

# O Modelo de Bose-Hubbard

A. Montaña-Guerrero\*

*Teoria Quântica de Muitos Corpos em Materia Condensada*  
*Instituto de Física*  
*Universidade de São Paulo - São Paulo*  
*Brasil*

O fenômeno de condensação de Bose-Einstein (CBE) concebido por S.Bose e A.Einstein teve sua primeira realização experimental em 1995. Avanços experimentais permitem o aprisionamento de CBE em redes óticas, fazendo que o controle alcançado nesses sistemas seja muito útil para o estudo de sistemas análogos. Contrariamente ao que ocorre em um cristal, os parâmetros dessas redes óticas podem ser controlados[1, 2]. Greiner [7] tiveram sucesso experimental em mostrar uma transição de fase, a partir de uma fase superfluida (SF) até uma conhecida como fase de Mott (MI). Esta transição é de carácter quântico, uma vez que é uma transição de fase à temperatura de zero. Uma breve introdução ao modelo de Bose-Hubbard é estudada, o qual que consegue explicar a transição de fase.

## I. HAMILTONIANA

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

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

onde  $p_i$  são os operadores momento de cada partícula,  $V_{ext}$  o potencial externo e  $V_{int}$  é o potencial de interação entre as partículas. O potencial de interação representa a interação entre dois corpos, e a razão disto será explicado depois. Introduzindo os operadores de campo bosônicos  $\Psi$ , com relações de comutação

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

podemos reescrever a hamiltoniana

$$H_0 = \int d^3r d^3r' \Psi^\dagger(r) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) + \Psi^\dagger(r') V_{int}(r, r') \Psi(r') \right) \Psi(r)$$

Vamos estudar as considerações que temos que fazer sobre os termos de potencial externo e de interação.

### A. Interações

Para chegar ao modelo de Bose-Hubbard, temos que fazer algumas considerações. Na condensação de Bose-Einstein (com temperaturas da ordem de  $T \sim 10^{-7}$  K) os únicos estados internos relevantes são os estados hiperfinos

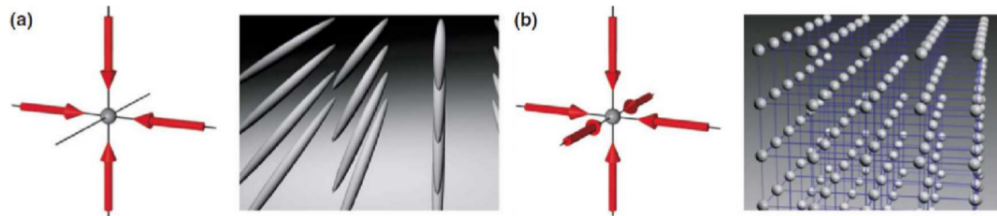


Figura. I: Representação de redes óticas 2D (a) e 3D (b) geradas pela interferência de dois ou três lasers contrapropagantes

\*amontanag@usp.br - USP:9572008

[3]. Agora, em um gás diluído o alcance das forças  $d$  interatômicas é muito menor que a distância média entre as partículas  $d \ll n^{-1/3}$  (com  $n$  a densidade do gás), e portanto colisões entre três ou mais corpos é desprezada. Esta é a razão para escrever o potencial de interação como de dois corpos na equação (1). O CBE é feito com bosons, neste caso com átomos alcalinos (neutros). A interação deste tipo de átomos 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, do tipo funcional  $-\alpha/r^6$  com  $r$  a distancia entre átomos.

O potencial interatômico pode ser caracterizado por um potencial de alcance curto ( $r_0$ ) e fazemos uma expansão da amplitude de espalhamento  $f(\theta)$  em ondas parciais, a qual depende do ângulo  $\theta$  e do vetor de onda  $\kappa$  [5].

Para energias muito baixas ( $\kappa r_0 \ll 1$ ) ondas tipo  $s$  são relevantes no espalhamento, então a condição de gás diluído pode se reescrever como  $na^3 \ll 1$  com  $a$  o *comprimento de espalhamento*.

Nestas condições se aproxima o potencial de interação como

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

Onde

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

## B. Redes óticas

O padrão de interferência de lasers contrapropagantes gera um potencial periódico em que átomos neutros podem ser aprisionados. A periodicidade deste potencial é determinada pelo comprimento de onda  $\lambda$  dos lasers e a interação do campo elétrico do laser com o momento de dipolo induzido, gera o confinamento dos átomos na rede. Então mudando os parametros do laser temos control no sistema. Variando a frequência do laser podemos atrair ou repelir cada átomo das regiões de intensidade maxima do laser, e variando a intensidade do laser temos uma profundidade do potencial ótico diferente. É comum utilizar frequências altas para evitar eventos de espalhamento gerados pela absorção e emissão espontâneas de fótons [6]. Um exemplo simples é um potencial de rede ótica

$$V_{ext} = V_0 \sum_{i=1}^3 \sin^2(kx_i)$$

Onde  $k = 2\pi/\lambda$  e com periodicidade  $\lambda/2$ . Esquemáticamente na Figura. I

## II. TIGHT-BINDING E FUNÇÃO DE WANNIER

A presença de um potencial periódico gera um ganho de fase na função de onda, enquanto que o espectro do sistema livre passa a ter regiões proibidas conhecidas como gaps de energia [1]. Então é necessário impor estas modificações. O hamiltoniano conmuta com  $T_d$  onde

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

com  $d$  o período do potencial.

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

Fazendo uso do teorema de Bloch [1], podemos reescrever

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

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 distancia  $d$ . Consideremos o caso de uma partícula com baixa energia ou um poço muito profundo do potencial. Neste caso esta estará relativamente localizada, e uma solução do tipo estacionário será uma boa descrição. No caso oposto, a partícula será quase-livre e a descrição de ondas planas é boa. O principal problema surge quando

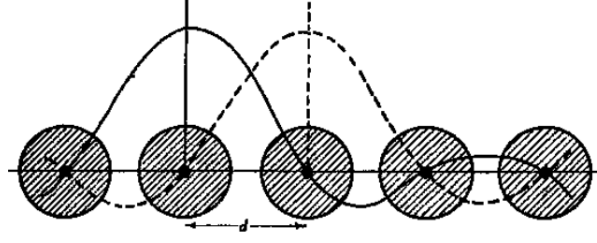


Figura. II: Funções de Wannier de sítios vizinhos

ocorre a transição de fase. Precisamos de uma descrição que é consistente com os dois resultados. 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

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

Onde  $N$  é o número de sítios da rede, e essas funções tem a propriedade de ser ortonormales

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

Estas funções, mostradas na Figura. II, são ideais para sistemas em que a localização espacial é importante.

### III. A HAMILTONIANA DE BOSE-HUBBARD

Com essas considerações, o problema agora é o estudo de um gás ultrafrio de bósons submetidos a um potencial periódico de rede óptica. O estudo do sistema é no regime de baixas temperaturas, a descrição tipo *tight-binding* é boa [8]. Agora, expandimos os operadores de campo na base de Wannier

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

sendo  $b_{n,i}$  e  $b_{n,i}^\dagger$  os operadores de aniquilação e criação de um partícula na banda  $n$  no sítio  $i$ . Fazemos outra aproximação: supor que as energias envolvidas na dinâmica são pequenas comparadas com a energia de excitação da segunda banda. O hamiltoniano fica

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

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

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

Onde  $J_{i,j}$  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). Por outro lado,  $U_{i,j,k,l}$  representa a interação entre as partículas dos sítios  $i, j, k, l$ . Neste caso consideramos que a interação interatômica e repulsiva e local,

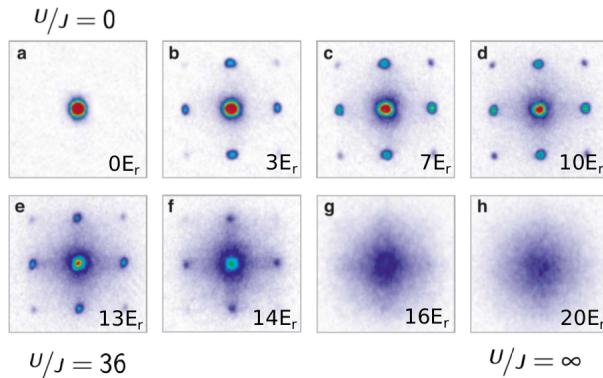


Figura. III: Experimento de interferência que mostra a transição de fase. SF  $\rightarrow$  MI [10]

então  $U = U_{i,j,k,l} \neq 0$ . Também temos que a possibilidade de tunelamento das partículas ocorre apenas entre sítios vizinhos  $J = J_{i,j} \neq 0$ . Por fim obtemos a hamiltoniana de Bose-Hubbard.

$$H_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i$$

em que o símbolo  $\langle i,j \rangle$  representa soma de primeiros vizinhos. No ensemble gran canônico e mais conveniente escrever a hamiltoniana, uma vez que nem todas as partículas serão afetados por os lasers de confinamento e então o intercambio de partículas não é desprezável

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i \quad (2)$$

#### IV. TRANSIÇÃO DE FASE

Variando a intensidade do laser, é possível variar a razão entre  $U$  e  $J$ . Assim, podemos induzir uma transição de fase na hamiltoniana de Bose-Hubbard, equação 2. Esta transição é conhecida como *transição de Mott*

- No caso  $J \gg U$  as partículas tunelam facilmente, o sistema está em um 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.

Na Figura. IV temos um resultado experimental que mostra a transição de fase superfluida até a fase isolante de Mott.

##### A. Fase Isolante de Mott e Superfluida

No caso externo  $J = 0$ , a energia do sistema pode se escrever em termos da energia 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  $\delta$ , a energia muda para

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

Esto significa que há uma penalidade energética por uma ocupação maior que uma partícula no sítio. O auto estado pode ser escrito como

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

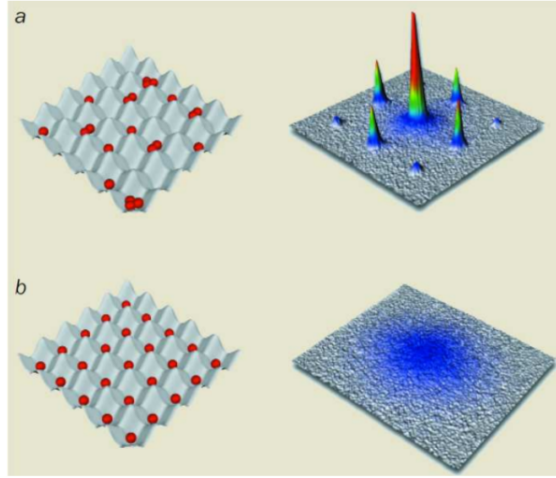


Figura. IV: Fases SF (a) e MI (b).

Para colocar uma partícula em um sítio o ganho de energia é  $(Un_i - \mu)$  e, para retirá-la, é  $-(U(n_i - 1) - \mu)$ , então variando o potencial químico, a densidade por sítio não muda. Neste caso ( $J=0$ )  $\partial n_i / \partial \mu = 0$  é chamado *incompressibilidade*. A Fase isolante de Mott é caracterizada pela *incompressibilidade*, e não pelo fato particular  $J = 0$ .

No caso  $U = 0$  as partículas tunelam sem custo energético. O auto estado pode ser escrito no espaço de momentos  $k$  como

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

Como não temos interação, esperamos que todos os  $M$  átomos se encontrem no estado de menor energia ( $k = 0$ ). Em cada termo um átomo terá uma probabilidade independente dos outros átomos da rede de estar em um sítio. No limite  $M$  e  $N$  grandes, temos uma distribuição de Poisson, como podemos ver na Figura. IV A.

No caso em que temos  $N$  sítios, cada um dos quais tem uma única partícula, ao adicionar uma partícula de mais, esta receberá uma penalidade pequena por se mover até um sítio vizinho, já que a energia de interação será a mesma em qualquer sítio da rede. Então um gás com um número não inteiro de bósons em cada sítio estará em uma fase superfluida à temperatura zero.

## B. Aproximação de Campo Medio

A teoria de campo medio que realizou Fisher [12] leva a um diagrama de fases qualitativamente correto, o qual delimita a fronteira entre a fase SF e MI. Utilizando o método de Monte Carlo quântico [9] é possível melhorar os valores correspondentes a estes limites. Vamos nos concentrar apenas no método de campo meio. Aproximamos um termo de dois corpos a uma interação efetiva. Para fazer a descrição da transição de fase no campo medio, consideramos a média das flutuações quânticas, o que é o mesmo, o possível tunelamento. O termo cinético vai se desacoplar como resultado. A aproximação é

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

então

$$\begin{aligned} b_i^\dagger b_j &= \langle b_i^\dagger \rangle b_j + \langle b_j \rangle b_i^\dagger - \langle b_i^\dagger \rangle \langle b_j \rangle \\ b_i^\dagger b_j &= \phi (b_i^\dagger + b_j) - \phi^2 \\ \phi &= \langle b_i^\dagger \rangle = \langle b_j^\dagger \rangle \end{aligned}$$

Onde  $\phi$  é um parâmetro de ordem para a transição, o qual é zero quando o sistema estiver em uma fase e diferente de zero na outra.

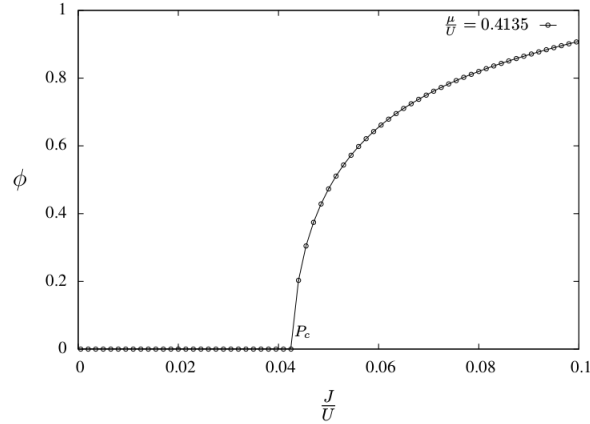


Figura. V: Parâmetro de ordem da transição de Mott.  $P_c = 0.043$  para o valor  $\mu/U = 0.4135$

A hamiltoniana de Bose-Hubbard pode se escrever como a soma de hamiltoniana de um sítio

$$\begin{aligned}
 H^{CM} &= -zJ\phi \sum_i (b_i^\dagger + b_i) + zNJ\phi^2 \\
 &\quad + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu n_i \\
 H_i^{CM} &= -zJ\phi(b_i^\dagger + b_i) + zJ\phi^2 + \frac{U}{2}n_i(n_i - 1) - \mu n_i
 \end{aligned}$$

Onde  $N$  é o número de sítios e  $z = 2d$  o número de primeiros vizinhos da rede, com  $d$  a dimensão do sistema. O diagrama de fase de um gás de bósons ultrafrios na rede ótica descrito pelo modelo de Bose-Hubbard nesta aproximação de campo medio foi obtido de maneira autoconsistente [9]. A partir do parâmetro de ordem  $\phi$  obtemos a hamiltoniana de campo medio  $H^{CM}$ , com esta hamiltoniana obtemos o estado fundamental, e finalmete com o estado fundamental melhoramos o valor  $\phi$ . O processo fecha quando o parâmetro de ordem obtido a partir do estado fundamental é igual ao que o sistema determina. Utilizando a base de número de ocupação  $|n\rangle$ , onde o problema se reduziu ao problema de um sítio independente dos outros, é conveniente escalonar a hamiltoniana

$$H^{CM} = -z\frac{J}{U}\phi(b^\dagger + b) + z\frac{J}{U}\phi^2 + \frac{1}{2}n(n - 1) - \frac{\mu}{U}n$$

O procedimento começa quando impomos un valor inicial para  $\phi$ , deixando dois os valores  $J/U$  e  $\mu/U$  a serem definidos. Agora diagonalizamos a hamiltoniana numa base truncada  $|N\rangle$  com  $N = 0, \dots, N_{max}$ . O estado fundamental de  $H^{CM}$  será

$$|G\rangle = \sum_{N=0}^{N_{max}} \alpha_N |N\rangle$$

onde os coeficientes  $\alpha_N$  correspondem ao valor menor da matriz que representa  $H^{CM}$ . Com base em este valor, obtemos  $\phi'$ , repetindo o procedimento até que o critério de autoconsistencia seja cumprido  $\phi' = \phi$

$$\phi' = \langle G|b^\dagger|G\rangle \quad (3)$$

Depois, é simples calcular a ocupação média por sítio com

$$\rho = \langle n \rangle = \sum_{N=1}^{N_{max}} |\alpha_N|^2 N \quad (4)$$

Um exemplo é Figura. IV B. Considerando uma rede quadrada bidimensional ( $z = 4$ ), obtemos a Figura. IV B. A região em que a fase Mott no diaframa é fechada com densidade constante e inteira. Cada região com densidade por sítio  $\rho$  constante é conhecida como *lobo de Mott*.

Nesta figura temos os primeiros tres lobos de Mott ( $\rho = 1, 2, 3$ ). Os pontos maiores (de esquerda a direita) são denominados *pontos críticos* e as regiões ao redor *regiões críticas* de transição [9].

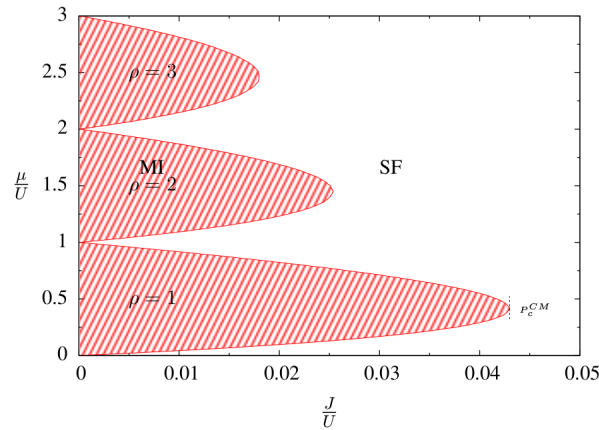


Figura. VI: Diagrama de fases obtido com campo medio ( $z = 4$ ). Três primeiros lobos de Mott (fundo hachurado), que são regiões na fase Mott (MI) bem delimitadas com um mesmo fator de preenchimento  $\rho$  inteiro. A fase superfluida (SF) é caracterizada por um  $\rho$  não inteiro.

## V. CONCLUSÕES

- O modelo de Bose-Hubbard basta para observar a transição de fase. Embora na literatura [9] os valores dos parâmetros de ordem são calculados com o método de Monte Carlo quântico, os resultados qualitativos são importantes para o entendimento do problema.
- O fator de preenchimento  $\rho = \langle n \rangle = 1, 2, 3..$  representa o sistema na fase Isolante de Mott (MI). Para  $\rho$  diferente, o sistema está na fase superfluida (SF).
- O laser controla os parâmetros do sistema. Basta variar a frequência e intensidade do laser.
- A rede óptica é útil para o estudo do sistemas análogos.

- 
- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, “Solid state physics”, Holt, Rinehardt and Winston (1976).
- [2] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, P. Zoller, “Cold bosonic atoms in optical lattices”, *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108 (1998).
- [3] C. J. Pethick, H. Smith, “Bose-Einstein condensation in dilute gases”, Cambridge University Press (2008).
- [4] I. Bloch, “Quantum gases in optical lattices”, *Physics World* 17, 25 (2004).
- [5] A. F. R. de Toledo Piza, Escola de verão em Física de muitos corpos com átomos frios bosônicos e fermiônicos.(2011). <http://www.fma.if.usp.br/piza/EFT/v11.pdf>
- [6] M. Greiner, Tese de Doutorado: “Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials”, [http://greiner.physics.harvard.edu/PDF20Files/PhD\\_greiner.pdf](http://greiner.physics.harvard.edu/PDF20Files/PhD_greiner.pdf).
- [7] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch, I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms”, *Nature (London)* 415, 39 (2002).
- [8] J. M. Ziman, “Principles of the theory of solid”, Cambridge University Press (1972).
- [9] 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.
- [10] Cazalilla, M. A. and Citro. One dimensional bosons: From condensed matter systems to ultracold gases. *RevMod-Phys.*83.1405
- [11] Henrik Bruss. Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An introduction. Oxford Graduate Texts. 2004
- [12] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, D.S. Fisher, "Boson localization and the superfluid-insulator transition", *Phys. Rev. B* 40,546 (1989)