQ contínua $\partial|\alpha_i|^2/\partial\lambda$ é a origem de uma descontinuidades ou uma divergência, se a transição for de segunda ordem [63]. Para um TFQ de ordem infinita, tal como Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [69–74], embora as derivadas em α_i possam ser grandes, elas ainda são finitas. Este raciocínio é válido para derivadas de ordens maiores, que também são contínuas. Por outro lado, a energia correspondente ao estado perturbado do sistema $E(\lambda) = \sum_n \lambda^n \mathcal{E}^{(n)}$, na qual $\mathcal{E}^{(n)}$ é a energia de ordem n , é sempre contínua em λ , e, portanto, não sinaliza a TFQ.

Para λ pequeno o estado pode ser representado como um produto de estados locais. Neste caso não há emaranhamento. Contudo, à medida que λ cresce, observamos um crescimento da entropia linear, estabilizando após $\lambda \approx 0.3$ para $N = 3$, como observamos nas figuras (3.2) e (3.3). Isto significa que assim que o sistema adentra à fase superfluida, ele não mais pode ser escrito

como um estado separável, e, conseqüentemente, o emaranhamento cresce.

Os comportamentos distintos para ambas as configurações, BH e GCC, acontecem apenas para $N = M \geq 4$, de acordo com as figuras (3.3)c e d, devido às diferentes formas dos termos perturbativos presentes nos hamiltonianos de cada problema. Nas figuras (3.3)e e (3.3)f mostramos os resultados para o modelo BH calculado em primeira ordem de perturbação para diferentes números de bósons.

A entropia linear caracteriza muito bem as duas fases previstas para o modelo de Bose-Hubbard. Quando $\lambda = 0$ simplesmente não observamos emaranhamento, caracterizando a fase isolante de Mott. No outro limite, quando λ tende a 1, o estado tende a ser maximamente emaranhado. Este é um comportamento típico de um sistema na fase superfluida.

Observamos ainda que a evolução da entropia linear é muito similar à do parâmetro de ordem ΔN^2 . Portanto, ΔN^2 também se mostra como uma testemunha de emaranhamento multipartido. Embora não possamos afirmar o valor exato do ponto crítico da transição, dada a abordagem perturbativa, o comportamento do emaranhamento multipartido mostra corretamente a transição de fase, como podemos concluir da análise da equação (3.21). Na referência [36] resultados similares foram obtidos através de diagonalização exata, enquanto que nesta tese derivamos uma expressão analítica exata embasados na abordagem perturbativa.

Agora quantificamos o emaranhamento bipartido através negatividade [57], definida na Secção 3.2 como $\mathcal{N}(\rho) \equiv \frac{\|\rho^{TA}\|^{-1} - 1}{2}$, na qual $\|\rho^{TA}\|$ é denominada norma-traço do estado parcialmente transposto $\rho_{i,j}^{TA}$ de qualquer par de sítios $\{i, j\}$ para o modelo de Bose-Hubbard. Isto é equivalente ao valor absoluto da soma dos autovalores negativos de ρ^{TA} , anulando-se para estados separados. Embora estritamente necessário e suficiente apenas para espaços de Hilbert com dimensões até $2 \otimes 3$, no presente caso ele caracteriza corretamente o emaranhamento bipartido para qualquer N .

Na figura (3.5) mostramos a negatividade e a entropia linear para $N = 3$ e $N = 4$. Uma vez que para $N = 3$ há somente sítios vizinhos, a negatividade é a mesma para quaisquer dois sítios. Para $N = M = 4$ a negatividade mostra diferentes comportamentos para os vizinhos mais próximos, aqui exemplificados por ρ_{12} e ρ_{13} , respectivamente.

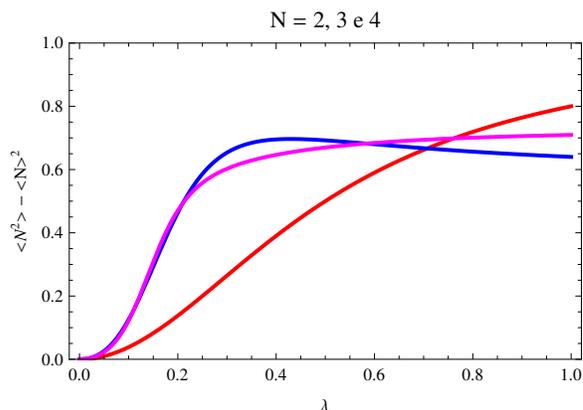
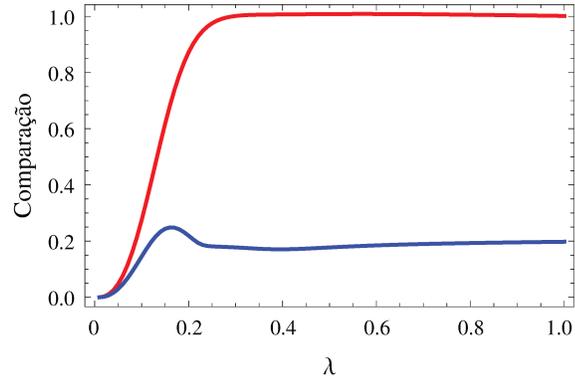


Figura 3.4: (a) Representação das flutuações para o BHM quando $N = M = 2$ (curva vermelha), $N = M = 3$ (curva azul), $N = M = 4$ (curva cor-de-rosa)

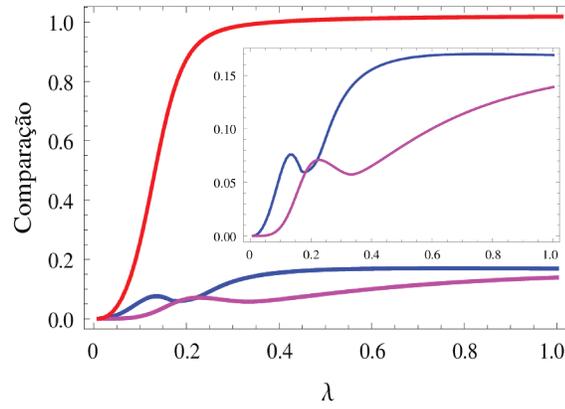
Contrariamente aos modelos de *spin-1/2*, como na referência [63], a negatividade entre os vizinhos mais próximos não pode ser desprezada. Ao contrário, elas mostram um comportamento peculiar assinalando a monogamia de emaranhamento.

Na situação mais simples, ($N = M = 2$), como o sistema é puro, a negatividade é igual à entropia linear reduzida a um sítio, pois o único emaranhamento existente é o bipartido, como pode ser observado na figura (3.1). Quando $N = M = 3$, a negatividade, após apresentar um crescimento na transição, estabiliza para valores inferiores aos da entropia linear reduzida a um sítio. Esta é uma sinalização de que existe emaranhamento genuíno bipartido neste sistema. Ainda, o emaranhamento multipartido desenvolve-se semelhantemente ao bipartido, pois as duas curvas evoluem similarmente para λ pequeno. Porém, tão logo o emaranhamento tripartido começa a se desenvolver, as duas curvas divergem. No caso em que $N = M = 4$, a negatividade para ρ_{12} e ρ_{13} mostra que há diferentes tipos de emaranhamento bipartido. \mathcal{N}_{12}^2 , após crescer com a entropia, descrece assim como \mathcal{N}_{13} cresce, como mostra o detalhe da figura (3.5b), mostrando uma limitação interessante na distribuição de emaranhamento bipartido. Após esse comportamento, ambas as medidas estabilizam em valores próximos. Essa limitação no emaranhamento bipartido é típica de monogamia de emaranhamento [56] no sentido de que o crescimento do emaranhamento

3.6. UM ESTUDO DA TRANSIÇÃO ENTRE AS FASES ISOLANTE DE MOTT E SUPERFLUIDA43



(a)



(b)

Figura 3.5: (a) \mathcal{N}_{12}^2 (curva azul) para $N = M = 3$ e a entropia linear reduzida a um sítio (curva vermelha) e (b) \mathcal{N}_{12}^2 (curva azul), \mathcal{N}_{13}^2 (curva cor-de-rosa) e a entropia linear reduzida a um sítio para $N = M = 4$.

representado por ρ_{12} no mesmo intervalo no qual ρ_{13} decresce e uma reciprocidade mantém uma quantidade de emaranhamento bipartido constante. Aqui a diferença entre o emaranhamento multipartido e os dois tipos de emaranhamento bipartido, denominado emaranhamento residual, sinaliza tanto o emaranhamento tripartido quanto do quadripartido. Esta propriedade continua para valores maiores de N , e há um número crescente de tipos de emaranhamentos bipartidos.

Essa é uma evidência da manifestação das muitas classes de emaranhamento presente no modelo de Bose-Hubbard. A fase superfluida é intermediada por um estado emaranhado multipartido no qual qualquer modo está emaranhado com outros quaisquer de diversas maneiras distintas.

Resumindo, neste Capítulo analisamos os emaranhamentos multi e bipartido para configurações unidimensionais das cadeias bosônicas BHM e GCC. Descrevemos o comportamento através da transição entre as fases isolante de Mott e superfluida prevista para esses modelos mostrando como elas ocorrem nas modalidades de emaranhamento. Esses cálculos podem ser justificados como uma alternativa à diagonalização das matrizes que descrevam tais sistemas com uma redução significativa dos recursos computacionais.

Capítulo 4

Um estudo da dinâmica de populações

4.1 Aspectos do potencial de poço duplo

Sabe-se que o modelo de Bose-Hubbard possui características interessantes que o colocam numa posição proeminente quanto a reais implementações em protocolos de computação quântica. Isto é evidenciado pela possibilidade do controle das populações dos diversos sítios de uma rede óptica, por exemplo, com a utilização de pulsos externos ao sistema. Pode-se ainda fazê-lo através da utilização de microarmadilhas magnéticas, que se constituem em aparatos largamente utilizados em experimentos de manipulação de condensados atômicos de Bose-Einstein em sistemas mesoscópicos [75–79]. No entanto, embora sejam contempladas diversas técnicas e aplicações em variados experimentos, ainda há uma fronteira a ser explorada no que concerne às potencialidades deste modelo em sua versão estendida.

Com esse intuito iniciamos o tratamento de um potencial de poço duplo e dependente do tempo para a versão estendida do modelo de Bose-Hubbard. Portanto, consideremos um termo externo periódico aos moldes do proposto por Holthäus [80,81] e lembremos que é na consideração do modelo estendido que reside a principal virtude do modelo que queremos implementar.¹

¹É oportuno enfatizar que trabalhos sobre este modelo são, dentre muitas outras abordagens, extensa e elegantemente realizados por M. C. de Oliveira e B. R. da Cunha [48]. Além destes encontra-se um minucioso tratamento semiclássico do mesmo problema nos trabalhos de T. Visconde, K. Furuya e M. C. de Oliveira [64].

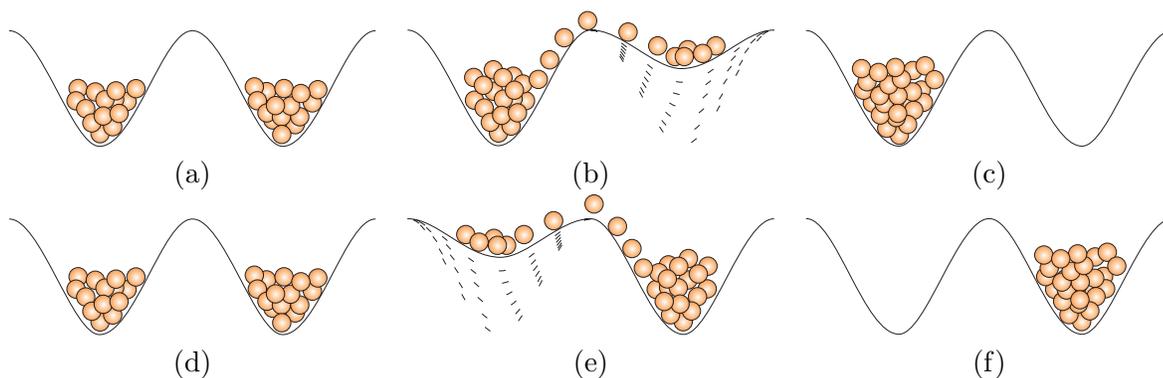


Figura 4.1: Transferência de população entre os poços do potencial em consequência da variação do termo externo. Nosso intuito é verificar a possibilidade de, numa abordagem deveras simplificada, observarmos o autoaprisionamento macroscópico das populações nos poços mantendo fixo o termo de autocolisão e variando apenas o termo externo. Observe que as figuras devem ser consideradas em dois grupos: o primeiro de 4a a 4c e o segundo de 4d a 4f, exemplificando a transferência de população da direita para o da esquerda e a maneira recíproca de se fazê-la.

Façamos a consideração de um condensado de Bose-Einstein composto por N átomos à temperatura nula e confinado por um potencial de poço duplo simétrico $V(r)$, conforme a figura (4.1). Assumimos ainda que esse potencial é modulado periodicamente no tempo por um sinal de frequência externa ω . O hamiltoniano para estas considerações, obtido no Capítulo 2, possui a forma da equação (2.24) diferindo apenas pela adição do termo externo

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \hbar[2\Lambda(N - I) + \Omega] (\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a}) + \hbar\eta (\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a})^2 + \\ & + \hbar(\kappa - \eta) [(\hat{a}^\dagger)^2 (\hat{a})^2 + (\hat{b}^\dagger)^2 (\hat{b})^2] + \hbar\eta N(N - 2) + \hbar\mu \text{sen}(\omega t) (\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{b}^\dagger \hat{b}). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Porém, por uma questão de praticidade e simplificação do tratamento da dinâmica desse sistema, faremos uma abordagem semiclássica através da equação de Gross-Pitaevskii para o operador de campo $\hat{\Psi}(r, t)$. Esta escolha se justifica por estarmos inicialmente interessados apenas na diferença entre as populações dos dois sítios e de um possível controle, ainda que qualitativo, desta. Uma abordagem em linha gerais da equação de Gross-Pitaevskii é realizada no Apêndice

C. Esta assume a forma

$$i\hbar^2 \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + \vec{F} \cdot \vec{r} \sin(\omega t) + Ng|\Psi(r, t)|^2 \right) \Psi(r, t), \quad (4.2)$$

na qual $g = 4\pi a_{sc} \hbar^2 / m$ representa uma medida da interação de colisão dos átomos do condensado, com a_{sc} e m referindo-se, respectivamente, ao comprimento de espalhamento de onda s e à massa da espécie atômica condensada. Assumimos que a função de onda $\Psi(r, t)$ seja normalizada e que o termo modulador \vec{F} esteja direcionado ao longo dos dois mínimos de potencial, tal que estes se movimentem de maneira a ocorrer transferência de população entre os dois, conforme figura (4.1a-f).

Portanto, sejam $u_1(r)$ e $u_2(r)$ as funções de onda de partícula única em cada um dos poços. Sabemos que as combinações lineares simétricas e antissimétricas destas são escritas na forma

$$u_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(r) + u_2(r)] \quad (4.3)$$

e

$$u_- = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(r) - u_2(r)] \quad (4.4)$$

e que estas são autofunções aproximadas do operador hamiltoniano de partícula única

$$H_0 u_{\pm}(r) = E_{\pm} u_{\pm}(r), \quad (4.5)$$

na qual $H_0 = (-\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)$ e $E_+ < E_-$.

Investigando a dinâmica das populações atômicas segundo esse modelo e valendo-se da derivação semiclássica justificada no início deste capítulo, na qual consideramos a dinâmica do condensado restrita ao potencial de poço duplo ora considerado, escrevemos a função $\Psi(r, t)$ na forma

$$\Psi(r, t) = e^{(-iE_0 t/\hbar)} [c_1(t)u_1(r) + c_2(t)u_2(r)], \quad (4.6)$$

com a definição

$$E_0 = \frac{1}{2} (E_+ + E_-). \quad (4.7)$$

Observe ainda que os coeficientes dependentes do tempo $c_1(t)$ e $c_2(t)$ constituem-se na descrição da população de cada um dos poços. Isso nos permite fazer um detalhamento mais apurado e que nos permite uma melhor assimilação da sua representação ao utilizamos a condição de normalização $|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$. Perceba o leitor que o produto do módulo ao quadrado desses mesmos coeficientes pelo número total N nos fornece as respectivas parcelas das populações nos poços.

Para uma descrição minuciosa do sistema considerado, introduzimos ainda a frequência de tunelamento

$$\Omega = \frac{E_- - E_+}{\hbar}, \quad (4.8)$$

a taxa de autocolisão

$$\kappa = \frac{g}{2\hbar} \int d^3r |u_1(r)|^4 \quad (4.9)$$

e as duas taxas de colisão cruzada²

$$\eta = \frac{g}{\hbar} \int d^3r |u_1(r)|^2 |u_2(r)|^2 \quad (4.10)$$

e

$$\Lambda = \frac{g}{\hbar} \int d^3r |u_1(r)|^3 |u_2(r)|^2. \quad (4.11)$$

Empregamos também os elementos de matriz correspondentes ao posicionamento do mínimo de cada poço

$$\int d^3r u_1^* \vec{r} u_1 = \vec{d} \quad (4.12)$$

e

$$\int d^3r u_2^* \vec{r} u_2 = -\vec{d}, \quad (4.13)$$

na qual a origem do sistema de coordenadas está localizado no centro da barreira e, por conseguinte, consideramos a distância entre os dois mínimos igual a $2d$. Além destas, a frequência de Rabi fica definida por

$$\gamma = \frac{Fd}{\hbar}. \quad (4.14)$$

²Estas são provenientes das superposições possíveis das funções de onda de partícula única tanto no mesmo poço, para o caso de κ , como para poços contíguos, como para η e Λ .

Com essas definições e considerações substituímos a equação (4.6) em (4.2) para encontrarmos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (c_1(t)u_1(r) + c_2(t)u_2(r)) = H_0 + \vec{F} \cdot \vec{r} \sin(\omega t) + Ng |c_1(t)u_1(r) + c_2(t)u_2(r)|^2 (c_1(t)u_1(r) + c_2(t)u_2(r)), \quad (4.15)$$

que, após algumas manipulações algébricas, nos fornece as equações diferenciais acopladas

$$i\dot{c}_1(t) = \left[\frac{E_0}{\hbar} + 2N(\eta - \Lambda) \right] c_1 - \left[\frac{\Omega}{2} - 2N(\Lambda - \eta) \right] c_2 + \gamma c_1 \sin(\omega t) + 2N(\kappa - \eta) |c_1|^2 c_1 + 2N(\eta c_2 + \Lambda c_1) |c_1 + c_2|^2, \quad (4.16)$$

e

$$i\dot{c}_2(t) = \left[\frac{E_0}{\hbar} + 2N(\eta - \Lambda) \right] c_2 - \left[\frac{\Omega}{2} - 2N(\Lambda - \eta) \right] c_1 + \gamma c_1 \sin(\omega t) + 2N(\kappa - \eta) |c_2|^2 c_2 + 2N(\eta c_1 + \Lambda c_2) |c_1 + c_2|^2. \quad (4.17)$$

Observe que a simplicidade destas equações podem nos render uma boa quantidade de informações, conduzindo, por exemplo, a métodos numéricos para a solução, o que realizaremos na seção seguinte.

4.2 Uma análise numérica para a dinâmica das populações.

As análises numéricas que comentaremos nesta seção embasam-se no que definimos por diferença das populações dos dois sítios. O *ansatz* escolhido na equação (4.2) permite-nos escrevê-la como

$$w(t) = |c_1(t)|^2 - |c_2(t)|^2, \quad (4.18)$$

e maneira que $c_1(t=0) = 1$ e $c_2(t=0) = 0$ como condição inicial nos mostra que inicialmente tomamos o condensado todo localizado no primeiro modo do potencial. Portanto, de conhecimento das equações diferenciais (4.16) e (4.17) para a evolução temporal das populações através de $c_1(t)$ e $c_2(t)$ apresentamos algumas simulações tomando $N = 100$, $\hbar = m = 1$, $\omega = 20\pi$ e $\Omega = 0.22\omega$. Representaremos a diferença de populações em função do parâmetro $\tau = \omega t$.

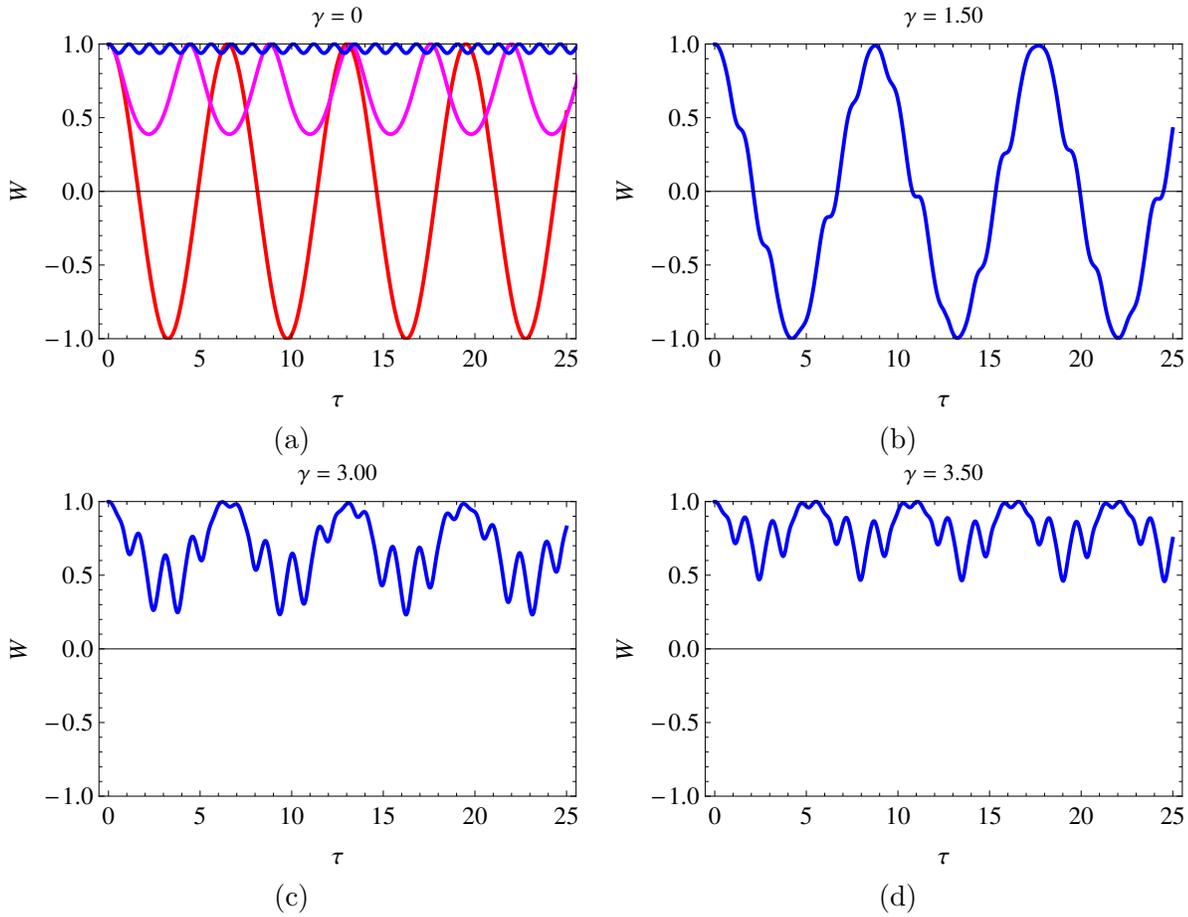


Figura 4.2: Série de simulações para diferentes valores de γ na qual observamos o autoaprisionamento macroscópico. Primeiramente assumimos $\gamma = Fd/\hbar = 0$ e tomamos diferentes valores de κ , o que nos mostra (a) um autoaprisionamento macroscópico da população atômica. Nestas utilizamos $\kappa_1 = 0,05$ (linha vermelha), $\kappa_2 = 0,10$ (linha rosa) e $\kappa_3 = 0,20$ (linha azul). Nas figuras (b), (c) e (d) observamos o mesmo fenômeno de autoaprisionamento macroscópico porém com $\kappa = 0,05$ constante e γ assumindo valores 1.50, 3.00 e 3.50, respectivamente.

Observamos que a diferença das populações dos poços é inicialmente apresentada para o valor fixo de $\gamma = 0$, como mostram as figuras (4.2a) com variações para o parâmetro de autocolisão $\kappa_1 = 0,05$ (linha vermelha), $\kappa_2 = 0,10$ (linha rosa) e $\kappa_3 = 0,20$ (linha azul). Dessa forma é possível verificar um autoaprisionamento das populações nos poços bem como uma variação na frequência de oscilação destes em função do parâmetro κ . A escolha de γ inicialmente nulo justifica-se por reproduzirmos os resultados outrora encontrados para este mesmo problema. Esses referidos foram obtidos por Milburn e colaboradores [82] para um conjunto semelhante de parâmetros, o que corrobora o modelo ora explorado nesta tese.

De fato, γ nulo está no âmago da transferência de população, como pode ser observado das equações diferenciais (4.16) e (4.17). Esse tipo de comportamento, conhecido na literatura como autoaprisionamento macroscópico, pode ser observado em diversos experimentos e, portanto, é considerado um resultado já consolidado pela comunidade científica internacional.

Façamos ainda uma simulação, como mostram as figuras (4.2b-d), na qual temos certeza que não ocorrerá autoaprisionamento devido ao termo de autocolisão. Vamos mantê-lo, portanto, com o primeiro valor da simulação anterior $\kappa_1 = 0,05$. Tomamos ainda, nessa primeira verificação, o parâmetro γ igual a 1,5. Observamos que nenhuma nova informação significativa é adicionada quanto a alterações na dinâmica das populações, embora possamos observar uma pequena perturbação na distribuição destas.

No entanto, ainda mantendo $\kappa_1 = 0,05$ e agora tomando $\gamma = 3,0$ observamos que tanto a frequência de oscilação das populações como também uma tendência ao autoaprisionamento começam a surgir. Isto é verificado na figura (4.2c). Essa tendência fica então confirmada ao fazermos $\gamma = 3,5$ com κ_1 ainda igual a 0,05, conforme a interpretação corrente na figura (4.2d). Ou seja, ocorre um autoaprisionamento macroscópico.

Essas observações respondem afirmativamente ao nosso questionamento inicial sobre a possibilidade de se manipular ou controlar as populações dos sítios ao menos numa abordagem simples e alternativa com a introdução do termo $\vec{F} \cdot \vec{r} \sin(\omega t)$ na equação (4.2), sem a necessidade da alteração de um parâmetro como a taxa de autocolisão. Perceba que a referência feita ao termo

‘controle’ ou ‘manipulação’ das populações se constitui, conforme expresso nas figuras com o resultado das simulações, o fenômeno de autoaprisionamento macroscópico, anteriormente modelado e verificado experimentalmente na ampla literatura existente sobre o tema. Portanto, embora não seja algo totalmente inédito tanto do ponto de vista experimental como teórico, ainda sim é justo observar que nossa formulação é digna de uma originalidade introduzida pelos termos de colisão cruzada e também da relevância da introduzida pelo termo externo. Portanto, nossa formulação evidencia ainda a possibilidade do controle das populações dos poços pela utilização dos termos externos, mostrando quão promissora pode ser tal manipulação.

Cabe ainda um registro da pequena vantagem desta abordagem sobre a realizada pelo notável trabalho de Holthäus [80, 81]. Observe que as equações (4.16) e (4.17) consideram os termos η e Λ , que trazem na sua essência uma riqueza para a dinâmica das populações. Um estudo mais abrangente e detalhado sobre tais fenômenos estão sendo elaborados pelo autor deste texto e pelo seu orientador para uma publicação em breve.

4.3 Análise através dos operadores de momentum angular.

Uma derivação análoga pode ser obtida ao considerarmos uma evolução semiclássica para os operadores de momentum angular J_x , J_y e J_z definidos por

$$J_x = \frac{1}{2}(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1), \quad (4.19)$$

$$J_y = \frac{i}{2}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \quad (4.20)$$

e

$$J_z = \frac{1}{2}(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2) \quad (4.21)$$

e que satisfazem à álgebra de operadores $SU(2)$, para a qual

$$[J_k, J_\ell] = i\hbar \epsilon_{k\ell m} J_m. \quad (4.22)$$

Estes podem ainda ser reescritos como

$$J_x = \frac{1}{2}(|a_2|^2 - |a_1|^2), \quad (4.23)$$

$$J_y = \frac{i}{2}(a_1^*a_2 - a_2^*a_1) \quad (4.24)$$

e

$$J_z = \frac{1}{2}(a_1^*a_2 + a_2^*a_1). \quad (4.25)$$

Há uma interpretação física dos operadores representados pelas equações (4.23), (4.24) e (4.25) utilizadas para representarmos a evolução temporal destes que nos ajudarão a analisar os resultados que obteremos. Neste caso J_x representa metade da diferença de população entre os condensados localizados nos dois poços. Com isso, podemos intuir a distribuição espacial do condensado. Observamos ainda que J_y relaciona-se ao momentum médio do condensado, enquanto que J_z nos mostra o tunelamento que ocorre entre os dois poços.

Utilizando estas relações no operador hamiltoniano (2.24) através da evolução para os operadores dada pela equação de movimento de Heisenberg

$$\dot{J}_k = \frac{1}{i\hbar}[J_k, \mathcal{H}], \quad (4.26)$$

encontramos as seguintes equações de movimento

$$\dot{J}_x = -2[2\Lambda(N - I) + \frac{\Omega}{2}]J_x - 4\eta\{J_y, J_z\}, \quad (4.27)$$

$$\dot{J}_y = -2\gamma\text{Sen}(\omega t)J_z + 2[2\Lambda(N - I) + \frac{\Omega}{2}]J_x + 2(3\eta - \kappa)\{J_z, J_x\} \quad (4.28)$$

e

$$\dot{J}_z = 2\gamma\text{Sen}(\omega t)J_y + 2(\kappa - \eta)\{J_y, J_x\}. \quad (4.29)$$

Como exemplo da evolução semiclássica desses operadores, façamos as simulações com os parâmetros $\kappa = 0,05$ (linha vermelha), $0,10$ (linha rosa) e $0,20$ (linha azul), η e Λ todos considerados para $\Omega = 0.1$ e $N = 100$. Os resultados são apresentados na figura (4.3).

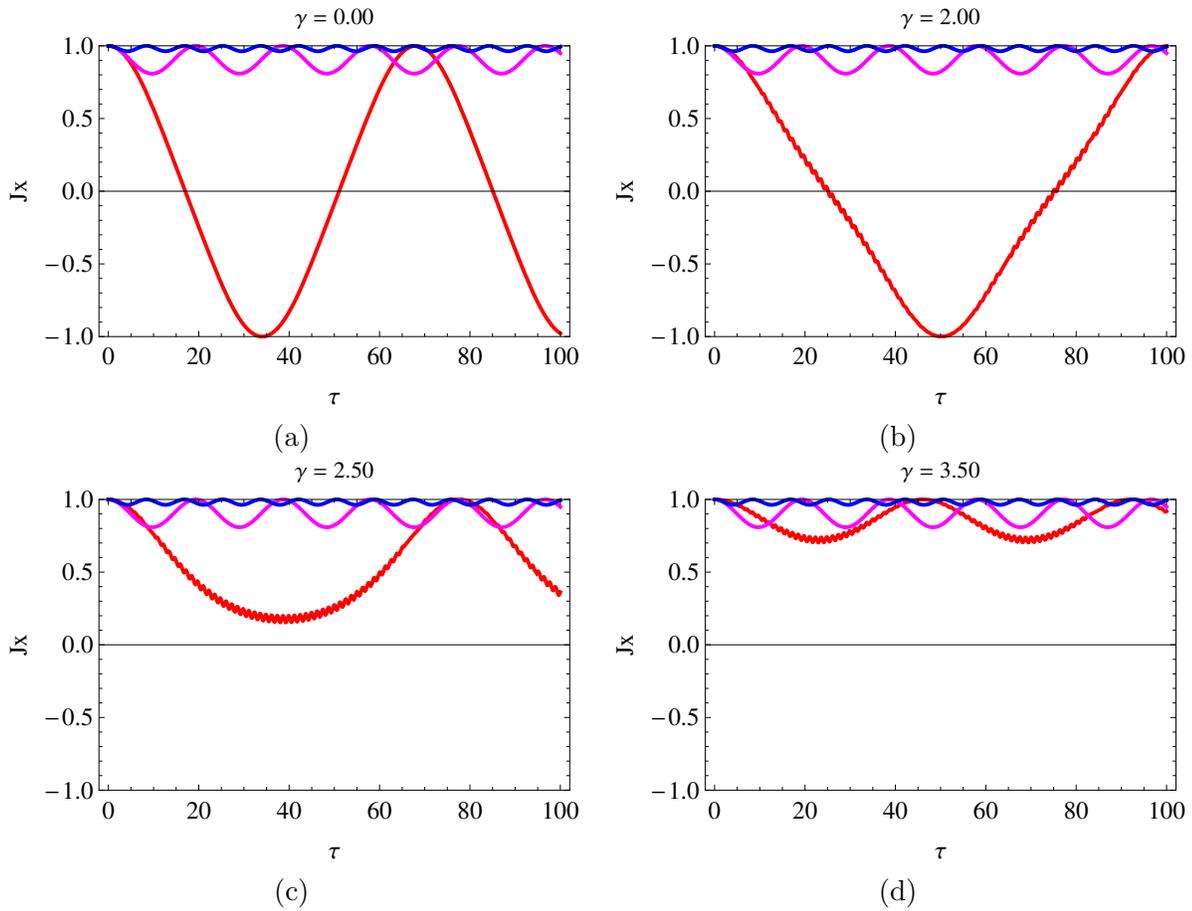


Figura 4.3: Novamente observamos o autoaprisionamento da população atômica aos moldes do constatado na figura (4.2) também como consequência de diferentes valores assumidos para do parâmetro γ .

Esse estudo demonstra uma grande elegância através do enriquecimento da dinâmica do sistema ao considerarmos os termos de colisões cruzadas. Isso nos ajuda a intuir o estudo da dinâmica, também utilizando-se simulações numéricas, de um poço quádruplo para o qual pretendemos desenvolver um protocolo de computação quântica, passo este desenvolvido no próximo capítulo, onde utilizamos uma descrição na qual as taxas de autocolisão e colisões cruzadas são mantidas enquanto que a taxa de tunelamento entre os sítios é suprimida. Esta formulação nos levará à obtenção de um hamiltoniano efetivo em função de tais taxas colisionais que não apenas se mostra factível para o desenvolvimento experimental como também apresenta uma eficácia para a geração de computação quântica, conforme verificaremos.

Capítulo 5

A viabilidade de uma codificação para computação quântica.

5.1 O modelo.

Nosso intento neste capítulo é formular uma codificação de computação quântica a partir de um poço quádruplo que seja fielmente descrito pelo modelo estendido de Bose-Hubbard embasado nos mesmos princípios do capítulo anterior. Assim sendo, consideraremos a interação de colisão cruzada além dos termos de *hopping* e de autocolisão, de acordo com a abordagem realizada no segundo capítulo deste texto, que culminou no hamiltoniano (2.24).

Com tal objetivo, adiantamos que a representação dos estados lógicos pode ser realizada de maneira simplificada através do preenchimento dos sítios do poço de acordo com a figura (5.1). Isto evidencia que essa representação é de uma aparente facilidade para a obtenção experimental, pois estamos propondo a elaboração de um sistema cujo objetivo é a simples medição da população dos sítios sem a preocupação da contagem efetiva dos átomos do condensado em cada um deles; e, muito menos, a da exigência do conhecimento do estado interno dos átomos que compõem tais condensados. [79, 83–85].

Esta é uma proposta bastante diferente das encontradas na literatura, que em sua grande maioria aborda um esquema de representação dos estados lógicos embasado no conhecimento dos estados internos dos átomos, além de um preenchimento unitário dos sítios da rede.

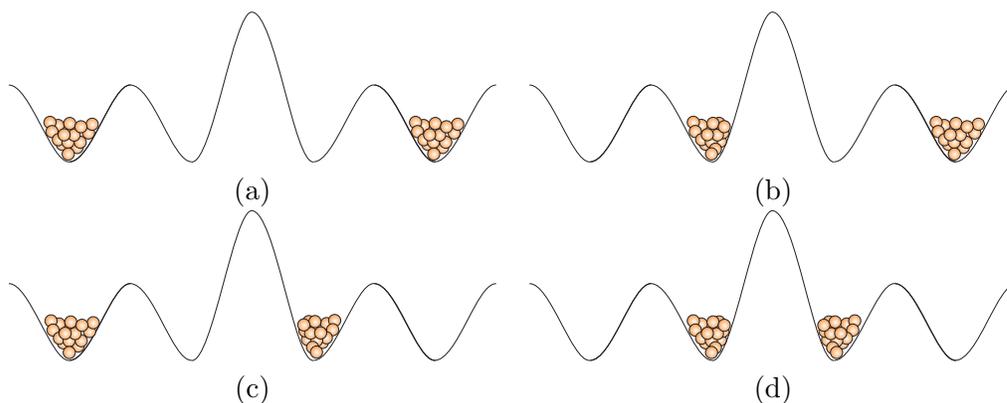


Figura 5.1: Diagrama para apoio na interpretação. Utilizaremos, respectivamente, como $|0\rangle|0\rangle$, $|1\rangle|0\rangle$, $|0\rangle|1\rangle$, $|1\rangle|1\rangle$ correspondente às figuras de (a) a (d).

À primeira vista percebemos que uma contagem efetiva da quantidade de átomos num sítio é deveras complicada, assim como o preenchimento unitário destes carece de um controle diferenciado e de difícil obtenção experimental. Isto ocasiona um grande problema não apenas para a escalabilidade como também para o controle do sistema [86].

O custo da elaboração da nossa proposta é a necessidade da criação de um mecanismo que suprima os termos de *hopping* sem no entanto alterar os termos de colisão cruzada entre os modos de acoplamento representados pelos sítios adjacentes. Essa suposição nos garante que as populações podem ser transferidas entre os poços sem a necessidade do termo de *hopping*. E, embora pareça um desafio tanto matemático como experimental que exige uma sofisticação deveras elaborada, o desenvolvimento do modelo nos mostra que não somente ela é indispensável para o nosso intento como também se mostra extremamente viável para a realização da codificação que pretendemos implementar.

Iniciamos ao considerarmos um sistema no qual a barreira de potencial entre os dois sítios e que é responsável pelo acoplamento deste oscile a uma frequência suficientemente alta. Propomos que essa barreira seja preparada para inicialmente coibir qualquer interação entre os átomos dos sítios adjacentes 2 e 3, tendo, portanto, uma amplitude suficientemente intensa. Isto faz com

que os dois poços duplos sejam completamente independentes e corrobora nossa proposta para o esquema de representação dos estados lógicos mencionados na figura (5.1a-d), na qual observamos quão salutar se faz essa condição.

5.2 A obtenção de um operador hamiltoniano efetivo

Em busca do nosso intento, consideremos então cada um dos termos do operador hamiltoniano já desenvolvido no Capítulo 2 e apresentado na forma da equação (2.24). Isso nos mostrará alguns dos detalhes da transformação que culminará com um novo operador hamiltoniano que fielmente descreverá as interações e propriedades que precisamos. Portanto, desenvolveremos uma derivação evoluindo temporalmente o estado do sistema escrevendo a equação de Schrödinger [87, 88]

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle. \quad (5.1)$$

Nesta, continuaremos a tratar o termo externo na forma

$$f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2), \quad (5.2)$$

o que é análogo ao operador J_x , dado pela equação (4.23). Semiclassicamente interpretamos J_x como a diferença de população atômica entre os dois poços; sendo ainda este o mesmo termo adicionado à equação (2.24) a menos de um fator multiplicativo, que nos fornece o operador (4.1).

O desenvolvimento do hamiltoniano efetivo torna-se viável e também claro ao utilizarmos a introdução da identidade

$$\mathcal{I} = e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)} \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)} \quad (5.3)$$

na equação (5.1), além de multiplicá-la pelo fator $e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)]}$ à esquerda, nos permite escrevê-la como

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)]}\mathcal{H}\mathcal{I}|\psi\rangle = -i\hbar e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)]}\frac{\partial}{\partial t}(\mathcal{I}|\psi\rangle), \quad (5.4)$$

e, explicitamente, através de

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)]}\mathcal{H}e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)]}|\tilde{\psi}\rangle = -i\hbar e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)]}\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)]}|\tilde{\psi}\rangle\right), \quad (5.5)$$

na qual, a partir desta, redefinimos o estado do sistema por

$$|\tilde{\psi}\rangle = e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} |\psi\rangle. \quad (5.6)$$

Portanto, observe que podemos reescrever a equação (5.5) na forma

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} \mathcal{H} e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} |\tilde{\psi}\rangle = -i\hbar e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} \frac{\partial}{\partial t} e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} |\tilde{\psi}\rangle, \quad (5.7)$$

o que resulta ainda em

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} \mathcal{H} e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} |\tilde{\psi}\rangle = \dot{f}(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) |\tilde{\psi}\rangle - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}\rangle. \quad (5.8)$$

Aqui ainda cabe a utilização de um importante resultado advindo dos cursos básicos de mecânica quântica. Sabemos que se G é um operador hermitiano e λ é um parâmetro real, podemos escrever a série

$$e^{iG\lambda} A e^{-iG\lambda} = A + i\lambda[G, A] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [G, [G, A]] + \dots + \frac{(i\lambda)^n}{n!} [G, [G, [G, \dots]]], \quad (5.9)$$

conhecida como lema de Baker-Hausdorff [87, 88]. Tal facilidade proveniente desse lema importante nos faz conduzir a partir deste momento a derivação do hamiltoniano efetivo considerando separadamente as parcelas de \mathcal{H} dadas pelo operador (2.24).

Portanto, a primeira parte do hamiltoniano, que corresponde ao termo de *hopping*, pode ser escrita como

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]}, \quad (5.10)$$

cujo desenvolvimento é escrito explicitamente na forma¹

$$\begin{aligned} & e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} (\hat{a}_1^\dagger) e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \cdot e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} (\hat{a}_2) e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} + \\ & e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2^\dagger e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} (\hat{a}_1) e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

¹Na verdade, a relação para dois operadores $\text{Exp}[A+B] = \text{Exp}[A]\text{Exp}[B]$ só é possível quando A e B comutam, como neste caso.

Utilizando a relação (5.9), podemos ainda escrever a série seguinte para cada uma das parcelas acima. Começemos pelo primeiro dos termos. Ou seja, escrevemos

$$\begin{aligned} e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}(\hat{a}_1^\dagger) e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} &= \hat{a}_1^\dagger + (i)(-f(t))[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] + \\ &+ \frac{((i)(-f(t)))^2}{2!} [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger]] + \\ &+ \frac{((i)(-f(t)))^3}{3!} [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger]]] + \dots, \end{aligned} \quad (5.12)$$

o que nos fornece

$$e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}(\hat{a}_1^\dagger) e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} = \hat{a}_1^\dagger - (i)(f(t))(\hat{a}_1^\dagger) - \frac{(f(t))^2}{2!}(\hat{a}_1^\dagger) + \frac{(i)(f(t))^3}{3!}(\hat{a}_1^\dagger) + \dots, \quad (5.13)$$

que, após uma breve simplificação, fica expresso na forma

$$e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}(\hat{a}_1^\dagger) e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} = \hat{a}_1^\dagger \left[\left(1 - \frac{(f(t))^2}{2!} + \dots \right) - i \left(f(t) - \frac{(f(t))^3}{3!} + \dots \right) \right] \quad (5.14)$$

Como a expansão acima nos traz a relação de Euler, observamos que, finalmente, podemos escrever para a relação (5.12) a forma simplificada

$$e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}(\hat{a}_1^\dagger) e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} = \hat{a}_1^\dagger e^{-i \cdot f(t)}, \quad (5.15)$$

que será utilizada para a obtenção do hamiltoniano efetivo quando neste surgir o operador \hat{a}_1^\dagger .

Vejamos ainda como se transforma o operador \hat{a}_2 utilizando o mesmo procedimento já desenvolvido e que culminou com a transformação (5.15). Ou seja, primeiramente escrevemos

$$\begin{aligned} e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)}(\hat{a}_2) e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} &= \hat{a}_2 + \frac{((i)(f(t)))^2}{2!} [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2]] + \\ &+ \frac{((i)(-f(t)))^2}{2!} [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger]] + \\ &+ \frac{((i)(f(t)))^3}{3!} [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2]]] + \dots, \end{aligned} \quad (5.16)$$

também com o auxílio da relação (5.9).

Analogamente desenvolvemos cada um dos termos para encontrarmos

$$e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)}(\hat{a}_2) e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} = \hat{a}_2 + (i)(f(t))(\hat{a}_2) + \frac{(f(t))^2}{2!}(\hat{a}_2) + \frac{(i)(f(t))^3}{3!}(\hat{a}_2) + \dots, \quad (5.17)$$

na qual, após outra breve simplificação, encontramos novamente a relação de Euler. Portanto, escrevemos

$$e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)}(\hat{a}_2)e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} = \hat{a}_2 \left[\left(1 - \frac{(f(t))^2}{2!} + \dots \right) - i \left(f(t) - \frac{(f(t))^3}{3!} + \dots \right) \right] \quad (5.18)$$

e, finalmente, obtemos uma relação análoga à (5.15)

$$e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)}(\hat{a}_2)e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} = \hat{a}_2 e^{-if(t)}, \quad (5.19)$$

que reconhecemos como a forma que devemos utilizar para a obtenção do hamiltoniano efetivo quando neste surgir o operador \hat{a}_2 . Além disso, observamos que em ambos os desenvolvimentos utilizamos as identidades $[N, \hat{a}_i] = -\hat{a}_i$ e $[N, \hat{a}_i^\dagger] = \hat{a}_i^\dagger$.

Da mesma maneira tratamos o desenvolvimento para os operadores \hat{a}_2^\dagger e \hat{a}_1 através das formas

$$\begin{aligned} e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)}(\hat{a}_2^\dagger)e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} &= \hat{a}_2^\dagger + (i)(f(t))[\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger] + \\ &+ \frac{((i)(f(t)))^2}{2!}[\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger]] + \\ &+ \frac{((i)(f(t)))^3}{3!}[\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, [\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger]]] + \dots \end{aligned} \quad (5.20)$$

e, finalmente,

$$\begin{aligned} e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}(\hat{a}_1)e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} &= \hat{a}_1 + (i)(-f(t))[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1] + \\ &+ \frac{((i)(-f(t)))^2}{2!}[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1]] + \\ &+ \frac{((i)(-f(t)))^3}{3!}[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \hat{a}_1]]] + \dots \end{aligned} \quad (5.21)$$

que nos fornecem, respectivamente, as relações

$$e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)}(\hat{a}_2^\dagger)e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} = \hat{a}_2^\dagger e^{+if(t)}, \quad (5.22)$$

e

$$e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}(\hat{a}_1)e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} = \hat{a}_1 e^{+if(t)}, \quad (5.23)$$

após um desenvolvimento análogo e fiel aos que resultaram nas relações (5.15) e (5.19).

Assim, escrevemos o termo de *hopping* entre os dois modos locais através de uma oscilação coerente. Isso nos permite escrever tal termo simplesmente como

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1)e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 e^{-2if(t)} + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 e^{+2if(t)}, \quad (5.24)$$

que é desprezado por possuir uma rápida oscilação observada na forma $e^{\pm 2if(t)}$.

A segunda parcela do hamiltoniano (2.24) é dada por

$$\hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right)^2 = \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 \right), \quad (5.25)$$

à qual aplicamos a mesma transformação

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 \right) e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]}, \quad (5.26)$$

que se reescreve, após a aplicação da identidade (5.3), na forma

$$e^{-i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]} \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \mathcal{I} \hat{a}_2 + \hat{a}_1^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_1 \hat{a}_2 \mathcal{I} \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_2 \hat{a}_1 \mathcal{I} \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \mathcal{I} \hat{a}_1 \right) e^{i[f(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)]}, \quad (5.27)$$

explicitamente dada por

$$\begin{aligned} \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right)^2 &= \hbar\eta (e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1^\dagger e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1^\dagger e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \cdot \\ &\quad \cdot e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2 e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \cdot e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2 e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} + \\ &\quad + e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1^\dagger e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1 e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \cdot \\ &\quad \cdot e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2 e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \cdot e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2^\dagger e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} + \\ &\quad + e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2^\dagger e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \cdot e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2 e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \cdot \\ &\quad \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1 e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1^\dagger e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} + \\ &\quad + e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2^\dagger e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \cdot e^{if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \hat{a}_2^\dagger e^{-if(t)(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2)} \cdot \\ &\quad \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1 e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \cdot e^{-if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)} \hat{a}_1 e^{if(t)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1)}). \end{aligned} \quad (5.28)$$

Novamente reagrupamos os termos após um breve processo algébrico aos mesmos moldes do

desenvolvido para a obtenção da relação 5.24, o que resulta em

$$\begin{aligned}
 \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right)^2 &= \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger e^{-if(t)} \hat{a}_1^\dagger e^{-if(t)} \hat{a}_2^\dagger e^{-if(t)} \hat{a}_2^\dagger e^{-if(t)} + \right. \\
 &+ \hat{a}_1^\dagger e^{-if(t)} \hat{a}_1 e^{if(t)} \hat{a}_2 e^{-if(t)} \hat{a}_2^\dagger e^{if(t)} + \\
 &+ \hat{a}_2^\dagger e^{if(t)} \hat{a}_2 e^{-if(t)} \hat{a}_1 e^{if(t)} \hat{a}_1^\dagger e^{-if(t)} + \\
 &\left. + \hat{a}_2^\dagger e^{if(t)} \hat{a}_2^\dagger e^{if(t)} \hat{a}_1 e^{if(t)} \hat{a}_1 e^{if(t)} \right), \tag{5.29}
 \end{aligned}$$

que reescrevemos compactamente como

$$\begin{aligned}
 \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right)^2 &= \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 e^{-4if(t)} + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \right. \\
 &\left. + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 e^{4if(t)} \right), \tag{5.30}
 \end{aligned}$$

e, finalmente, na forma

$$\hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right)^2 = \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger \right), \tag{5.31}$$

na qual observamos que o primeiro e o último termos da relação também são de rápida oscilação e, por esse motivo, desprezados.

Façamos agora o mesmo desenvolvimento para a terceira parcela, que escremos como

$$\hbar(\kappa - \eta) \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 \right), \tag{5.32}$$

na qual também introduzimos a identidade (5.3) para escrevermos

$$\hbar(\kappa - \eta) \hat{a}_1^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_1^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_1 \mathcal{I} \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_2^\dagger \mathcal{I} \hat{a}_2 \mathcal{I} \hat{a}_2 \tag{5.33}$$

e explicitamos na forma

$$\begin{aligned}
 \hbar(\kappa - \eta) \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 \right) &= \hbar(\kappa - \eta) \left(e^{-if(t)} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger e^{if(t)} \hat{a}_1 \hat{a}_1 \cdot e^{-if(t)} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger e^{if(t)} \hat{a}_1 \hat{a}_1 \cdot \right. \\
 &\cdot e^{-if(t)} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 e^{if(t)} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 \cdot e^{-if(t)} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 e^{if(t)} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \\
 &+ e^{if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 e^{-if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 \cdot e^{if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 e^{-if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 \cdot \\
 &\left. \cdot e^{if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 e^{-if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 \cdot e^{if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 e^{-if(t)} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 \right) \tag{5.34}
 \end{aligned}$$

para, após uma reorganização dos termos, expressarmos por

$$\hbar(\kappa - \eta)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2) = \hbar(\kappa - \eta)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2), \quad (5.35)$$

que se mostra invariante após a transformação. Assim, observamos que este último termo juntamente com o proveniente da (5.31) são os que se mostram plausíveis para a nossa consideração, culminando com a forma

$$\mathcal{H}_{eff} = \hbar\eta \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger \right) + \hbar(\kappa - \eta) \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 \right). \quad (5.36)$$

Porém, façamos ainda algumas considerações que podem ser simplificar o operador ora obtido em (5.36). Observando que

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \right] = I, \quad (5.37)$$

o que nos fornece imediatamente a relação

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger = I + \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad (5.38)$$

podemos ainda escrever a primeira parcela de (5.36) como

$$\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \left(I + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \right) + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \left(I + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \right), \quad (5.39)$$

que uma vez substituída na própria equação (5.36) nos fornece, após uma breve manipulação algébrica, a forma

$$\mathcal{H}_{eff} = \hbar(\kappa N + 2\eta N_1 N_2). \quad (5.40)$$

Observe o leitor que podemos estender o operador (5.40) para a configuração representada pela figura (5.1). Dessa maneira, escrevemos

$$\mathcal{H}_{eff} = \hbar \left\{ \kappa N + 2 \left[\eta (N_1 N_2 + N_3 N_4) + \eta' (N_2 N_3) \right] \right\}, \quad (5.41)$$

na qual encontramos a diferença entre os termos η e η' por naturalmente tratarmos de referências a diferentes intensidades da barreira de potencial, de acordo com a representação esquemática da figura (5.1). Façamos, a partir de agora, algumas considerações sobre o sistema físico descrito pelo hamiltoniano ora obtido.

5.3 O desenvolvimento de uma codificação de *bits* quânticos.

Um questionamento que surge naturalmente refere-se à possibilidade de verdadeiramente desenvolvermos computação quântica embasada nas transformações obtidas na secção anterior. Para isto é necessário que venhamos a definir nossa base computacional em termos de *bits* quânticos (*q-bits*). Ou seja, que sejamos capazes de definir uma base que não apenas represente os resultados mostrados na figura (5.1) como também gere estados de superposição para os dois poços duplos.

Uma tentativa nesse sentido pode ser tomada ao considerarmos dois estados genéricos representados por

$$|\psi_1\rangle = \alpha_1 |0\rangle + \alpha_2 |1\rangle \quad (5.42)$$

e

$$|\psi_2\rangle = \alpha_3 |0\rangle + \alpha_4 |1\rangle, \quad (5.43)$$

para os quais determinamos a condição de normalização $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$ para os dois primeiros poços à esquerda e $|\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2 = 1$ para os outros dois à direita.

É imediato observar que os resultados da tabela (5.1) são previstos por estes estados quando simplesmente observamos que para o estado definido por

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = (\alpha_1 |0\rangle + \alpha_2 |1\rangle)(\alpha_3 |0\rangle + \alpha_4 |1\rangle) \quad (5.44)$$

ou ainda, explicitamente, na forma

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = \alpha_1 \alpha_3 |0\rangle |0\rangle + \alpha_1 \alpha_4 |0\rangle |1\rangle + \alpha_2 \alpha_3 |1\rangle |0\rangle + \alpha_2 \alpha_4 |1\rangle |1\rangle \quad (5.45)$$

tenhamos

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |0\rangle |0\rangle \quad (5.46)$$

se $\alpha_2 = \alpha_4 = 0$,

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |0\rangle |1\rangle \quad (5.47)$$

se $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$,

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |1\rangle |0\rangle \quad (5.48)$$

se $\alpha_1 = \alpha_4 = 0$, e, finalmente, o estado

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |1\rangle |1\rangle \quad (5.49)$$

se $\alpha_1 = \alpha_3 = 0$.

Observamos que tais resultados explicitam todas as configurações iniciais apresentadas na figura (5.1). Além disso, utilizamos os α'_i s para prepararmos o sistema fazendo referência às populações dos poços, o que não significa que estas sejam nulas.

5.4 Algumas portas quânticas.

Mostramos agora através da aplicação do operador hamiltoniano efetivo desenvolvido na equação (5.41) no estado definido em (5.45) a obtenção de duas portas lógicas quânticas relevantes. A primeira delas, uma porta de fase, como mostrado na tabela (5.4.1), é perfeitamente plausível. Façamos então tal desenvolvimento para em seguida tratarmos de uma porta universal, neste caso a (*controlled not*)² utilizamos a terminologia em inglês por uma questão puramente técnica..

5.4.1 A porta de fase

Começemos com a aplicação referida no início desta seção para encontrarmos

$$|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle (t) = e^{(-i/\hbar)\mathcal{H}_{eff}(t-t_0)} |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle, \quad (5.50)$$

o que nos fornece o resultado

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle (t) = & \alpha_1 \alpha_3 |0\rangle |0\rangle + \alpha_1 \alpha_4 e^{-2iN_2 N_3 \eta' (t-t_0)} |0\rangle |1\rangle + \\ & + \alpha_2 \alpha_3 e^{-2iN_1 \eta (t-t_0)} |1\rangle |0\rangle + \alpha_2 \alpha_4 e^{-2i(t-t_0)[\eta(N_1+N_3)+\eta'N_3]} |1\rangle |1\rangle, \end{aligned} \quad (5.51)$$

Observe que obteremos as configurações apresentadas na tabela (5.4.1) se fizermos $\alpha_2 = \alpha_4 = 0$ para o resultado $|0\rangle |0\rangle$, $\alpha_1 = \alpha_4 = 0$ para $|1\rangle |0\rangle$, $\alpha_3 = \alpha_2 = 0$ para $|0\rangle |1\rangle$ e $\alpha_1 = \alpha_3 = 0$ para $e^{-i\eta'} |1\rangle |1\rangle$.

²U

$U f(x)\rangle$	\mathcal{H}_{eff}	Combinação
$ 0\rangle 0\rangle$	\rightarrow	$ 0\rangle 0\rangle$
$ 1\rangle 0\rangle$	\rightarrow	$ 1\rangle 0\rangle$
$ 0\rangle 1\rangle$	\rightarrow	$ 0\rangle 1\rangle$
$ 1\rangle 1\rangle$	\rightarrow	$e^{-in'} 1\rangle 1\rangle$

Tabela 5.1: Tabela verdade para a porta lógica quântica de fase (*phase gate*) obtida pela evolução do estado (5.44) pela aplicação do operador (5.41).

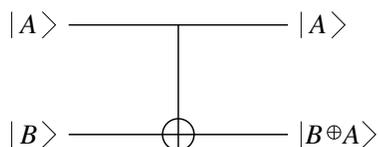


Figura 5.2: Porta lógica de operação *controlled not*.

Com a obtenção deste resultado, que corrobora os resultados apresentados na tabela (5.4.1), verificamos ainda a possibilidade de que outras portas quânticas sejam factíveis a partir da equação (5.51). Com isso, observamos que a transformação utilizada no início deste capítulo se mostra viável para tais obtenções.

5.4.2 A porta *controlled not*.

É possível que uma combinação apropriada dos parâmetros e do controle das populações na equação (5.51) nos retorne a tabela verdade da porta *controlled not*, como apresentado na tabela abaixo.

Para mostrarmos a exequibilidade da operação representada pela tabela (5.4.2), fazemos novamente a análise da relação (5.51). Neste observamos a necessidade de fazermos $\alpha_4 = \alpha_2 = 0$ para obtermos a transformação $|00\rangle \rightarrow |00\rangle$, $\alpha_3 = \alpha_2 = 0$ para $|01\rangle \rightarrow |01\rangle$, $\alpha_1 = \alpha_3 = 0$ para $|10\rangle \rightarrow |11\rangle$ e $\alpha_1 = \alpha_4 = 0$ para $|11\rangle \rightarrow |10\rangle$.

Ainda é plausível a obtenção desta mesma porta através de duas operações de Hadamard com o intuito de utilizarmos combinações de tais portas para a utilização e elaboração em circuitos.

$U f(x)\rangle$	\mathcal{H}_{eff}	Combinação
$ 0\rangle 0\rangle$	\rightarrow	$ 0\rangle 0\rangle$
$ 1\rangle 0\rangle$	\rightarrow	$ 1\rangle 1\rangle$
$ 0\rangle 1\rangle$	\rightarrow	$ 0\rangle 1\rangle$
$ 1\rangle 1\rangle$	\rightarrow	$ 1\rangle 0\rangle$

Tabela 5.2: Tabela verdade para a porta lógica quântica *controlled not* obtida pela evolução do estado (5.44) pela aplicação do operador (5.41).

No entanto, este parece ser o início de um novo e promissor trabalho.

Conclusões

A consolidação da teoria de computação e informação quântica exigiu a caracterização, dentre outros aspectos físicos, do emaranhamento. Portanto, é natural que se comece, assim como fizemos nesta tese, uma análise com um sistema com poucos corpos e, somente após um amadurecimento das técnicas matemáticas e também da melhora de recursos computacionais, seja efetuada uma busca para a quantificação de diversos modelos de matéria condensada, por exemplo. Assim, notamos que uma das motivações desta tese foi a compreensão da utilização do emaranhamento para o estudo das transições de fase à temperatura nula.

Embora tenhamos observado uma transição entre as fases dos modelos explorados no terceiro capítulo, ainda assim é interessante verificarmos que a sinalização dessas transições que ocorrem no BHM e no GCC podem ser melhoradas e talvez até determinadas com grande precisão. Para tal intento é necessário que se empregue métodos mais elaborados.

Há ainda dentro deste assunto uma possível investigação das transições de fase no modelo estendido de Bose-Hubbard embasado na comparação com os diagramas apresentados na referência de Kovrizhn e colaboradores [41]. Tais modelos podem ainda ser enriquecidos com resultados referentes a transições interbandas, o que enriquece sobremaneira os modelos já explorados na literatura, uma vez que não mais se consideraria apenas o estado fundamental de uma rede. Observe que esta é uma compreensão que poderia nos revelar novas fases quânticas e, por isso mesmo, ser considerada uma perspectiva para desenvolvimentos futuros embasados nesta tese.

A compreensão da divisão do emaranhamento no modelo de Bose-Hubbard mostrado também no terceiro capítulo deste texto possui um destaque em relação aos outros modelos e/ou cadeias.

Ainda, talvez esta seja uma análise interessante para se compreender a estrutura do emaranhamento multipartido em outros modelos.

Ressaltamos a importância da equação (3.20) para a entropia linear reduzida a um sítio para o modelo GCC. Como esta generaliza a medida de emaranhamento multipartido, também consideramos a sua análise como um grande e promissor recurso para desenvolvimentos de trabalhos futuros desta tese.

Os resultados do quarto capítulo nos mostram que é possível manipularmos as populações atômicas para potenciais de dois ou múltiplos poços. Observamos que a inserção do termo externo representado por γ recupera resultados até então conhecidos como o autoaprisionamento macroscópico. Isto evidencia que tais populações podem ser manipuladas e utilizadas para a elaboração de codificações e utilizações em portas lógicas quânticas, conforme mostramos no quinto capítulo. Tal controle das populações motivam ainda novos estudos como os de compressão de *spin* para esses mesmos sistemas, por exemplo.

Observe ainda que inserido no contexto da obtenção de codificação para portas lógicas quânticas é ainda factível um desenvolvimento embasado na descrição de estados coerentes. Estes, por uma questão de exequibilidade experimental, podem talvez ser mais interessantes que outras descrições.

Finalmente atentamos para uma possível análise de um modelo 3D análogo aos desenvolvidos nesta tese porém com a vantagem da manipulação dos termos de tunelamento, autocolisão e colisão cruzada em diferentes direções. Isto enriquece significativamente os resultados para computação e pode ainda trazer novos resultados para as transições de fase, revelando ainda prováveis relações com as transições interbandas anteriormente comentadas. Neste tópico reside ainda a possibilidade da obtenção de computação paralela, o que traz grandes vantagens como a significativa redução do tempo necessária para algumas tarefas computacionais. Estas podem ser observadas por uma possível manipulação dos termos de tunelamento e de colisão cruzada em diferentes direções.

Apêndice A

Notas sobre a derivação dos modelos

Partindo do operador hamiltoniano para espécies bosônicas numa rede óptica, assumindo que o número de partículas é conservado, obtemos o hamiltoniano [16, 17, 33]

$$\mathcal{H} = U \sum_i N_i (N_i - I) - J \sum_{i,j} \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \right), \quad (\text{A-1})$$

na qual U é a taxa de autocolisão ou ainda a intensidade da repulsão entre átomos dos mesmo sítio i como função da massa e do comprimento de onda s , e J é interpretado como o elemento de matriz entre dois sítios adjacentes i, j (*hopping*). Utilizamos $\hat{N}_i = a_i^\dagger a_i$ como o operador de número do sítio i , para o qual os operadores de aniquilação a_i e criação bosônicos a_i^\dagger obedecem à relação de comutação canônica $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}$. O hamiltoniano de Bose-Hubbard consiste em considerar o termo de *hopping* somente entre os sítios vizinhos, enquanto a configuração CCG considera esse mesmo *hopping* entre dois sítios quaisquer. Cálculos considerando o BHM através de uma teoria de campo médio indicam uma transição de fase no ponto crítico $U/J = 5.6z$, na qual $z = 2d$ é o número de primeiros vizinhos [16, 17, 33, 72]. Para uma rede óptica unidimensional, essa teoria de campo médio propõe a razão $J/U \approx 0.08$ para o ponto de transição. Tais resultados foram corroborados através da investigação experimental em uma rede óptica unidimensional por Stöferle e colaboradores [49]. Além disso há soluções bem conhecidas para as duas fases previstas para o BHM [72]. Na fase superfluida o sistema é descrito por um estado coerente no qual a distribuição de probabilidades para o número de ocupação local dos átomos em um sítio da rede é Poissoniana. Mais ainda, tal estado é bem descrito por uma função de onda macroscópica

com coerência de fase por toda a rede

$$|\Psi_{SF}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M \hat{b}_i^\dagger \right)^N |0\rangle. \quad (\text{A-2})$$

Na fase isolante de Mott (MI) as flutuações do estado fundamental do sistema consistem de funções de onda atômicas localizadas com um número fixo de átomos por sítio que minimizam a energia de interação. O estado fundamental é então representado por um produto de estados de Fock para cada sítio da rede [16]

$$|\Psi_{MI}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \prod_{i=1}^M (\hat{b}_i^\dagger)^n |0\rangle. \quad (\text{A-3})$$

Embora exista uma diferença entre as configurações BHM e GCC, é sabido que no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, o comportamento de ambos são similares. Isto é corroborado pelas observações em experimentos recentes com sistemas que são suficientemente grandes, ou seja, com um número de sítios M de aproximadamente 10^5 [12,47].

Nesses experimentos o parâmetro de ordem $\Delta N^2 = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$ pode ser usado como um indicativo da transição. Na verdade, para a fase MI, que é incompressível, verifica-se que $\Delta N^2 = 0$, mostrando que a distribuição é de estados de Fock, enquanto que a fase superfluida, que é compressível, $\Delta N^2 \neq 0$ nos mostra que uma distribuição Poissoniana é observada.

Apêndice B - Representações da equação da entropia linear reduzida a um sítio.

Representações da equação da entropia linear reduzida a um sítio

Neste Apêndice mostramos alguns exemplos da equação (3.20) sobre a entropia linear reduzida a um sítio como medida de emaranhamento para a geometria de gráficos completamente conectados. Embora ela dependa de elementos da teoria dos números, estes são fáceis e de rápido entendimento, pois sua abordagem depende de um nível elementar de matemática.

O exemplo mais simples é compreendido por apenas dois átomos e dois sítios $N = M = 2$, cujo espaço vetorial é dado pelo conjunto

$$\{|11\rangle, |02\rangle, |20\rangle\}, \quad (\text{B-1})$$

a partir do qual escrevemos o operador densidade

$$\rho_{12} = |\Psi\rangle \langle\Psi| \quad (\text{B-2})$$

substituindo neste os elementos do conjunto (B-1), para o qual encontramos

$$\rho_{12} = [\alpha_1 |11\rangle + \alpha_2 (|02\rangle + |20\rangle)] [\alpha_1^* \langle 11| + \alpha_2^* (\langle 02| + \langle 20|)]. \quad (\text{B-3})$$

Simplificadamente, após a operação de traço parcial³, escrevemos

$$\rho_1 = |\alpha_1|^2 |1\rangle \langle 1| + |\alpha_2|^2 (|0\rangle \langle 0| + |2\rangle \langle 2|). \quad (\text{B-4})$$

³Perceba o leitor que, como há uma simetria quanto ao sítio a ser tomado, poderíamos naturalmente tomar ρ_2

O leitor deve observar que estamos fazendo um tratamento embasado na propriedade do hamiltoniano GCC de possuir peso estatístico igual para o termo de *hopping* entre todos os sítios. Isso faz com que todas as configurações de uma ocupação dupla possuam o mesmo peso, aqui representado por α_2 . Esse raciocínio é perfeitamente compreendido ao avançarmos no problema como se a resolvê-lo por indução.

Façamos então a configuração seguinte, para três átomos e três sítios, ($N = M = 3$), que também depende de uma abordagem elementar da contagem dos símbolos correspondentes às ocupações. Desta feita, representamos o espaço pelo conjunto seguinte

$$\{|111\rangle, |012\rangle, |021\rangle, |102\rangle, |120\rangle, |201\rangle, |210\rangle, |003\rangle, |030\rangle, |300\rangle\} \quad (\text{B-5})$$

e escrevemos o operador densidade a partir da sua definição para encontrarmos

$$\rho_{123} = |\Psi\rangle \langle\Psi| \quad (\text{B-6})$$

e também aplicarmos os elementos do conjunto (B-5). Desta vez encontramos

$$\begin{aligned} \rho_{123} = & [\alpha_1 |111\rangle + \\ & + \alpha_2 (|012\rangle + |021\rangle + |102\rangle + |120\rangle + |201\rangle + |210\rangle) + \\ & + \alpha_3 (|003\rangle + |030\rangle + |300\rangle)] \\ & [\alpha_1 \langle 111| + \\ & + \alpha_2 (\langle 012| + \langle 021| + \langle 102| + \langle 120| + \langle 201| + \langle 210|) + \\ & + \alpha_3 (\langle 003| + \langle 030| + \langle 300|)], \end{aligned} \quad (\text{B-7})$$

que após a operação de traço parcial, escrevemos como

$$\rho_1 = |\alpha_1|^2 |1\rangle \langle 1| + 2 |\alpha_2|^2 (|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) + |\alpha_3|^2 (2 |0\rangle \langle 0| + |3\rangle \langle 3|). \quad (\text{B-8})$$

Esta forma, embora simples, já se mostra suficiente para uma rápida verificação da equação em questão. Portanto, tomamos a própria equação 3.20 e fazamos, a partir dela, a obtenção da relação expressa em B-8. Para isso, escrevemos

$$\rho_{N,1} = (N-2)! \sum_{i=1}^{f(N)} |\alpha_i|^2 \sum_{j=0}^N \frac{\sum_{s=0}^N r_s^{ij}}{\prod_{s=0}^N r_s^{ij}} |j\rangle \langle j|,$$

que após a substituição $N = M = 3$ fica dada por e, conseqüentemente,

$$\rho_{3,1} = (3-2)! \sum_{i=1}^{f(N)=3} |\alpha_i|^2 \sum_{j=0}^{N=3} \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{ij}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{ij}} |j\rangle \langle j|.$$

Desenvolvendo o somatório, encontramos

$$\begin{aligned} \rho_{3,1} &= |\alpha_1|^2 \sum_{j=0}^{N=3} \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{1j}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{1j}} |j\rangle \langle j| + |\alpha_2|^2 \sum_{j=0}^{N=3} \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{2j}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{2j}} |j\rangle \langle j| + |\alpha_3|^2 \sum_{j=0}^{N=3} \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{3j}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{3j}} |j\rangle \langle j| \\ \rho_{3,1} &= |\alpha_1|^2 \left[\frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{10}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{10!}} |0\rangle \langle 0| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{11}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{11!}} |1\rangle \langle 1| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{12}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{12!}} |2\rangle \langle 2| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{13}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{13!}} |3\rangle \langle 3| \right] + \\ &+ |\alpha_2|^2 \left[\frac{\sum_{s=0}^{N=2} r_s^{20}}{\prod_{s=0}^{N=2} r_s^{20!}} |0\rangle \langle 0| + \frac{\sum_{s=0}^{N=2} r_s^{21}}{\prod_{s=0}^{N=2} r_s^{21!}} |1\rangle \langle 1| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{22}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{22!}} |2\rangle \langle 2| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{23}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{23!}} |3\rangle \langle 3| \right] \\ &+ |\alpha_3|^2 \left[\frac{\sum_{s=0}^{N=2} r_s^{30}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{30!}} |0\rangle \langle 0| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{31}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{31!}} |1\rangle \langle 1| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{32}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{32!}} |2\rangle \langle 2| + \frac{\sum_{s=0}^{N=3} r_s^{33}}{\prod_{s=0}^{N=3} r_s^{33!}} |3\rangle \langle 3| \right], \end{aligned}$$

que fica explicitamente dado por

$$\begin{aligned} \rho_{3,1} &= |\alpha_1|^2 \left[\frac{(r_0^{10} + r_1^{10} + r_2^{10} + r_3^{10})}{(r_0^{10!} r_1^{10!} r_2^{10!} r_3^{10!})} |0\rangle \langle 0| + \frac{(r_0^{11} + r_1^{11} + r_2^{11} + r_3^{11})}{(r_0^{11!} r_1^{11!} r_2^{11!} r_3^{11!})} |1\rangle \langle 1| + \right. \\ &\left. \left[\frac{(r_0^{12} + r_1^{12} + r_2^{12} + r_3^{12})}{(r_0^{12!} r_1^{12!} r_2^{12!} r_3^{12!})} |2\rangle \langle 2| + \frac{(r_0^{13} + r_1^{13} + r_2^{13} + r_3^{13})}{(r_0^{13!} r_1^{13!} r_2^{13!} r_3^{13!})} |3\rangle \langle 3| \right] + \right. \\ &\left. + |\alpha_2|^2 \left[\frac{(r_0^{20} + r_1^{20} + r_2^{20} + r_3^{20})}{(r_0^{20!} r_1^{20!} r_2^{20!} r_3^{20!})} |0\rangle \langle 0| + \frac{(r_0^{21} + r_1^{21} + r_2^{21} + r_3^{21})}{(r_0^{21!} r_1^{21!} r_2^{21!} r_3^{21!})} |1\rangle \langle 1| + \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{(r_0^{22} + r_1^{22} + r_2^{22} + r_3^{22})}{(r_0^{22}!r_1^{22}!r_2^{22}!r_3^{22}!)} |2\rangle \langle 2| + \frac{(r_0^{23} + r_1^{23} + r_2^{23} + r_3^{23})}{(r_0^{23}!r_1^{23}!r_2^{23}!r_3^{23}!)} |3\rangle \langle 3| \right] \\ & + |\alpha_3|^2 \left[\frac{(r_0^{30} + r_1^{30} + r_2^{30} + r_3^{30})}{(r_0^{30}!r_1^{30}!r_2^{30}!r_3^{30}!)} |0\rangle \langle 0| + \frac{(r_0^{31} + r_1^{31} + r_2^{31} + r_3^{31})}{(r_0^{31}!r_1^{31}!r_2^{31}!r_3^{31}!)} |1\rangle \langle 1| + \right. \\ & \left. \left[\frac{(r_0^{32} + r_1^{32} + r_2^{32} + r_3^{32})}{(r_0^{32}!r_1^{32}!r_2^{32}!r_3^{32}!)} |2\rangle \langle 2| + \frac{(r_0^{33} + r_1^{33} + r_2^{33} + r_3^{33})}{(r_0^{33}!r_1^{33}!r_2^{33}!r_3^{33}!)} |3\rangle \langle 3| \right] \right]. \end{aligned}$$

Os símbolos que contribuem para a ocupação estão ligados aos estados de ocupação simples ($|111\rangle$ - com duas ocorrências) para α_1 ; estados de ocupação nula, simples ou dupla para α_2 ($|012\rangle$ - com duas ocorrências cada) e estados de ocupação nula (duas ocorrências) ou tripla (uma ocorrência) ($|003\rangle$) para α_3 .

$$\begin{aligned} \rho_{3,1} = & |\alpha_1|^2 \left\{ \left[\frac{(0+0+0+0)}{(0!0!0!0!)} \right] |0\rangle \langle 0| + \left[\frac{(0+2+0+0)}{(0!2!0!0!)} \right] |1\rangle \langle 1| + \right. \\ & \left. + \left[\frac{(0+0+0+0)}{(0!0!0!0!)} \right] |2\rangle \langle 2| + \left[\frac{(0+0+0+0)}{(0!0!0!0!)} \right] |3\rangle \langle 3| \right\} + \\ & + |\alpha_2|^2 \left\{ \left[\frac{(0+1+1+0)}{(0!1!1!0!)} \right] |0\rangle \langle 0| + \left[\frac{(1+0+1+0)}{(1!0!1!0!)} \right] |1\rangle \langle 1| + \right. \\ & \left. \left[\frac{(1+1+0+0)}{(1!1!0!0!)} \right] |2\rangle \langle 2| + \left[\frac{(0+0+0+0)}{(0!0!0!0!)} \right] |3\rangle \langle 3| \right\} \\ & + |\alpha_3|^2 \left\{ \left[\frac{(1+0+0+1)}{(1!0!0!1!)} \right] |0\rangle \langle 0| + \left[\frac{(0+0+0+0)}{(0!0!0!0!)} \right] |1\rangle \langle 1| + \right. \\ & \left. \left[\frac{(0+0+0+0)}{(0!0!0!0!)} \right] |2\rangle \langle 2| + \left[\frac{(2+0+0+0)}{(2!0!0!0!)} \right] |3\rangle \langle 3| \right\} \end{aligned}$$

$$\rho_{3,1} = |\alpha_1|^2 |1\rangle \langle 1| + 2|\alpha_2|^2 (|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) + |\alpha_3|^2 (2|0\rangle \langle 0| + |3\rangle \langle 3|), \quad (\text{B-9})$$

que é a mesma relação B-8.

Apêndice C - A equação de Gross-Pitaevskii

Linhas gerais de uma derivação

Quando tratamos gases rarefeitos a baixas temperaturas, é perfeitamente possível uma descrição através da equação de Gross-Pitaevskii [11, 12]. Esta caracteriza-se por ser uma aproximação não linear da equação de Schrödinger.

A dinâmica de um determinado sistema é obtida ao evoluirmos temporalmente o operador (2.1), o que fazemos através da equação de Heisenberg

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}]. \quad (\text{C-1})$$

A substituição da equação (2.1) em (C-1) e a utilização da relação usual de comutação bosônica nos fornece

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_1(\mathbf{r}) + V_T(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{C-2})$$

que é uma equação exata para o operador $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$.

Consideremos a aproximação do operador $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ por uma teoria de campo médio representando por $\Phi(\mathbf{r}, t)$. Ou seja, como $\int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = N$, escrevemos

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sqrt{N} \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{C-3})$$

que substituída em (C-2) nos fornece

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_1(\mathbf{r}) + V_T(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r' d^3r'' \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{C-4})$$

Observe que as equações (C-2) e (C-4) embora tenham a mesma estrutura, elas representam diferentes tratamentos. A primeira delas é uma equação exata para o operador de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, enquanto que a segunda é uma aproximação de campo médio para um campo clássico, que se constitui num parâmetro de ordem do condensado. Este parâmetro ainda recebe o nome de função de onda do condensado.

Substituindo o potencial de contato definido na equação (2.2) em (C-4), encontramos

$$\hat{H}\Phi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{C-5})$$

denominada equação de Gross-Pitaevskii, na qual definimos

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}) + gN |\Phi|^2. \quad (\text{C-6})$$

As soluções da equação representada em (C-6) são da forma

$$\Phi_n(\mathbf{r}, t) = \phi_n e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (\text{C-7})$$

na qual $\phi_n(\mathbf{r})$ é independente do tempo.

Bibliografia

- [1] RILKE, R. M. *Cartas a um jovem poeta*, Rio de Janeiro: Editora Globo, 1995.
- [2] COHEN-TANNOUDJI, C. N. (1998) *Manipulating atoms with photons*, Reviews of Modern Physics, Volume 70, Number 3, 707.
- [3] CHU, S. (1998) *The manipulation of neutral particles*, Reviews of Modern Physics, Volume 70, Number 3, 685.
- [4] PHILLIPS, W. D. (1998) *Laser cooling and trapping of neutral atoms* Reviews of Modern Physics, Volume 70, Number 3, 721.
- [5] MEYSTRE, P. *Atom Optics*, New York: Springer, 2001.
- [6] SCULLY, M. O. and ZUBAIRY, M. S. *Quantum Optics*, Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [7] LETT, P. D., WATTS, R., WESTBROOK, C., PHILLIPS, W., GOULD, P. and METCALF, H. (1988) *Observation of atoms laser-cooled below the Doppler limit*, Physical Review Letters, Volume 61, 169.
- [8] DALIBARD, J. and COHEN-TANNOUDJI, C. (1989) *Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models*, Journal of the Optical Society of America B, Volume 6, 2023.

- [9] HIJMANS, T. W., LUITEN, O. J., SETIJA, I. D. and WALRAVEN, J. T. M. (1989) *Optical cooling of atomic hydrogen in a magnetic trap*, Journal of the Optical Society of America B, Volume 6, 2235.
- [10] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*, São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 1999.
- [11] COURTEILLE, W., BAGNATO, V. S. and YUKALOV, V. I. (2009) *Bose-Einstein condensation of trapped atomic gases*, Laser Physics, Volume 11, Number 6, 659.
- [12] BLOCH, I., DALIBARD, J. and ZWERGER, W. (2008). *Many-body physics with ultracold gases*, Reviews of Modern Physics, Volume 88, 885.
- [13] KETTERLE, W. (2002) *When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser*, Reviews of Modern Physics, Volume 74, Number 4, 1131.
- [14] CORNELL, E. A. and WIEMAN, C. E. (2002) *Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments*, Reviews of Modern Physics, Volume 74, Number 4, 875.
- [15] ANDERSON, M. H. (1995) *Electron correlations in narrow energy bands*, Science, Volume 269, 198.
- [16] JAKSCH and ZOLLER, P. (2005) *The cold atom Hubbard toolbox*, Anals of Physics, 315, 52-79.
- [17] JAKSCH, D., BRUDER, C., CIRAC, J.I., GARDINER, C.W. and ZOLLER, P. (1998) *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices*, Physical Review Letters, Volume 81, Number 15, 3108.
- [18] ANDERLINI, M., LEE, J. P., BROWN, B. L., SEBBY-STRABLEY, J., PHILLIPS, W. D. & PORTO, J. V. (2007) *Controlled exchange interaction between pairs of neutral atoms in an optical lattice*, Nature, Volume 448, 452.

- [19] BASSALO, J. M. F. (1993) *A Crônica da Física do Estado Sólido: I. Do Tudo de Geissler às Válvulas a Vácuo*, Revista Brasileira de Ensino de Física, Volume 15, 127.
- [20] BASSALO, J. M. F. (1993) *A Crônica da Física do Estado Sólido: II. Teoria dos Metais*, Revista Brasileira de Ensino de Física, Volume 15, 139.
- [21] BASSALO, J. M. F. (1994) *A Crônica da Física do Estado Sólido: III. Teoria de Bandas*, Revista Brasileira de Ensino de Física, Volume 16, 63.
- [22] BASSALO, J. M. F. (1994) *A Crônica da Física do Estado Sólido: IV. Magnetismo*, Revista Brasileira de Ensino de Física, Volume 16, 76.
- [23] JESSEN, P. S. and DEUTSCH, I. H. (1999) *Optical Lattices*, Advances in Molecular and Optical Physics, Volume 37, 2574.
- [24] GUIDONI, L. and VERKERK, P. (1999) *Optical lattices: cold atoms ordered by light*, Journal of Optics B: Quantum Semiclass, Volume 1, R23 - R45.
- [25] ANDREEV, A. M. and LIFSHTIZ, I. M. (1969) *Quantum Theory of Defects in Crystals*, Soviet Physics, Volume 29, 1107.
- [26] MIRANDA, E. (2005) *Transições de fase e o grupo de renormalização*, Universidade Estadual de Campinas, não publicado.
- [27] SCHWARTZ, A. (2002) *Transições de Fase*, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal Fluminense.
- [28] SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*, Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [29] OLIVEIRA, M. C. (2003). *Teleportation of a Bose-Einstein condensate state by controlled elastic collisions*, Physical Review A, Volume 67, 022307.

- [30] RIGOLIN, G. (2005) *Estados quânticos emaranhados*, Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas.
- [31] BENNET, C. H., DiVINCENZO, D. P., SMOLIN, WOOTERS, W. K. (1996). *Mixed-state entanglement and quantum error correction*, Physical Review A, Volume 54, 3824.
- [32] HALDANE, F. D. M. (1981) *Effective Harmonic-Fluid Approach to Low-Energy Properties of One-Dimensional Quantum Fluids*, Physical Review Letters, Volume 47, 1840.
- [33] FISHER, M. P. A., WEICHMAN, P. B., GRINSTEIN, G., FISHER, D.S. (1989) *Boson Localization and the superfluid-insulator Mott transition*, Physical Review B, Volume 40, 546.
- [34] ROBERTSON, B. (1973) *Introduction to field operators in quantum mechanics*, American Journal of Physics, Volume 40, 546.
- [35] BUONSANTE, P. & VEZANNI, A. (2007) *Ground-State Fidelity and Bipartite Entanglement in the Bose-Hubbard Model*, Physical Review Letters, Volume 98, 110601.
- [36] GIORDA, P. & ZANARDI, P. (2003), *Mode entanglement and entangling power in bosonic graphs*, Physical Review A, Volume 68, 062108.
- [37] GIORDA, P and ZANARDI, P. (2004), *Ground-State Entanglement in Interacting Bosonic Graphs*, Europhysics Letters Volume 68(2), 163.
- [38] SCAROLA, V. W. and Das SARMA, S. (2005) *Quantum Phase of the Extended Bose-Hubbard Hamiltonian: Possibility of a Supersolid State of Cold Atoms in Optical Lattices*, Physical Review Letters, Volume 95, 033003.
- [39] SCAROLA, V. W., DEMLER, E. and DAS SARMA, S. (2006). *Searching for a supersolid in cold-atom optical lattices*, Physical Review A, Volume 73, 051601(R).

- [40] PAI, R. V. and PANDIT, R. (2004). *Superfluid, Mott-Insulator and Mass-Density-Wave Phases in the One-Dimensional Extended Bose-Hubbard Model*, Cond-mat/0407011.
- [41] KOVRIZHN, D. L., VENKETESWARA PAI, G. and SINHA, S. (2005). *Density wave and supersolid phases of correlated bosons in an optical lattice*, Europhysics Letters, Volume 72, 162-168.
- [42] KIN, E. and CHAN, M. H. W. (2004) *Probable observation of a supersolid helium phase*, Nature, Volume 427, 225.
- [43] HUBBARD, J. (1963) *Electron correlations in narrow energy bands*, Proceedings of the Royal Society of London Series A, Volume 276, 238.
- [44] KOHN, W. (1959) *Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions*, Physical Review, Volume 115, 809.
- [45] KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*, Rio de Janeiro: Editora Guanabara Dois S. A., 1978.
- [46] MAZZARELLA, G., GIAMPAOLO, S. M. ILLUMINATTI, F. (2006). *Extended Bose Hubbard model of interacting bosonic atoms in optical lattices: From superfluid to density waves*, Physical Review A, Volume 73, 013625.
- [47] GREINER, M., MANDEL, O., ESSLINGER, T., HÄNSH, T. W. and BLOCH, I. (2002) *Quantum Phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature, Volume 415, 39.
- [48] de OLIVEIRA, M. C. and B. R. da Cunha (2009). *Collision-Dependent Atom Tunneling Rate - Bose-Einstein condensate in double and multiple well traps*, International Journal of Modern Physics B, Volume 23, Issue 32, 5867.

- [49] STÖFERLE, T., MORITZ, H., SCHORI, C., KÖHL, M. & ESSLINGER, T. (2004) *Transition from a Strongly Interacting 1D Superfluid to a Mott Insulator*, Physical Review Letters, Volume 92, 130403.
- [50] HADZIBZBIC, Z., KRÜGER, P., CHENEAU, M., BATTELIER, B. & DALIBARD, J. (2006) *Berezinskii–Kosterlitz–Thouless crossover in a trapped atomic gas*, Nature, Volume 441, 1118-1121.
- [51] ALBIEZ, M., GATI, R., FÖLLING, J., HUNSMANN, S., CRISTIANI, M. & OBERTHALER, M. K. (2005) *Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction*, Physical Review Letters, Volume 95, 010402.
- [52] PICHLER, H., DOLEY, A. J. and ZOLLER, P. (2010) *Nonequilibrium dynamics of bosonic atoms in optical lattices: Decoherence of many-body states due to spontaneous emission*, Physical Review A, Volume 82, 063605.
- [53] BLOCH, I. (2005) *Exploring quantum matter with ultracold atoms in optical lattices*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, Volume 38, S629.
- [54] MANDEL, O., GREINER, M., WIDERA, A., ROM, T., HÄNSH and BLOCH, I. (2003) *Controlled collisions for multiparticle entanglement of optically trapped atoms*, Nature, Volume 425, 937.
- [55] WOOTERS, K. W. (2001). *Entanglement of Formation and Concurrence*, Quantum Information and Computation, Volume 1, Number 1, 27.
- [56] COFFMAN, V., KUNDU, J. & WOOTERS, W. (2000). *Distributed entanglement*, Physical Review A, Volume 61, 052306.
- [57] VIDAL, G. & WERNER, R. F. (2000). *Computable measure of entanglement*, Physical Review A, Volume 65, 032314.

- [58] SOUTHWELL, K. Senior Editor (2008), *P. Nature*, London: Macmillan Publishers Limited, Volume 453, 1003.
- [59] NIELSEN, M. A. and CHUANG, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge Univ. Press, UK, 2000).
- [60] HORODEKI, R., HORODEKI, P., HORODEKI, M. and HORODEKI, K. (2009) *Quantum entanglement*, *Reviews of Modern Physics*, Volume 81, 865.
- [61] AMICO, L., FAZIO, R., OSTERLOH, A. and VEDRAL, V. (2008), *Entanglement in many-body systems*, *Review Modern Physics*, Volume 80, 517.
- [62] PIZA, A. F. de T. (2000) *Schrödinger, Emaranhamento e decoerência*, Simpósio 100 anos de física quântica no IFUSP em 14 e 15 de dezembro de 2000: São Paulo.
- [63] de OLIVEIRA, T. R., RIGOLIN, G., de OLIVEIRA, M. C. & MIRANDA, E. (2006) *Multipartite Entanglement Signature of Quantum Phase Transitions*, *Physical Review Letters*, Volume 97, 170401.
- [64] VISCONDI, T. F., FURUYA, K. and de OLIVEIRA, M. C. (2009) *Generalized purity and quantum phase transition for Bose-Einstein condensates in a symmetric double well*, *Physical Review A*, Volume 80, 013610.
- [65] WU, L. A., SARANDY, M. S. & LIDAR, D. A. (2004) *Quantum Phase Transitions and Bipartite Entanglement*, *Physical Review Letters*, Volume 93, 250404.
- [66] WU, L. A., SARANDY, M. S., LIDAR, D. A. and SHAM, L. J. (2006), *Linking entanglement and quantum phase transitions via density-functional theory*, *Physical Review A*, Volume 74, 052335.
- [67] de OLIVEIRA, T. R., RIGOLIN, G., de OLIVEIRA, M. C. & MIRANDA, E. (2008) *Symmetry breaking effects upon bipartite and multipartite entanglement in the XY model*, *Physical Review A*, Volume 77, 032325.

- [68] COSTA FARIAS, R. J. and de OLIVEIRA, M. C. (2010). *Entanglement and the Mott insulator-superfluid phase transition in bosonic atoms chains*, Journal of Physics: Condensed Matter, Volume 22, Number 24, 245603.
- [69] ELSTNER, N. and MONIEN, H. (1999) *Dynamics and thermodynamics of the Bose-Hubbard model*, Physical Review B, Volume 59, 12184.
- [70] BEREZINSKII, Z. L.,(1971), Zh. Eksp. Teor. Fiz.,Volume 61, 1144.
- [71] KOSTERLITZ, J. M. and THOULESS, D. J., (1973), *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*, Journal of Physics C, Volume 6, 1181.
- [72] FREERICKS, J. K. and MONIEN, H. (1996) *Strong-coupling expansions for the pure and disordered Bose-Hubbard model*, Physical Review B, Volume 53, 2691.
- [73] KÜHNER, T. D. and MONIEN, H. (1998) *Phases of the one-dimensional Bose-Hubbard model*, Physical Review B, Volume 58, R14741.
- [74] ELSTNER, N. and MONIEN, H. (1999) *Dynamics and thermodynamics of the Bose-Hubbard model*, Physical Review B, Volume 59, 12184.
- [75] DEUTSCH, I. H. (1998) *Quantum-state control in optical lattices*, Physical Review A, Volume 57, 1972.
- [76] LOSS, D. and BURKARD, G. (1999) *Coupled quantum dots as quantum gates*, Physical Review B, Volume 59, 2070.
- [77] DiVINCENZO, D. P. & BENNETT, C. H. (2000) *Quantum information and computation*, Nature, Volume 404, 247.
- [78] LEVY, J. (2002) *Universal Quantum Computation Spin-1/2 Pairs and Heisenberg Exchange*, Physical Review Letters, Volume 89, 147902.

- [79] LOSS, D. and DiVINCENZO, D.P. (1998) *Quantum computation with quantum dots*, Physical Review A, Volume 57, 120.
- [80] HOLTHÄUS, M. and STENHOLM, S. (2001) *Coherent control of the self trapping transition*, The European Physical Journal B, Volume 20, 451.
- [81] HOLTHÄUS, M.(2001) *Towards coherent control of a Bose-Einstein condensate in a double well*, Physical Review A, Volume 64, 011601.
- [82] MILBURN, G. J., CORNEY, J., WRIGHT, E. M., WALLS, D.F. (1997) *Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential*, Physical Review A, Volume 55, 4318.
- [83] CALARCO, T., HINDS, E. A., JAKSCH, D., SCHIEDMAYER, J., CIRAC, J. I., D. & ZOLLER, P. (2000). *Quantum gates with neutral atoms: Controlling collisional interactions in time-dependent traps.*, Physical Review A, Volume 61, 022304.
- [84] JAKSCH, D., BRIEGEL, H. J., CIRAC, J. I., GARDINER, C. W. and ZOLLER, P. (1999) *Entanglement of Atoms via Cold Controlled Collisions*, Physical Review Letters, Volume 82, 1975.
- [85] LADD, T. D., JELEZKO, F., LAFLAMME, R., NAKAMURA, Y., MONROE, C. and O'BRIEN, L. (2010) *Quantum Computers*, Nature, Volume 464, Number 4, 45.
- [86] DiVINCENZO, D. P. (2000). *The Physical Implementation of Quantum Computation*, Fortschritte der Physik, Volume 48, 771.
- [87] SAKURAI, S. *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1994.
- [88] LOUISEL, W. H. *Quantum statistical properties of radiation*, New York: John Wiley & Sons, 1973.