O Modelo de Bose-Hubbard

Alvaro Montaña Guerrero

Teoría quântica de muitos corpos
Instituto de Física
Universidade de São Paulo
SP, Brasil

10 de Dezembro de 2015

Introdução

O fenômeno de condensação de Bose-Einstein (CBE) concebido por S.Bose e A.Einstein teve sua primera realização experimental em 1995. Avanços experimentais permitem o aprisionamento de CBE em redes óticas, fazendo que controle alcançado nesses sistemas seja muito útil para o estudo de sistema análogos. Contrariamente ao que ocorre em um cristal, os parâmetros dessas redes óticas podem ser controlados.

Hamiltoniana

A hamiltoniana que descreve um gás de N bósons confinados em um potencial externo é

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{P_i^2}{2m} + V_{ext}(r_i) \right] + \sum_{i,j,i \neq j} V_{int}(r_i, r_j)$$

- p_i são os operadores momento de cada párticula.
- V_{ext} potencial externo.
- V_{int} potencial de interação entre as partículas do sistema.

Introduzindo os operadores de campo bosônicos Ψ, com relações de conmutação

$$\left[\Psi(r), \Psi^\dagger(r') \right] = \delta^3(r - r')$$

Interações

Para chegar ao modelo de Bose-Hubbard, temos que fazer algumas considerações

- Condensação de Bose-Einstein ($T \backsim 10^{-7}$K).
- Em um gás diluído $d \ll n^{-1/3}$.(d alcance das forças interatômicas, n densidade do gas), e portanto colisões entre três ou mais corpos é desprezada.
- A interação entre átomos alcalinos (neutros) é
  a) Repulsiva para separações atômicas pequenas.
  b) Atrativa (do tipo Van der Waals) para separações atômicas grandes. Esta é gerada pela interação dipolo-dipolo elétrica $\left(-\alpha/r^6\right)$

Interações

O potencial interatômico pode ser caracterizado por um potencial de alcance curto (r_0), então podemos expandir a amplitude de espalhamento $f(\theta)$ em ondas parciales. Esta função depende do ângulo θ e o vetor de onda κ.

Para energias muito baixas ($\kappa r_0 \ll 1$) ondas $\underline{s}$ são relevantes no espalhamento. Então a condição de gás diluído é $na^3 \ll 1$ com a *comprimento de espalhamento*.

Nestas condições se aproxima o potencial de interação como

$$V_{int}(r, r') = g\delta^3(r - r')$$

Onde

$$\begin{aligned} g &= 4\pi\hbar^2 a/m \\ V_{int} &= g\int d^3r\Psi^\dagger(r)\Psi^\dagger(r)\Psi(r)\Psi(r) \end{aligned}$$

Redes óticas

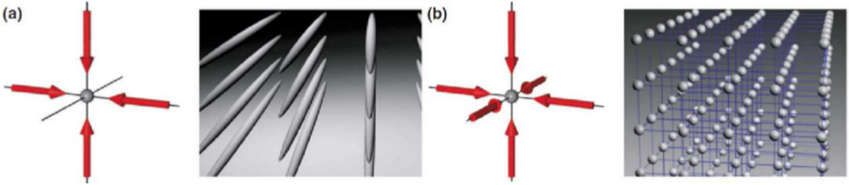
O padrão de interferência de lasers contrapropagantes gera um potencial periódico em que átomos neutros podem ser aprisionados.

- A periodicidade do potencial é determinada pelo comprimento de onda λ dos lasers.
- A interação campo elétrico do laser com o momento de dipolo induzido, gera o confinamento dos átomos na rede.

Redes óticas

Um exemplo simples do potencial gerado é

$$V_{ext} = V_0 \left[\sin^2(kx_1) + \sin^2(kx_2) + \sin^2(kx_3)\right]$$
$$k = 2\pi/\lambda$$



Tight-binding e função de Wannier

O hamiltoniano conmuta con T_d onde

$$T_d f(r) = f(r + d)$$

con d o período do potencial.

$$U(r) = U(r + d)$$

Fazendo uso do teorema de Bloch

$$T_d \psi(r) = \psi(r + d) = e^{iq \cdot d} \psi(r)$$

A função de onda de uma partícula em um potencial periódico ganha uma fase $e^{iq \cdot d}$ ao se deslocar de um sítio uma distancía d.

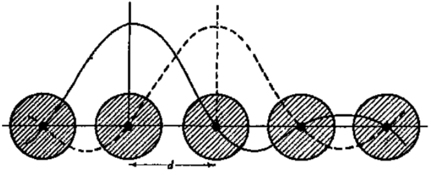
Na aproximação de *tight-binding*, consideramos

$$\psi_q(r) = \sum_d e^{iq\cdot d}\phi(r-d)$$

Onde $\phi(r-d)$ são funções localizadas no sítio de posição d, e a sobreposição entre funções vizinhas é pequena.
A função de Wannier;w_n, definida como a transformada de Fourier das funções de Bloch $\psi_{nq}(r)$, e uma função conveniente para trabalhar

$$w_n(r-d) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_q e^{-iq\cdot d}\psi_{nq}(r)$$

$$\int d^3r\ w_n^*(r-d)w_n'(r-d') = \delta_{n,n'}\delta^3_{d,d'}$$



A hamiltoniana de Bose-Hubbard

Outra aproximação: supor que as energias envolvidas na dinâmica são pequenas comparadas com a energia de excitação da segunda banda. Expandimos os operadores de campo na base de Wannier

$$\Psi(r) = \sum_{n,j} w_n(r - d_i) b_{n,i}$$

$$\Psi^\dagger(r) = \sum_{n,j} w_n^*(r - d_i) b_{n,i}$$

O hamiltoniano fica

$$H_o = \sum_{i,j} J_{i,j} b_i^\dagger b_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} U_{i,j,k,l} b_i^\dagger b_j^\dagger b_k b_l$$

$$J_{i,j} = -\int d^3r \; w^*(r - d_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) \right] w(r - d_j)$$

$$U_{i,j,k,l} = g \int d^3r w^*(r - d_i) w^*(r - d_j) w(r - d_k) w(r - d_l)$$

- $J_{i,j}$ representa o ganho de energia cinética devido ao tunelamento de uma partícula do sítio i ao sítio j. Lembre-se que $J_{i,j} = J_{i,j}(V_{ext})$ (proporcional a intensidade do laser).
- $U_{i,j,k,l}$ iteração entre as partículas dos sítios i, j, k, l

Fazemos outra aproximação

- A interação interatômica e repulsiva e local $U = U_{i,j,k,l} \neq 0$.
- A possibilidade de tunelamento das párticulas ocorre apenas entre sítios vizinhos $J = J_{i,j} \neq 0$

Por fim obtemos a hamiltoniana de Bose-Hubbard.

$$H_0 = -J \sum b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i$$

No ensemble gran canônico e mais conveniente

$$H = -J \sum b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i$$

Transição de fase

Variando a intensidade do laser, é possivel variar a razão entre U e J. Assim, podemos induzir una transição de fase na hamiltoniana de Bose-Hubbard

$$H = -J \sum b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i$$

Esta transição é conhecida como *transição de Mott*

- No caso $J \gg U$ as partículas tunelam facilmente, o sistema está en un regime deslocalizado e se encontram na fase denominada superfluida (SF)
- No caso $J \ll U$ o preço energético por mover uma partícula de um sítio a outro é alto. O sistema está na fase de isolante de Mott.

Fase Isolante de Mott

No caso $J = 0$, a energía do sistema pode se escrever em termos da energía por sítio

$$\varepsilon(n_i) = n_i(n_i - 1)U/2 - \mu n_i$$

Quando o número de ocupação de um sítio do sistema é aumentado de δ,a energía muda para

$$\varepsilon(n_i + \delta) = \varepsilon(n_i) + \varepsilon(\delta) + Un_i\delta$$

Há uma penalidade energética por uma ocupação maior que 1 partícula no sítio. O auto estado pode ser escrito como

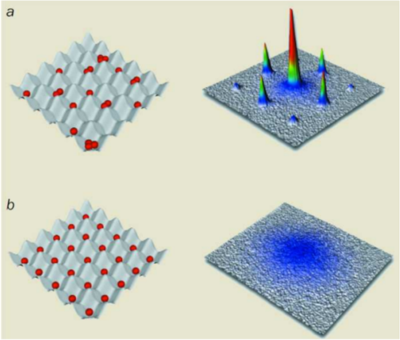
$$|\Psi_{MI}\rangle^{J=0} \propto \prod_i^N (b_i^\dagger)^n |0\rangle$$

Neste caso (J=0) $\partial n_i/\partial\mu = 0$ é chamado *incompressibilidade*

Fase Superfluida

No caso $U = 0$ as párticulas tunelam sem penalidade energética. O auto estado pode ser escrito como

$$|\Psi_{SF}\rangle^{U=0} \propto \left(\sum_i^N b_i^\dagger\right)^M |0\rangle$$



a) Fase SF
b) Fase MI

Aproximação de Campo Medio

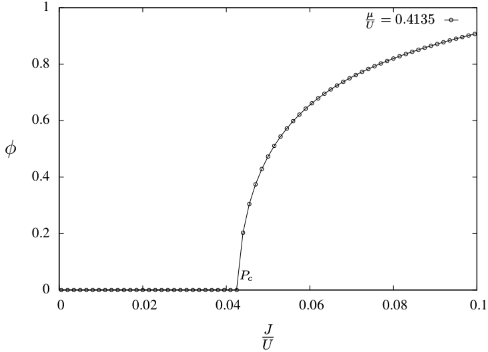
$$(b_i^\dagger - \langle b_i^\dagger \rangle)(b_j^\dagger - \langle b_j^\dagger \rangle) \approx 0$$

$$\phi = \langle b_i^\dagger \rangle = \langle b_i^\dagger \rangle$$

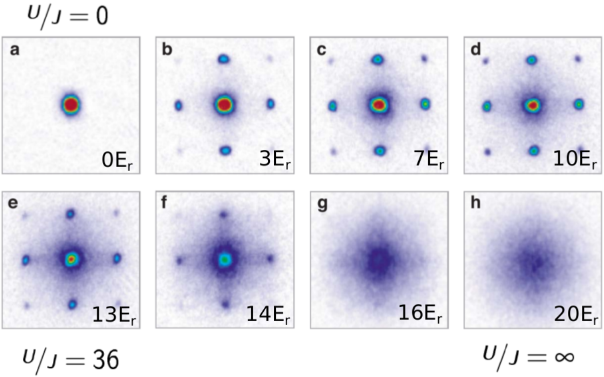
Onde ϕ é um parâmetro de ordem para a transição.
A hamiltoniana de Bose-Hubbard pode se escrever como a suma de hamiltoniana de um sítio

$$H_i^{CM} = -zJ\phi(b_i^\dagger + b_i) + zJ\phi^2 + \frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i$$

Onde N é o número de sítios e $z = 2d$ o número de primeros vizinhos da rede, com d a dimensão do sistema.



Parâmetro de ordem da transição de Mott. $P_c = 0{,}043$ para o valor $\mu/U = 0{,}4135$



Experimento de interferência que mostra a transição de fase. SF $\rightarrow$ MI

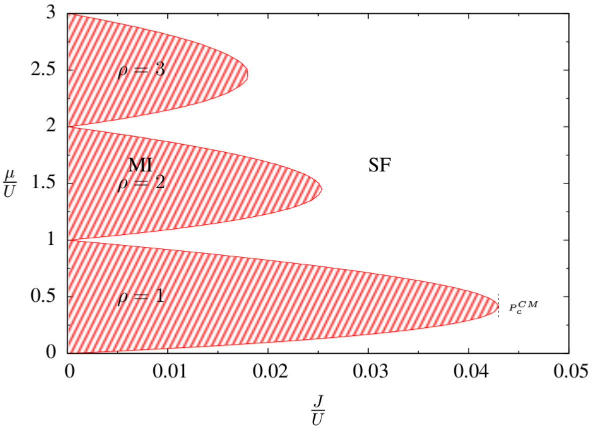


Diagrama de fases obtido com campo medio ($z = 4$). Três primeiros lobos de Mott (fundo hachurado), que são regiões na fase Mott (MI) bem delimitadas com um mesmo fator de preenchimento ρ inteiro. A fase superfluida (SF) é caraterizada por um ρ não inteiro.

Conclusões-Perspectivas

- O modelo de Bose-Hubbard basta para observar a transição de fase.
- O fator de preenchimento $\rho = \langle n \rangle = 1, 2, 3..$ representa o sistema na fase MI. Para ρ diferente, o sistema está na fase SF.
- O laser controla os parâmetros do sistema.
- A rede ótica é útil para o estudo do sistemas análogos.

Muito Obrigado!

- Costa, Karine Piacentini Coelho da. Estudo do modelo de Bose-Hubbard usando o algoritmo Worm [online]. São Paulo : Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 2011. Dissertação de Mestrado em Física.
- Cazalilla, M. A. and Citro. One dimensional bosons: From condensed matter systems to ultracold gases. RevModPhys.83.1405
- Henrik Bruss. Many-Body Quantum Theoryin Condensed Matter Physics: An introduction. Oxford Graduate Texts. 2004