

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Tese de Doutorado

Dinâmica de bósons de spin 1 em poços múltiplos
(Dynamics of spin-1 bosons in multiple wells)

David William Sabino Carvalho

Orientador: Prof. Miguel A. C. Gusmão
Coorientadora: Profa. Angela Foerster

Porto Alegre
Novembro/2020

Este trabalho é dedicado

aos meus pais,
Jaqueline M. Sabino e Ricardo P. Carvalho,
pela intensa dedicação e a incessante motivação ao longo
da minha vida. Minha eterna gratidão por todo o apoio,
carinho e cuidado.

Agradecimentos

★ Ao orientador **Miguel A. C. Gusmão**, por estar sempre disposto a conversar, por ter cedido diversas opiniões e ajudas que contribuíram na construção deste trabalho. À coordenadora **Angela Foerster**, por ter sanado inúmeras dúvidas, pela dedicação e paciência demonstrada durante este período. Sinto-me muito lisonjeado e grato por ter dividido esse tempo com ambos, não só pelo crescimento profissional mas também pelo crescimento pessoal atingido através de inúmeros conselhos. São pessoas extremamente talentosas e gentis que, para mim, servem de modelo para o futuro.

★ Ao meu irmão, **Miguel N. Carvalho**, que neste momento tem apenas 6 anos e me traz tantas alegrias. Espero que quando cresceres também te tornes extremamente apaixonado por pesquisar, descobrir, e obter sempre mais conhecimento, independente da área que escolheres. À **Beatriz N. Carvalho**, por todo carinho e preocupação.

★ À **Débora T. Carraro** por ter me incentivado, dado suporte em todos os momentos, bons e ruins, por todo carinho e paciência que me estimularam a perseguir este sonho.

★ Aos colegas da universidade que contribuíram através inúmeras discussões, em especial **Rafael Barfknecht, Karin Wilsmann e Diefferson Lima**.

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

Sou extremamente grato por ter estado ao lado de todos vocês durante todo este período. Muito Obrigado!!!

★ O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001 - e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Resumo

Neste trabalho, estudamos a dinâmica de bósons de spin 1 em potenciais de poço duplo ou triplo. Temos por base o modelo de Bose-Hubbard, muito utilizado para o estudo teórico de átomos ultrafrios confinados em potenciais ópticos. Esse modelo leva em conta o tunelamento das partículas entre os poços e uma interação repulsiva local. Para bósons de spin não nulo, a extensão aqui considerada introduz uma interação local que favorece alto ou baixo spin total em um poço, dependendo do sinal da constante de acoplamento. A matriz do hamiltoniano é construída em uma base apropriada e diagonalizada numericamente, determinando-se os seus autovalores e autovetores. Processos de evolução temporal a partir de diferentes estados iniciais são estudados em função dos parâmetros de controle, escolhidos como a interação dependente de spin e as profundidades relativas dos poços. Especial atenção é dada ao modelo de três poços em configuração linear, usando a variação da energia do poço central como equivalente ao efeito de um potencial de porta em um transistor de efeito de campo. Para este caso, são determinadas diversas condições sobre os parâmetros do sistema para que exista fluxo de partículas entre os poços laterais, controlado pelas características do poço central. Também exploramos as condições para a existência de dinâmica ressonante na presença de um campo magnético constante aplicado no poço central. Finalmente, permitimos que a intensidade do campo magnético varie no tempo para controlar o período de oscilação do fluxo de partículas entre os poços laterais.

Abstract

In this work, we study the dynamics of spin-1 bosons in a double- or triple-well potential. Our approach is based on the Bose-Hubbard model, widely used for the theoretical study of ultracold atoms confined in optical potentials. The model takes into account particle tunneling between wells, and a local repulsive interaction. For bosons of non-zero spin, the extension considered here introduces a local interaction that favors high or low total spin in a well, depending on the sign of the coupling-constant. The Hamiltonian matrix is built on a suitable basis, and numerically diagonalized, determining its eigenvalues and eigenvectors. Time-evolution processes from different initial states are studied as a function of control parameters, chosen as the spin-dependent interaction and relative well depths. Special attention is given to the case of three wells in linear configuration, using the variation of the central-well energy as an equivalent to the effect of a gate potential in a field-effect transistor. For this case, various conditions on the system parameters are determined for the existence of particle flow between the lateral wells, controlled by the characteristics of the central well. We also explore the energy conditions for resonant dynamics in the presence of a static magnetic field applied in central well. Finally, we allow the magnetic-field intensity to vary in time in order to control the time of particle flow back and forth between the end wells.

Sumário

1. Introdução	1
2. Modelo e Metodologia	6
2.1 Estados quânticos	7
2.2 Dinâmica quântica	9
3. Dinâmica em sistemas de dois poços	10
3.1 Bósons sem spin	10
3.2 Duas partículas de spin 1	13
3.3 Três partículas de spin 1	19
4. Dinâmica em sistemas de três poços	25
4.1 Uma partícula no poço esquerdo ($n_T = 2$)	25
4.2 Duas partículas no poço esquerdo ($n_T = 3$)	27
4.3 Três poços com campo magnético estático	31
4.4 Três poços com campo magnético variável	36
5. Conclusões	42
Apêndice A	45
Apêndice B	50
Referências Bibliográficas	53

Lista de Figuras

1.1	Formação do Condensado de Bose-Einstein	2
1.2	Diagrama dos níveis de energia para ^{87}Rb	3
2.1	Dimensão da base para o modelo de três poços	8
3.1	(a) Amplitude c_i de cada componente de oscilação da Eq. (3.5) como função da amplitude de tunelamento normalizada pela interação de Hubbard. (b)Evolução temporal da probabilidade de encontrar duas partículas no poço direito para dois diferentes regimes de tunelamento. Note que as escalas temporais dos dois processos diferem por um fator 10.	12
3.2	Frequência do tunelamento de pares para os casos sem spin e com spin com $s_T = 0, 2$ (a); diferença de população ($\langle NI \rangle$) para o caso de $s_T = 2$ (b) e $s_T = 0$ (c).	15
3.3	Processos de tunelamento para um estado inicial com duas partículas no poço esquerdo.	16
3.4	Máximos dos valores esperados do número de partículas no poço da direita $M(N_R)$ para o estado inicial $ \{2, 0\}, \{2, 0\}, 2\rangle$ (a) e $ \{2, 0\}, \{0, 0\}, 0\rangle$ (b).	17
3.5	Probabilidades dos estados e valor esperado do número de partículas nos poços como função do tempo para o estado inicial é $ \{2, 0\}, \{2, 0\}, 2\rangle$ com $J = 0.05$, $U' = 0.2$, nos casos $\epsilon_R = 1$ (esquerda) e $\epsilon_R = 2.2$ (direita).	18
3.6	As funções de correlação de spin entre os poços têm valores positivos para o estado inicial com $s_T = 2$ (painel esquerdo) e negativos se $s_T = 0$ (painel direito), passando por um valor absoluto máximo quando se tem uma partícula em cada poço.	19
3.7	Processos de tunelamento para um estado inicial com três partículas no poço esquerdo.	20
3.8	Probabilidades dos estados em função do tempo para $s_T = 3$	21

3.9	Máximos dos valores esperados do número de partículas no poço da direita $M(N_R)$ para o estado inicial $ \{3, 0\}, \{3, 0\}, 3\rangle$ (a) e $ \{3, 0\}, \{1, 0\}, 1\rangle$ (b).	22
3.10	Probabilidades dos estados em função do tempo para $s_T = 3$	24
4.1	Representação esquemática do estado inicial com uma partícula no poço esquerdo e uma no poço central.	26
4.2	Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita ($M(N_R)$) para os estados iniciais $ \{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 0\rangle$ (a), $ \{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 1\rangle$ (b) e $ \{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 2\rangle$ (c).	27
4.3	Representação esquemática do estado inicial com três partículas em três poços.	27
4.4	Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita ($M(N_R)$) para os estados iniciais $ \{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 3\rangle$ (a), $ \{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 2\rangle$ (b), $ \{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 1\rangle$ (c) e $ \{2, 1, 0\}, \{0, 1, 0\}, 1\rangle$ (d).	28
4.5	Valor esperado do número de partículas no poço da direita (a) para o estado inicial $ \{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 3\rangle$ juntamente com as funções de probabilidade (b), onde $J = 0.01$, $\epsilon_C = -0.2$ e $U' = 0.2$	29
4.6	Valor esperado do número de partículas no poço da direita ($M(N_R)$) e probabilidades em tempos curtos para o estado inicial $ \{2, 1, 0\}, \{0, 1, 0\}, 1\rangle$, com $J = 0.01$, $U' = -0.3$ e $\epsilon_C = 0.1$	30
4.7	Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita, M_R , para $\epsilon_C = 0.3$	32
4.8	Probabilidades dos estados indicados em função do tempo para o estado inicial $ \downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$, para $B_z = 1.34$ (a) e $B_z = 0.3$ (b).	33
4.9	Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita (M_R) para o estado inicial $ \uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, e $\epsilon_c = 0.3$	33
4.10	Probabilidades dos estados da base e valores esperados dos $\langle S_i^2 \rangle$ para o estado inicial $ \uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$	34
4.11	Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita ($M(N_R)$) para os estados iniciais $ \downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ (a), $ \uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ (b), $ \uparrow, \uparrow, \emptyset\rangle$ (c), $ \downarrow, \uparrow, \emptyset\rangle$ (d), com $J = 0.005$, e $\epsilon_c = 0.3$, numa região de U' próximos aos valores de ^{23}Na e ^{87}Rb	35

4.12	Variação temporal da intensidade do campo magnético (a), probabilidades dos estados indicados (b), e valor esperado do número de partículas em cada poço (c) para o estado inicial $ \downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$, com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$ e $B_z = 1.34$	37
4.13	Intensidade do campo magnético (a), probabilidades dos estados envolvidos (c), e valor esperado do número de partículas nos poços (c), para o estado inicial $ \downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$ e $B_z = 1.34$ nos intervalos em que é não nulo.	38
4.14	Mudança da intensidade do campo magnético de $B_z = -1.34$ para zero (a), com as conseqüentes evoluções temporais das probabilidades dos estados envolvidos (b) e do valor esperado do número de partículas em cada poço (c) para o estado inicial $ \uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$, com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$	39
4.15	Variações da intensidade do campo magnético (a), com $B = -1.34$ no primeiro platô não nulo e $B_z = -1.22$ no segundo. Variações correspondentes nas probabilidades dos estados da base (b) e valor esperado do número de partículas em cada poço (c) para o estado inicial $ \uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$, com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$	40
4.16	Variação temporal do campo magnético (a), do valor esperado do quadrado do spin total e de cada poço (b) para o estado inicial $ \uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$, $B_z = -1.34$ no primeiro platô não nulo e -1.22 no segundo.	41

Lista de Tabelas

A.1	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 0$	46
A.2	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 1$	47
A.3	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 2$	47
A.4	Autovetores de \mathbf{S}_L^2 para $N_L = 3$	48

Capítulo 1

Introdução

Há várias décadas, fenômenos que ocorrem a baixa temperatura intrigam e motivam inúmeros pesquisadores devido à possibilidade de observar manifestações macroscópicas da natureza quântica da matéria. Neste contexto, destaca-se a descoberta de uma fase denominada *Condensado de Bose-Einstein* (CBE), cuja previsão teórica foi feita em 1925 por A. Einstein [1,2], generalizando para partículas massivas as ideias de S. N. Bose sobre a estatística quântica de fótons [3].

Einstein deduziu que, resfriando-se um conjunto de partículas bosônicas abaixo de uma temperatura crítica (T_c), uma fração macroscópica dessas partículas passa a ocupar o estado fundamental, o que caracteriza a condensação de Bose-Einstein. Podemos descrever essa fase para um gás de átomos utilizando um argumento simples, apresentado por W. Ketterle [4]. Para altas temperaturas, os átomos fracamente interagentes do gás comportam-se como partículas clássicas, colidindo uns com os outros. À medida que o gás é resfriado, o comprimento de onda de de Broglie dos átomos aumenta, ficando da ordem da distância média entre eles quando se atinge a temperatura crítica. Assim, as funções de onda de uma grande parcela de átomos se entrelaçam, formando o CBE.

Embora esse fenômeno tenha sido predito no início do século XX, foi necessário diversos avanços tecnológicos nas técnicas de resfriamento e de aprisionamento de tal forma que a realização experimental só foi possível em 1995, quando os experimentos atingiram temperaturas da ordem de 10^{-6} K, temperatura crítica (T_c) para formação do CBE. A realização experimental de condensados de Bose-Einstein a partir de gases atômicos diluídos [5–7] é um dos maiores sucessos recentes em física, e fez florescer uma intensa atividade de pesquisa nessa área nos últimos anos. Uma das linhas principais nessa pesquisa envolve sistemas de átomos ultrafrios aprisionados em uma rede óptica, isto é, um potencial periódico obtido através de padrões estacionários de interferência de lasers. Este mecanismo permite a criação de redes das mais variadas formas e tamanhos possibilitando a simulação de sis-

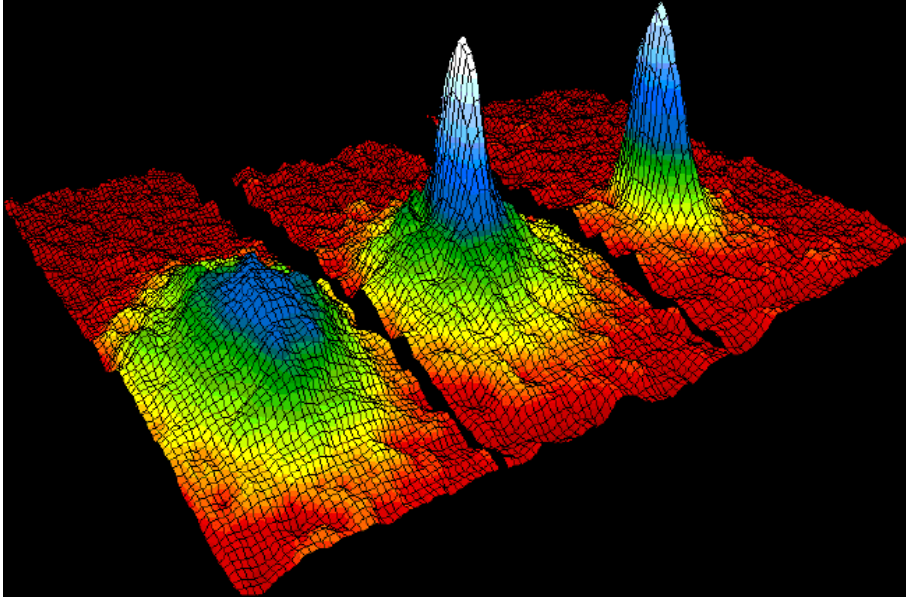


Fig. 1.1: Visualização da formação do Condensado de Bose-Einstein visto através do aumento na densidade de distribuição de velocidades para partículas menos energéticas, identificadas nas figuras pelo pico em cor clara. Na figura da esquerda temos a nuvem de partículas antes da formação do Condensado onde o sistema está a uma temperatura maior que a crítica, na figura central temos um aumento do número de partículas em baixa velocidade atingido a temperatura crítica do sistema, e por último, o CBE num estado quase puro onde todas quase todas partículas estão ocupando o estado fundamental do sistema. Figura extraída de Cornell et al. [11].

temas unidimensionais e bidimensionais. Esses “sólidos artificiais” oferecem uma ampla gama de controle experimental. Por exemplo, a intensidade da interação entre os átomos, sua mobilidade (por tunelamento entre poços de potencial vizinhos na rede) e sua densidade podem ser ajustadas independentemente [8]. Em vista disso, redes ópticas podem ser usadas para teste de modelos que antes só podiam ser aplicados a sistemas de matéria condensada, nem sempre de forma realista, sendo classificados como plataforma ideal para simulações quânticas [9–11].

Dentre os modelos teóricos utilizados para o estudo de redes ópticas destaca-se o modelo de Hubbard [12], tanto em sua forma original, proposta para sistemas eletrônicos de estado sólido e diretamente aplicável a redes de átomos fermiônicos, quanto a sua versão bosônica, conhecida como modelo de Bose-Hubbard descrito pelo seguinte hamiltoniano [13]:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{U}{2} N_i(N_i - 1) + \epsilon_i N_i \right] - J \sum_{i=1}^{N-1} \left(C_{i+1}^\dagger C_i + C_i^\dagger C_{i+1} \right). \quad (1.1)$$

O primeiro termo desta equação descreve a interação local entre os bósons de um mesmo sítio, que pode ser atrativa ($U < 0$) ou repulsiva ($U > 0$) onde N_i é o operador número de partículas no i -ésimo poço, já o ϵ_i quantifica a intensidade da energia do (único) estado ligado no poço e J a intensidade da energia de tunelamento associada ao sistema. Este modelo, embora simples, é capaz de capturar efeitos como oscilações de Josephson e auto-aprisionamento [14] e continua sendo base para diversas pesquisas atuais [15–17].

Embora o foco inicial tenha sido em bósons sem spin (ou com graus de liberdade de spin congelados em confinamentos magnéticos), já existem realizações experimentais de BECs espinoriais, por exemplo, com átomos de ^{23}Na [18] ou ^{87}Rb [19], que têm o estado fundamental com spin hiperfino $F = 1$ [20] (ver Fig. 1.2). Esses progressos experimentais estimularam estudos de modelos teóricos relacionados [21–35]. Outra característica importante de tais sistemas é a capacidade de isolar poucos átomos em poucos poços [36–43], gerando a possibilidade de construir sistemas de poucas partículas [44–47].

Em particular, o comportamento de bósons de spin 1 em um poço duplo pode ser descrito por uma variante do hamiltoniano de Bose-Hubbard para dois sítios, [48] incluindo

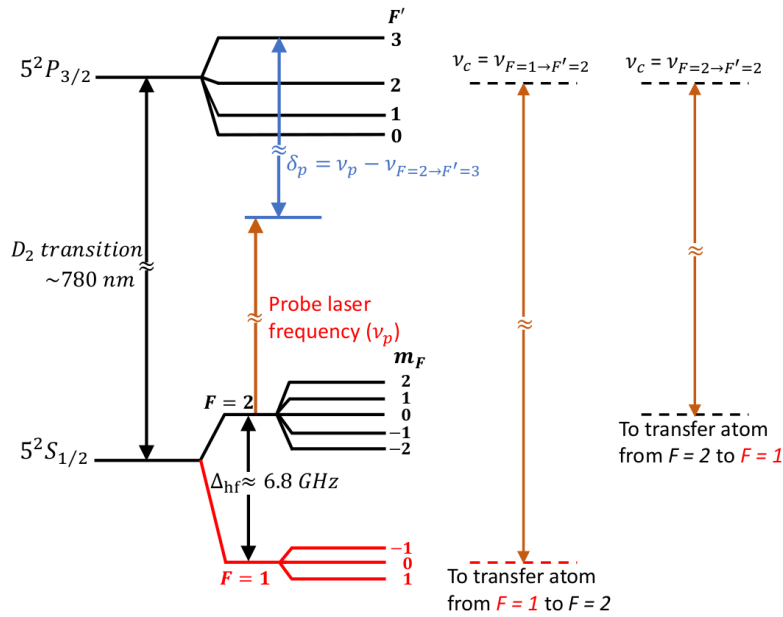


Fig. 1.2: Diagrama dos níveis de energia para ^{87}Rb . Os dois estados fundamentais ($F = 1$ e $F = 2$) diferem por uma energia de aproximadamente 6.8 GHz. Figura extraída de Swar et al. [20].

uma interação dependente de spin [26,34]. Em nosso trabalho de mestrado [49], analisamos os estados quânticos desse modelo, com ênfase nos efeitos da interação dependente de spin e correlações de spin entre os poços. Aqui, nossa atenção se volta para aspectos dinâmicos nesse modelo, com dois ou três poços. A motivação é, em grande parte, o recente interesse no que se convencionou chamar “atomtrônica” (*atomtronics*) [50–52].

O campo emergente da atomtrônica visa a construir análogos de componentes e dispositivos eletrônicos utilizando sistemas de átomos ultrafrios. Uma das principais motivações para isso vem da constatação de que tais sistemas têm os ingredientes necessários para serem componentes básicos de processadores quânticos, tendo em vista os aspectos listados a seguir.

1. Uma rede óptica fornece um ambiente limpo e controlável para componentes atomtrônicos, pois imperfeições, como defeitos de rede ou fônons podem ser completamente eliminadas. Portanto, realizações experimentais no campo da atomtrônica prometem ser extremamente limpas.
2. Sistemas atomtrônicos são mais ricos do que os seus equivalentes eletrônicos porque os átomos possuem mais graus de liberdade internos que os elétrons, e podem ser usados átomos fermiônicos ou bosônicos. Além disso, as interações entre os átomos podem ser variadas entre curto a longo alcance, fortes e fracas, dependentes de spin ou não.
3. Ao contrário do comportamento típico dos seus análogos eletrônicos, dispositivos atomtrônicos operam com poucas partículas.
4. As técnicas experimentais atuais permitem a detecção de átomos com grande eficiência, e seleção por estado quântico. Assim, é possível, em princípio, monitorar a dinâmica de um sistema atomtrônico em tempo real. Essa dinâmica é descrita teoricamente com precisão a partir do modelo de Bose-Hubbard e suas extensões.

Fica claro que tal tipo de aplicação está fortemente baseado em processos dinâmicos ocorrendo em sistemas de átomos opticamente confinados em conjuntos de poços de potencial. Dessa forma, os estudos que estamos desenvolvendo neste contexto podem dar informações relevantes para a pesquisa nessa área. Em particular, a ênfase nos efeitos de spin, considerando o interesse atual na *spintrônica* como complementar à eletrônica, pode levar à sugestão de que poderíamos chegar a uma *atom-spintrônica* em um futuro próximo.

Desta forma, no Capítulo 2 deste texto, apresentamos o modelo a ser utilizado, que é uma variante do modelo de Bose-Hubbard, incluindo uma interação dependente de spin na forma proposta na Ref. [26], discutimos a diagonalização do hamiltoniano e o cálculo de quantidades dependentes do tempo. Nosso interesse será basicamente a evolução temporal da ocupação dos poços e da correlação de spin entre eles, a partir de determinadas situações iniciais. Os resultados para vários casos típicos são apresentados no Capítulo 3, começando com um sistema de dois poços escolhemos diferentes estados iniciais explorando quais condições dos parâmetros do hamiltoniano que intensificam a dinâmica do sistema. No Capítulo 4, repetimos o processo para três poços na geometria equivalente à de um transistor de efeito de campo na eletrônica de semicondutores, e por último, incluímos o efeito de um campo externo verificando sua influência como agente controlador da dinâmica. O Capítulo 5 apresenta as conclusões e algumas perspectivas de novas investigações a partir deste estudo.

Capítulo 2

Modelo e Metodologia

Neste capítulo, apresentamos um modelo que descreve bósons de spin 1 em múltiplos poços de potenciais separados por barreiras finitas. Para isto, seguindo a Ref. [26], usaremos uma extensão do modelo de Bose-Hubbard, que é construída adicionando-se um termo de interação dependente do estado de spin entre os bósons que ocupam o mesmo poço. Considerando um sistema de N poços em linha (geometria aberta), o hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\epsilon_i N_i + \frac{U}{2} N_i(N_i - 1) + \frac{U'}{2} (\mathbf{S}_i^2 - 2N_i) \right] - J \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{\sigma=-1}^1 \left(C_{i+1,\sigma}^\dagger C_{i,\sigma} + C_{i,\sigma}^\dagger C_{i+1,\sigma} \right), \quad (2.1)$$

onde $C_{i,\sigma}^\dagger$ e $C_{i,\sigma}$ são, respectivamente os operadores de criação e aniquilação de um bóson no i -ésimo poço, em um estado caracterizado pelo valor σ da componente z do seu spin (em unidades de \hbar); J é a energia associada ao tunelamento entre poços vizinhos; $N_i \equiv \sum_{\sigma} N_{i,\sigma}$ e \mathbf{S}_i são os operadores associados ao número de bósons e spin total no poço i , respectivamente, sendo $N_{i,\sigma} = C_{i,\sigma}^\dagger C_{i,\sigma}$; ϵ_i é a energia do (único) estado ligado no poço i ; U é a energia de interação repulsiva (Hubbard) entre dois bósons que se encontrem no mesmo poço; e U' é a energia associada à interação dependente de spin: $U' < 0$ (> 0) favorece o estado de máximo (mínimo) spin local. Deve-se notar que os termos de interação só são não nulos se houver mais de uma partícula no poço.

Os operadores de spin total de cada poço podem ser construídos com operadores bosônicos na forma

$$\mathbf{S}_i = \sum_{\sigma\sigma'} C_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{T}_{\sigma\sigma'} C_{i,\sigma'}, \quad (2.2)$$

sendo $\mathbf{T} = T_x \hat{\mathbf{x}} + T_y \hat{\mathbf{y}} + T_z \hat{\mathbf{z}}$, em termos das matrizes usuais que descrevem as componentes

cartesianas do spin, com dimensão $(2S+1)$ para bósons de spin S (vamos utilizar a notação S , mais usual para spins, embora se trate efetivamente do spin hiperfino de um átomo). A Eq. (2.2) define operadores de spin adimensionais, diferindo por um fator \hbar em relação a um spin *físico*, o que é consistente com o fato de considerarmos U' como uma energia na Eq. (2.1).

O hamiltoniano (2.1) comuta com o número total de partículas, $N_T = \sum_i N_i$, com o spin total do sistema, $\mathbf{S}_T = \sum_i \mathbf{S}_i$, e com uma de suas componentes (que escolhemos como z), isto é,

$$[H, N_T] = 0, \quad [H, \mathbf{S}_T^2] = 0, \quad [H, S_T^z] = 0. \quad (2.3)$$

Portanto, essas grandezas são conservadas, e seus autovalores, que denotamos com letras minúsculas, n_T , $s_T(s_T+1)$ e s_T^z , fornecem números quânticos para especificar os autoestados de energia.

Da mesma forma, associamos números quânticos $n_{i,\sigma}$, s_i e s_i^z aos autovalores das quantidades correspondentes a um dado poço. Além disso, deve-se ter em conta que os possíveis valores do spin total em cada poço são obtidos pelas regras usuais de acoplamento de momenta angulares aplicada ao número de bósons de spin S que estiver presente no poço. Em todo este trabalho, vamos considerar apenas bósons de spin 1, de forma que cada bóson poderá ter $s^z = 1, 0, -1$.

Cabe observar que as regras de acoplamento de spins e o caráter bosônico das partículas geram uma condição restritiva sobre o valor do spin total para um número definido de bósons em um poço, que pode ser escrita como [53]

$$s_i + n_i = 2k, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4)$$

2.1 Estados quânticos

Para números pequenos de poços e de partículas, o estudo da dinâmica do sistema pode ser feito através da diagonalização exata do hamiltoniano. Fixando o número de poços e escolhendo um número de partículas, o fato de que o spin total é conservado implica em que o hamiltoniano pode ser colocado em uma forma diagonal por blocos, sendo cada bloco associado a um autovalor de spin total. Isso permite considerar subespaços de spin total definido.

A base natural para construir o hamiltoniano é formada pelos autoestados de energia na ausência de tunelamento ($J = 0$). Esses estados têm números de partículas definidos em

cada poço, e podem ser construídos com spins totais também definidos em cada poço, que geram os possíveis valores do spin total do sistema. Para os estados dessa base, utilizamos a notação

$$| \{n_1, n_2, \dots, n_N\}, \{s_1, s_2, \dots, s_N\}, s_T \rangle . \quad (2.5)$$

Existem $(2s_T + 1)$ estados degenerados, identificados pelo autovalor s_T^z , embora ele não tenha sido incluído na notação. Na prática, considerando que a componente z do spin total continua conservada mesmo incluindo o termo de tunelamento, pode-se trabalhar em um subespaço de s_T^z definido. A base acima é apropriada para o subespaço de $s_T^z = 0$, que existe para qualquer valor de s_T .

Para dar uma ideia do tamanho das matrizes de representação do hamiltoniano no subespaço de $s_T^z = 0$, exemplificamos com o caso de três poços. Para duas partículas, a base é composta por 15 vetores. Já para $n_T = 3$, o número sobe para 33 estados. A Fig. (2.1) mostra como varia a quantidade de estados em função do número de partículas de spin 1 (até $n_T = 6$). Para comparação, a figura inclui o número completo de estados (todos os possíveis valores de s_T^z) e o caso de bósons sem spin. Este último é equivalente (quanto ao tamanho da base) ao subespaço associado ao máximo valor de s_T^z para qualquer spin das partículas. Embora a diagonalização numérica tenha o apelo de ser um método essencialmente exato, fica claro que a sua aplicabilidade prática é limitada a sistemas de poucas partículas.

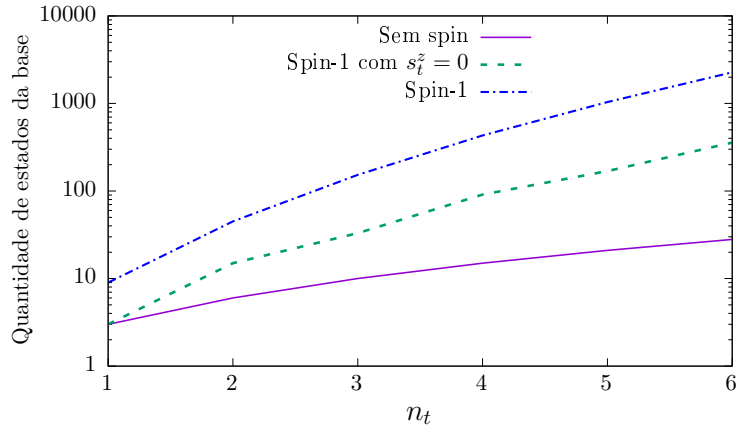


Fig. 2.1: Dimensão da base para o modelo de três poços em função do número de partículas, para o caso de spin 0, spin 1 no subespaço $s_T^z = 0$ e spin 1 completo.

2.2 Dinâmica quântica

Uma vez definida a base, a matriz que representa o hamiltoniano é explicitamente construída e diagonalizada numericamente, obtendo-se os autovalores e autovetores para cada conjunto de valores dos parâmetros do modelo, $\{\epsilon_i, U, U', J\}$. Tem-se, então, que o operador evolução temporal é dado por

$$U(t) = \sum_j e^{-iE_j t} |\phi_j\rangle \langle \phi_j|, \quad (2.6)$$

onde os E_j são os autovalores de energia e $|\phi_j\rangle$ os correspondentes autovetores. Assim, a evolução temporal do vetor de estado do sistema, a partir de um determinado estado inicial $|\psi(0)\rangle$, é dada por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j e^{-iE_j t} |\phi_j\rangle, \quad c_j = \langle \phi_j | \psi(0) \rangle. \quad (2.7)$$

Conhecido o vetor de estado em qualquer instante, podemos calcular os valores médios de quantidades físicas em função do tempo. Estaremos interessados na evolução temporal do número médio de partículas em um determinado poço, $\langle N_i \rangle$, e as correlações de spin entre poços, $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$. Como essas quantidades são expressas em termos de operadores de criação e aniquilação de partículas em um determinado poço e com uma determinada projeção de spin individual, o que também acontece com o termo de tunelamento do hamiltoniano, é necessário decompor os estados da base definida pela Eq. (2.5) em combinações de estados de uma base que especifique as últimas quantidades mencionadas, isto é, que indique quantas partículas existem em cada poço com cada uma das possíveis projeções do spin. Os vetores desta base podem ser representados na forma

$$|n_1^{\sigma_1}, n_1^{\sigma_2}, \dots; n_2^{\sigma_1}, n_2^{\sigma_2}, \dots; \dots; n_N^{\sigma_1}, n_N^{\sigma_2}, \dots\rangle, \quad (2.8)$$

onde σ_i é um dos autovalores de S^z para uma partícula. A decomposição de vetores da base (2.5) em vetores da base (2.8) é exemplificada no Apêndice, para o caso de duas partículas em dois poços.

Os programas utilizados para os cálculos numéricos neste trabalho foram escritos em Fortran 90, compilados com o Intel[®] Fortran Compiler, e utilizam as rotinas de diagonalização de matrizes que fazem parte do pacote Intel[®] Math Kernel Library.

Capítulo 3

Dinâmica em sistemas de dois poços

Neste capítulo apresentamos um estudo da dinâmica de evolução temporal do modelo (2.1) para duas e três partículas em dois poços, a partir de diferentes estados iniciais e diferentes conjuntos de parâmetros do hamiltoniano. Os resultados contidos neste capítulo foram objeto de uma publicação [54].

Por simplicidade, todos os valores numéricos de energias serão expressos em unidades de U , a interação repulsiva local, o que equivale a usar valores puramente numéricos em uma escala na qual $U = 1$. Lembrando que spins são medidos em unidades de \hbar , temos, na prática, um sistema de unidades com $\hbar = 1$. Então, a unidade de tempo corresponde fisicamente a \hbar/U . Estudaremos o regime de tunelamento fraco, escolhendo o parâmetro J , na maioria dos casos, duas ordens de grandeza menor que U .

Para um sistema de dois poços, a notação com índices numéricos da Eq. (2.1) pode ser substituída pelos índices L (*left*) e R (*right*). Em todos os casos estudados consideramos bósons de spin 1, mas antes, é conveniente analisarmos algumas peculiaridades do caso sem spin.

3.1 Bósons sem spin

A dinâmica de poucos bósons sem spin foi extensamente estudada nas referências [55–58], onde foram explorados alguns aspectos que discutiremos nesta seção. A análise deste caso pode ser feita escolhendo $U' = 0$ na Eq. (2.1), retomando assim o modelo de Bose-Hubbard usual. Neste caso, soluções analíticas dos valores esperados de algumas quantidades físicas necessárias para a descrição da evolução temporal são facilmente obtidas, pelo menos para uma e duas partículas. Além disso, deve-se eliminar os números quânticos associados ao spin na notação (2.5). Portanto, usaremos estados da base que especificam apenas o número de partículas em cada poço $|N_L, N_R\rangle$.

Na dinâmica de um modelo de dois poços contendo apenas uma partícula sem spin, o espaço de Hilbert tem dimensão dois, e a base é composta pelos vetores $|1, 0\rangle$ e $|0, 1\rangle$. Esses estados estão conectados pelo termo de tunelamento no hamiltoniano (2.1), gerando os elementos fora da diagonal principal na matriz de representação do hamiltoniano,

$$[H] = \begin{pmatrix} \epsilon_L & -J \\ -J & \epsilon_R \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Refletindo a conservação de energia, a transição entre esses dois estados é favorecida pela redução da diferença entre as energias locais, sendo maximizada na ausência de *bias*, ou seja, $\epsilon_L - \epsilon_R = 0$. Nesse regime, se iniciarmos o sistema com a partícula no poço esquerdo (estado inicial: $|1, 0\rangle$) e com $\epsilon_L = \epsilon_R = 0$, a probabilidade de encontrá-la no poço direito, como função do tempo, é dada por

$$|\langle 0, 1 | \mathcal{T}(t) | 1, 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} [1 - \cos(2Jt)], \quad (3.2)$$

onde $\mathcal{T}(t) = \exp(iHt)$ é o operador de evolução temporal. Observamos que a probabilidade de encontrar a partícula em cada poço oscila com frequência angular $2J$ (frequência J/π).

Para duas partículas, o espaço de Hilbert tem sua dimensão aumentada em uma unidade em comparação ao caso anterior, podendo-se escolher uma base composta pelos estados $|2, 0\rangle$, $|0, 2\rangle$, e $|1, 1\rangle$. Os estados com um dos poços duplamente ocupado são conectados ao estado de uma partícula em cada poço através do termo de tunelamento, gerando termos não diagonais $-\sqrt{2}J$ na matriz de representação do hamiltoniano,

$$[H] = \begin{pmatrix} U + 2\epsilon_L & -\sqrt{2}J & 0 \\ -\sqrt{2}J & \epsilon_L + \epsilon_R & -\sqrt{2}J \\ 0 & -\sqrt{2}J & U + 2\epsilon_R \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Na ausência de bias ($\epsilon_L = \epsilon_R = 0$) e usando como estado inicial ambas as partículas no poço esquerdo ($|2, 0\rangle$), a probabilidade $P_{1,1}$ de encontrá-las em poços separados ($|1, 1\rangle$) como função do tempo é

$$P_{1,1}(t) = |\langle 1, 1 | \mathcal{T}(t) | 2, 0 \rangle|^2 = \frac{4J^2}{\alpha^2} [1 - \cos(\alpha t)], \quad (3.4)$$

onde $\alpha = \sqrt{U^2 + 16J^2}$. Cabe notar que, além da frequência, a amplitude de oscilação também depende dos parâmetros de tunelamento e interação. Para as mesmas condições,

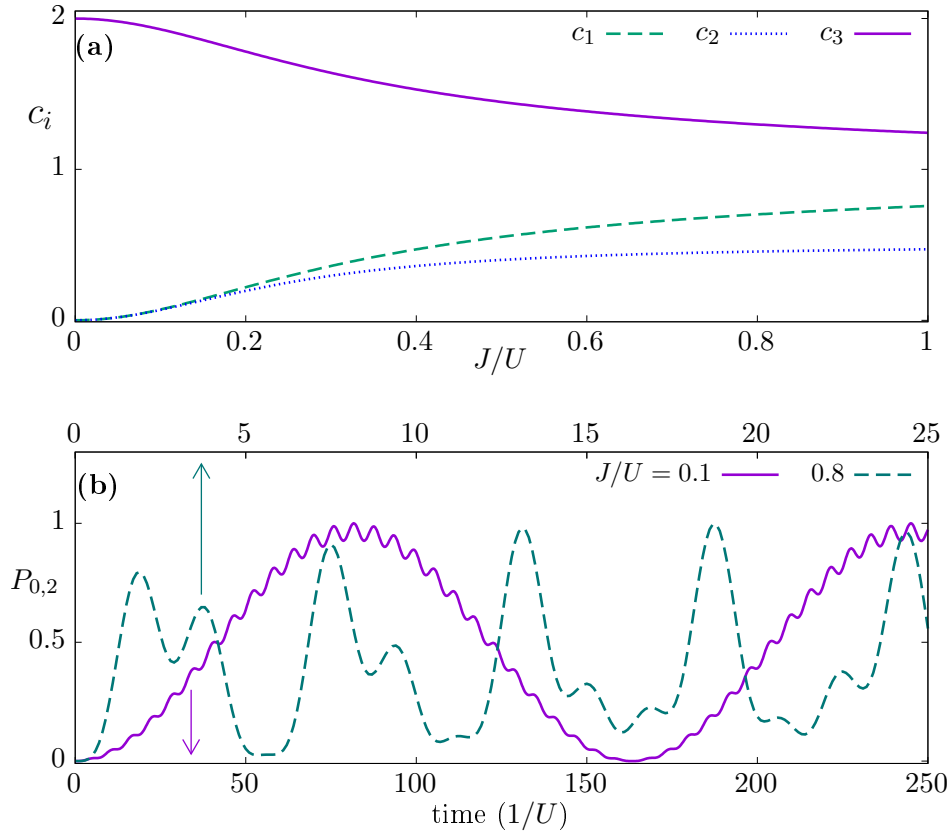


Fig. 3.1: (a) Amplitude c_i de cada componente de oscilação da Eq. (3.5) como função da amplitude de tunelamento normalizada pela interação de Hubbard. (b) Evolução temporal da probabilidade de encontrar duas partículas no poço direito para dois diferentes regimes de tunelamento. Note que as escalas temporais dos dois processos diferem por um fator 10.

a probabilidade de encontrar ambas as partículas no poço direito, em função do tempo, é

$$P_{0,2}(t) = |\langle 0, 2 | \mathcal{T}(t) | 2, 0 \rangle|^2 = \frac{1}{4} \left\{ 1 + \frac{U^2 + 8J^2}{\alpha^2} - c_1 \cos \left[\frac{1}{2} (\alpha + U) t \right] \right\} + \frac{1}{4} \left\{ c_2 \cos(\alpha t) - c_3 \cos \left[\frac{1}{2} (\alpha - U) t \right] \right\}, \quad (3.5)$$

com os coeficientes dos termos de oscilação definidos como $c_1 = 1 - U/\alpha$, $c_2 = 8J^2/\alpha^2$, $c_3 = 1 + U/\alpha$. Na Fig. 3.1(a) podemos ver como esses coeficientes variam em função da razão entre os parâmetros J e U . Embora neste caso não exista uma frequência única de oscilação, no regime fortemente interagente ($J/U \ll 1$) notamos que apenas o termo c_3 é

relevante, podendo-se identificar a frequência dominante

$$\omega = \frac{1}{2}(\alpha - U) \simeq 4J^2/U. \quad (3.6)$$

Tal característica pode ser observada na Fig. 3.1(b), que apresenta a função $P_{0,2}(t)$ para o caso $J/U = 0.1$, sendo a dinâmica dominada por uma oscilação de frequência pequena. A ela estão sobrepostas as contribuições dos termos ponderados pelos coeficientes c_1 e c_2 , cujas frequências, aproximadamente iguais a U , são altas quando comparadas à Eq. (3.6), mas com baixa amplitude. Para comparação, a Fig. 3.1(b) mostra a dinâmica para $J/U = 0.8$, onde é possível notar a presença da contribuição dos três termos da Eq. (3.5), com uma periodicidade mais complexa.

Nessas mesmas condições, isto é, na ausência de *bias*, deve-se observar que o fator de amplitude na Eq. (3.4) tende a zero quando $J/U \ll 1$. Isso revela a supressão da probabilidade de encontrar uma partícula em cada poço no limite de interação forte, o que se deve à grande diferença de energia entre os estados $|2, 0\rangle$ e $|1, 1\rangle$. Além disso, nesse limite os termos dominantes da Eq. (3.5) tomam a forma da Eq. (3.2) para a dinâmica de um partícula, mas com a frequência ω definida na Eq. (3.6) em vez de $2J$. Desta forma, temos ambas as partículas tunelando como um *par ligado*, com um termo de tunelamento efetivo $\tilde{J} = 2J^2/U$. Tal comportamento já foi observado experimentalmente em poços duplos [59] e em redes maiores [60].

A dinâmica se altera com a introdução de um *bias*, implementado através de um valor não nulo para o parâmetro ϵ_R , o que altera os termos diagonais da matriz do hamiltoniano, afetando frequências e amplitudes de tunelamento. Em particular, pode-se obter a recuperação total do tunelamento de uma partícula, isto é, a dissociação do par do estado inicial, na presença de um *bias* escolhido na condição $\epsilon_R = U$. Assim, vemos que uma partícula não pode tunelar entre poços com diferentes ϵ_i a menos que exista outra partícula no poço de destino e a energia de interação entre elas compense a diferença entre os níveis nos dois poços. Esse comportamento é denominado *tunelamento condicional* [59].

3.2 Duas partículas de spin 1

Voltamos, agora, ao nosso objetivo principal, isto é, verificar a influência da presença do spin e uma interação dependente de spin ($U' \neq 0$) no comportamento da dinâmica. Para isso, primeiramente discutiremos um sistema de duas partículas, relacionando alguns aspectos com o caso sem spin.

Devido à conservação do spin total, o espaço de Hilbert pode ser dividido em subespaços ortogonais de spin total definido. Para $N_t = 2$, temos

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_t=0} \oplus \mathcal{H}_{s_t=1} \oplus \mathcal{H}_{s_t=2} . \quad (3.7)$$

Na estrutura de estados de base especificada na Eq. (2.5), levando em conta a condição (2.4) e a restrição ao subespaço de $s_{T_z} = 0$, temos um espaço Hilbert de dimensão sete, cuja base é composta pelos seguintes estados:

$$\begin{aligned} |E_1\rangle &= |\{2, 0\}, \{0, 0\}, 0\rangle , & |E_2\rangle &= |\{1, 1\}, \{1, 1\}, 0\rangle , \\ |E_3\rangle &= |\{0, 2\}, \{0, 0\}, 0\rangle , & |E_4\rangle &= |\{1, 1\}, \{1, 1\}, 1\rangle , \\ |E_5\rangle &= |\{2, 0\}, \{2, 0\}, 2\rangle , & |E_6\rangle &= |\{1, 1\}, \{1, 1\}, 2\rangle , \\ |E_7\rangle &= |\{0, 2\}, \{0, 2\}, 2\rangle . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Construímos, então, as representações matriciais do hamiltoniano em cada subespaço S_T , que têm as seguintes formas:

$$[H_{s_T=0}] = \begin{pmatrix} U - 2U' + 2\epsilon_L & -J\sqrt{2} & 0 \\ -J\sqrt{2} & \epsilon_L + \epsilon_R & -J\sqrt{2} \\ 0 & -J\sqrt{2} & U - 2U' + 2\epsilon_R \end{pmatrix} , \quad (3.9)$$

$$[H_{s_T=1}] = \begin{pmatrix} \epsilon_L + \epsilon_R \end{pmatrix} , \quad (3.10)$$

$$[H_{s_T=2}] = \begin{pmatrix} U + U' + 2\epsilon_L & -J\sqrt{2} & 0 \\ -J\sqrt{2} & \epsilon_L + \epsilon_R & -J\sqrt{2} \\ 0 & -J\sqrt{2} & U + U' + 2\epsilon_R \end{pmatrix} . \quad (3.11)$$

Podemos notar que o subespaço de $S_T = 1$ é unidimensional, não havendo dinâmica nesse subespaço. Já para $S_T = 0, 2$, há uma semelhança entre as matrizes de representação deste caso e do caso sem spin, Eq. (3.3), de tal forma que podemos construir uma correspondência entre os vetores da base de um dado S_T com os do caso sem spin,

$$\begin{aligned} |0, 2\rangle &\longleftrightarrow |\{2, 0\}, \{2, 0\}, S_T\rangle , \\ |1, 1\rangle &\longleftrightarrow |\{1, 1\}, \{1, 1\}, S_T\rangle , \\ |0, 2\rangle &\longleftrightarrow |\{0, 2\}, \{0, 2\}, S_T\rangle . \end{aligned} \quad (3.12)$$

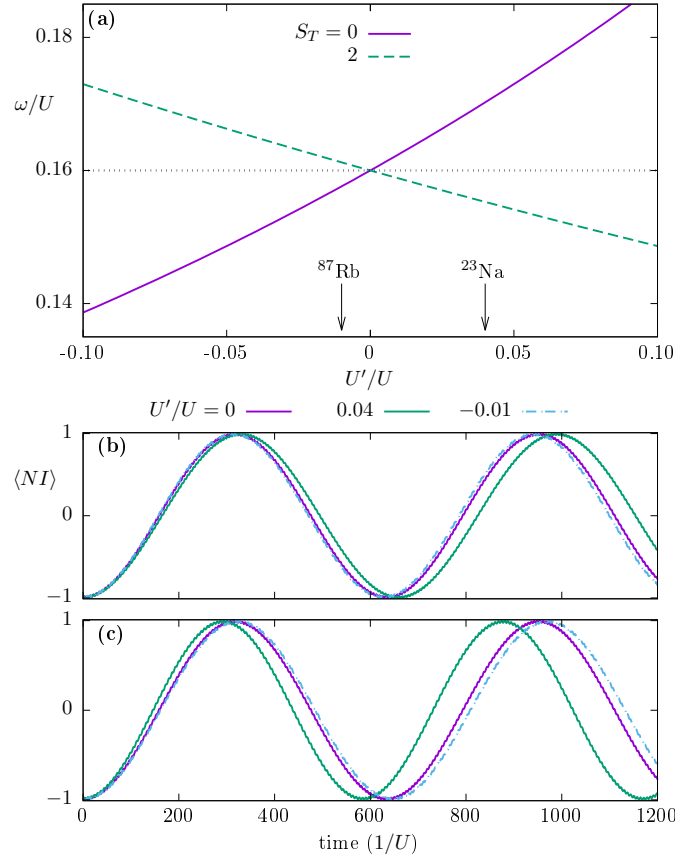


Fig. 3.2: Frequência do tunelamento de pares para os casos sem spin e com spin com $s_T = 0, 2$ (a); diferença de população ($\langle NI \rangle$) para o caso de $s_T = 2$ (b) e $s_T = 0$ (c).

Essa correspondência deve ser acompanhada pela troca de U na Eq. (3.3) por $U \rightarrow U - 2U'$ para $S_T = 0$ e por $U \rightarrow U + U'$ para $S_T = 2$, afetando os autovalores, autovetores, e conseqüentemente, as Eqs. (3.4) e (3.5).

Nossa análise focaliza o regime fortemente interagente ($J/U \ll 1$), uma vez que $|U'| \ll |U|$, o que se verifica para os átomos ^{23}Na e ^{87}Rb . Podemos utilizar a frequência de oscilação do caso sem spin, Eq. (3.6), com as trocas indicadas após a Eq. (3.12), obtendo

$$\omega_{S_0} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(U - 2U')^2 + 16J^2} - (U - 2U') \right], \quad (3.13)$$

$$\omega_{S_2} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(U + U')^2 + 16J^2} - (U + U') \right]. \quad (3.14)$$

A Fig. 3.2(a) apresenta a variação da frequência de oscilação dos pares ligados em uma região estreita de valores de U'/U contendo os correspondentes a ^{23}Na e ^{87}Rb , respectiva-

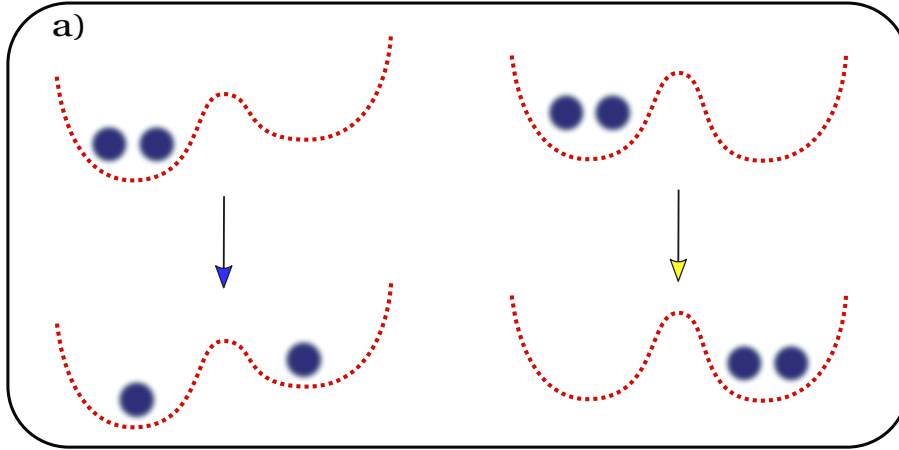


Fig. 3.3: Processos de tunelamento para um estado inicial com duas partículas no poço esquerdo.

mente 0.04 e -0.01 . O efeito do comportamento distinto das frequências pode ser visualizado através da evolução temporal da diferença de população, $\langle NI \rangle \equiv (\langle N_R \rangle - \langle N_L \rangle) / N_T$. Isso é exemplificado na Fig. 3.2(b) e (c) para os valores de U'/U de ^{23}Na e ^{87}Rb , onde podemos notar que a maior mudança ocorre para ^{23}Na no canal $S_T = 0$.

É interessante estender nosso estudo a uma região mais ampla de valores do *bias* e da interação dependente de spin, sem nos preocuparmos com a possibilidade de realização experimental. Nossos principais indicadores serão o valor esperado do número de partículas em cada poço, as probabilidades dos estados envolvidos, e uma nova quantidade, M_R , definida como o máximo valor esperado do número de partículas no poço da direita ao longo do tempo. Esse número pode variar entre 0 e 2, devido à escolha do estado inicial com $N_R = 0$.

A Fig. 3.3 mostra esquematicamente os possíveis estados finais (excetuando o retorno ao próprio estado inicial). Como a energia é conservada, uma probabilidade finita de encontrar o sistema em um dos estados finais só existe se esse estado coincidir em energia com o inicial.

É possível estimar os parâmetros para que ocorram os tunelamentos pela condição de igualdade entre as energias dos estados envolvidos na evolução temporal. Considerando o estado inicial de alto spin, $|\{2, 0\}, \{2, 0\}, 2\rangle$, a energia, calculada pela parte local do hamiltoniano (2.1), é $2\epsilon_L + U + U' = 1 + U'$, uma vez que escolhemos $\epsilon_L = 0$ e $U = 1$.

Para o estado final com uma partícula em cada poço, $|\{1, 1\}, \{1, 1\}, 2\rangle$, a energia é $\epsilon_L + \epsilon_R = \epsilon_R$, o que leva à condição de ressonância $U' = \epsilon_R - 1$ para o tunelamento de uma partícula do canal de $S_T = 2$. Procedendo da mesma forma, mas a partir do estado inicial

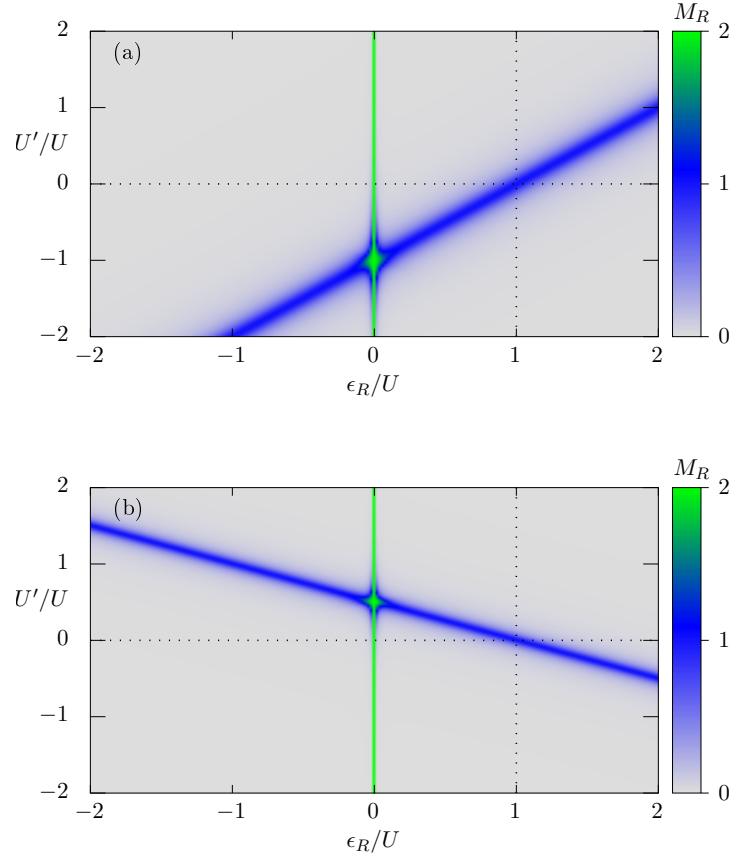


Fig. 3.4: Máximos dos valores esperados do número de partículas no poço da direita $M(N_R)$ para o estado inicial $|\{2, 0\}, \{2, 0\}, 2\rangle$ (a) e $|\{2, 0\}, \{0, 0\}, 0\rangle$ (b).

$|\{2, 0\}, \{2, 0\}, 0\rangle$, obtemos que a condição para o tunelamento de uma única partícula é $U' = \frac{1}{2}(1 - \epsilon_R)$.

As condições obtidas podem ser representadas por retas no espaço de parâmetros (U', ϵ_R) . Tais retas são claramente visíveis na Fig. 3.4, na qual a escala de cores dá o valor máximo $M(N_R)$ do número médio de partículas no poço da direita observado após um tempo longo (arbitrário). A figura indica que o número de visitas de uma partícula ao poço R só é significativo se os parâmetros do sistema satisfazem as respectivas condições para cada estado inicial.

Por outro lado, a figura Fig. 3.4 também indica um número significativo de ocupação do poço R na condição $\epsilon_R = 0$, para ambos os estados iniciais e independente de U' . Essa é a condição de simetria entre os dois poços, e a igualdade de energias se dá o estado do poço R equivalente ao inicial no poço L . Isso corresponde ao segundo processo esquematizado

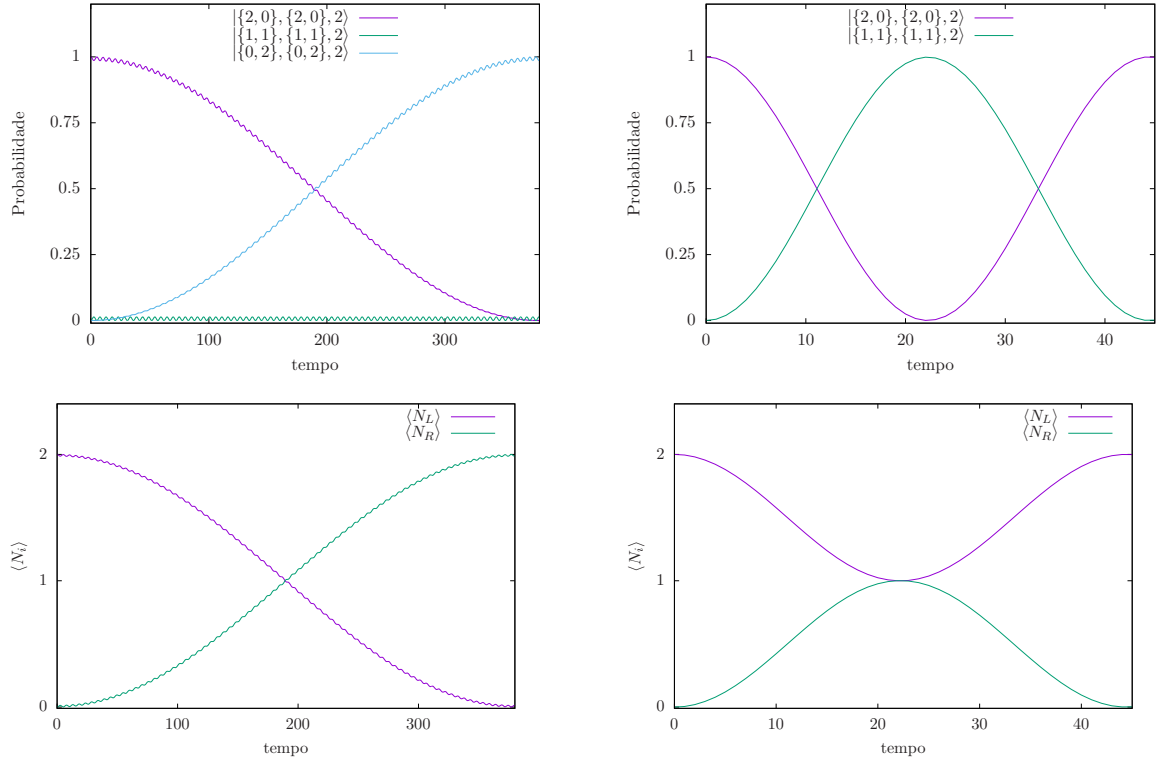


Fig. 3.5: Probabilidades dos estados e valor esperado do número de partículas nos poços como função do tempo para o estado inicial é $|\{2,0\}, \{2,0\}, 2\rangle$ com $J = 0.05$, $U' = 0.2$, nos casos $\epsilon_R = 1$ (esquerda) e $\epsilon_R = 2.2$ (direita).

na Fig. 3.3, que pode ser visto como um “tunelamento de par”. Raciocinando em termos de teoria de perturbação no tunelamento, trata-se de um processo de segunda ordem em J , passando pelo estado intermediário (virtual) $|\{1,1\}, \{1,1\}, 2\rangle$ ou $|\{1,1\}, \{1,1\}, 0\rangle$. O processo se torna real, ou a sequência de dois processos reais, no cruzamento entre as retas, quando as condições de tunelamento simples e duplo coincidem. Note que as linhas de tunelamento condicional (para ambos canais de S_T) contém o ponto $(U' = 0, \epsilon_R = U)$, conforme fora comentado no final da seção do caso sem spin (Sec. 3.1).

Este comportamento é exemplificado na Fig. (3.5), que mostra a evolução temporal das probabilidades dos estados envolvidos e dos valores esperados do número de partículas nos poços. Observa-se que tunelamento de duas partículas, para $\epsilon_R = 0$, é marcado por uma pequena projeção do estado do sistema sobre o estado intermediário $|\{1,1\}, \{1,1\}, 2\rangle$, variando com um período da ordem da unidade de tempo, compatível com a relação de incerteza $\Delta E \Delta t \sim \hbar$.

É interessante observar a correlação de spin entre os poços, ou seja, o valor esperado

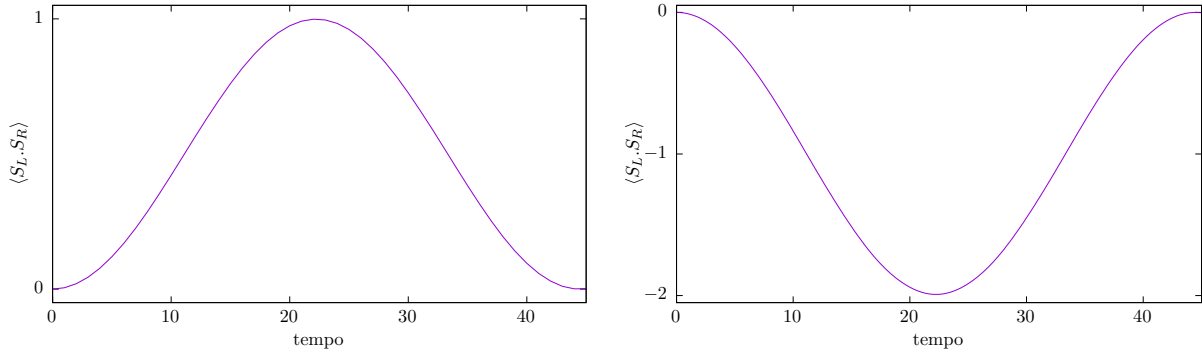


Fig. 3.6: As funções de correlação de spin entre os poços têm valores positivos para o estado inicial com $s_T = 2$ (painel esquerdo) e negativos se $s_T = 0$ (painel direito), passando por um valor absoluto máximo quando se tem uma partícula em cada poço.

do produto escalar entre os spins dos dois poços,

$$\langle \mathbf{S}_L \cdot \mathbf{S}_R \rangle (t) = \langle \psi(t) | \mathbf{S}_L \cdot \mathbf{S}_R | \psi(t) \rangle . \quad (3.15)$$

Na análise estática, feita na Ref. [49], o sinal da interação U' influencia diretamente no ordenamento dos spins no estado fundamental. Mas na dinâmica, na forma aqui definida, as correlações são determinadas pelo estado inicial escolhido. Portanto, se o estado inicial for de spin alto, então as correlações serão positivas, e se o spin total do estado inicial for baixo, as correlações serão negativas, sempre conservando s_T . Esses comportamentos podem ser verificados na Fig. (3.6), para o caso de tunelamento de uma única partícula. No caso de tunelamento de par, não existe ocupação significativa dos dois poços simultaneamente, tornando sem sentido o cálculo da correlação.

3.3 Três partículas de spin 1

Apenas para ilustrar o aumento de complexidade na dinâmica com o aumento do número de partículas, apresentamos alguns casos do sistema de dois poços contendo três partículas.

Pelo mesmo motivo citado na seção anterior, o espaço de Hilbert pode ser decomposto em subespaços de spin total definido,

$$N_t = 3 \quad : \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_T=1} \oplus \mathcal{H}_{s_T=2} \oplus \mathcal{H}_{s_T=3} .$$

A dimensão total do espaço de estados é 12, sendo respectivamente 6, 2 e 4 para os

subespaços de spin total na ordem acima. Usando a notação introduzida anteriormente, podemos escolher os vetores de base listados a seguir.

$$\begin{aligned}
 |E_1\rangle &= |\{0, 3\}, \{0, 1\}, 1\rangle, & |E_2\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 0\}, 1\rangle, & |E_3\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 2\}, 1\rangle, \\
 |E_4\rangle &= |\{2, 1\}, \{0, 1\}, 1\rangle, & |E_5\rangle &= |\{2, 1\}, \{2, 1\}, 1\rangle, & |E_6\rangle &= |\{3, 0\}, \{1, 0\}, 1\rangle, \\
 |E_7\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 2\}, 2\rangle, & |E_8\rangle &= |\{2, 1\}, \{2, 1\}, 2\rangle, & |E_9\rangle &= |\{0, 3\}, \{0, 3\}, 3\rangle, \\
 |E_{10}\rangle &= |\{1, 2\}, \{1, 2\}, 3\rangle, & |E_{11}\rangle &= |\{2, 1\}, \{2, 1\}, 3\rangle, & |E_{12}\rangle &= |\{3, 0\}, \{3, 0\}, 3\rangle.
 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Diferentemente do caso anterior, não apresentaremos as matrizes pois não compararemos ao caso sem spin.

Vamos nos restringir à escolha do estado inicial com todas as partículas no poço esquerdo (L). Nesta situação, o spin total do sistema pode ser 3 ou 1, pois o valor 2 é proibido pela condição (2.4). Os possíveis estados finais de nosso interesse são representados esquematicamente na Fig. 3.7. Para análise das possíveis dinâmicas usaremos os mesmos métodos empregados para o sistema de duas partículas.

Mais uma vez, focamos no regime fortemente interagente, no qual é possível estimar as condições para que ocorram os tunelamentos através da condição de igualdade de energia dos estados envolvidos. Começando a análise pelo estado inicial com maior spin, em primeira ordem em J , o único processo dinâmico real, no qual o átomo move-se para o poço direito, é o tunelamento condicional de uma única partícula dado pela condição

$$U' = \frac{1}{2}(\epsilon_R - 2U). \quad (3.17)$$

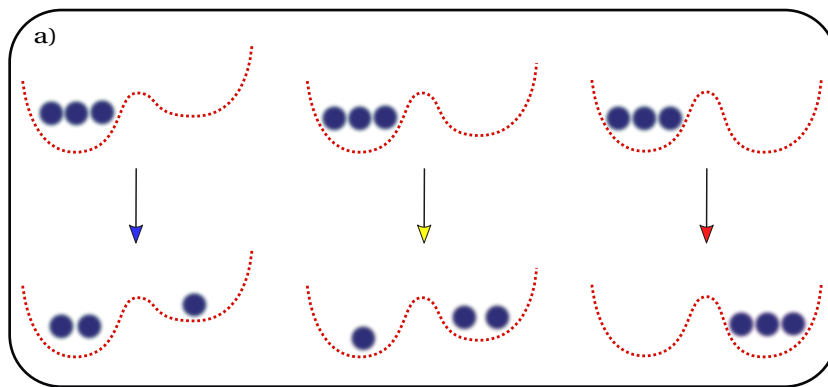


Fig. 3.7: Processos de tunelamento para um estado inicial com três partículas no poço esquerdo.

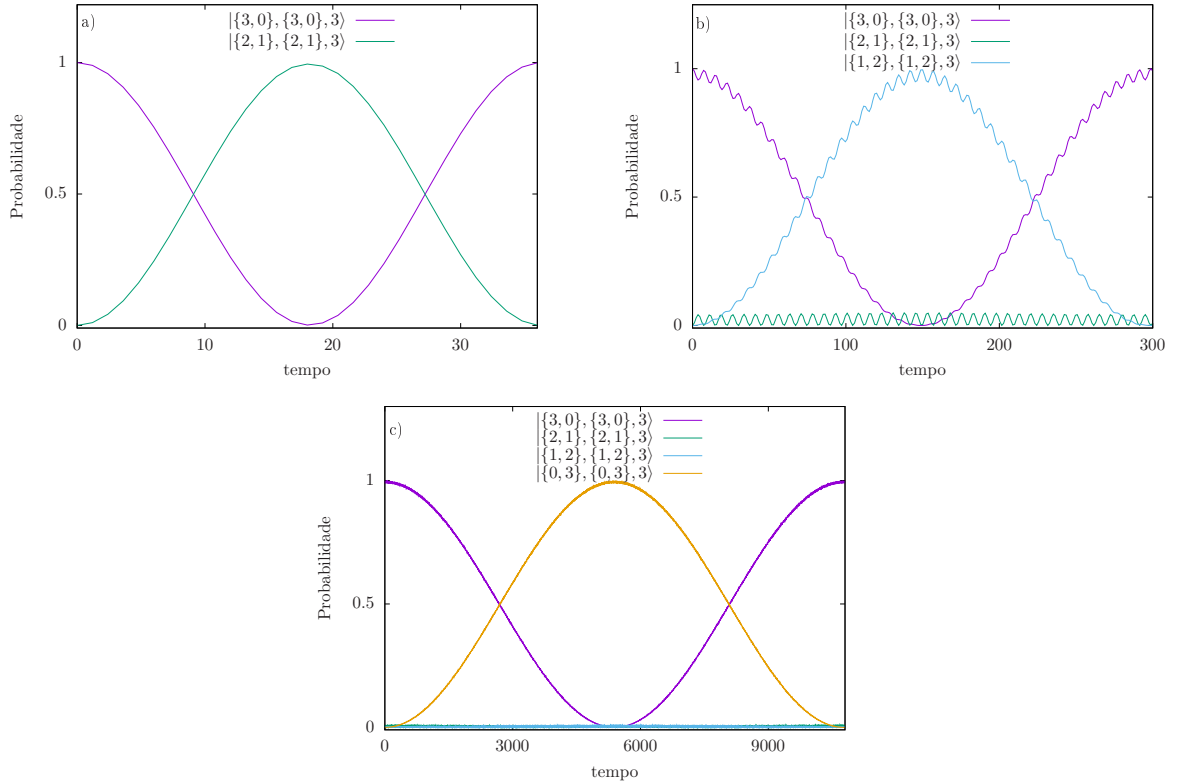


Fig. 3.8: Probabilidades dos estados em função do tempo para $s_T = 3$ com $J = 0.05$ e $U' = -0.2$, nos casos $\epsilon_r = 1.6$ (a), $\epsilon_R = 0.6$ (b), $\epsilon_R = 0$ (c).

Tal processo é exemplificado na Fig. 3.8(a) através das amplitudes de probabilidade dos estados envolvidos.

O próximo processo relevante acontece em segunda ordem em J e é caracterizado pelo tunelamento de um par ligado de partículas deixando apenas um único átomo no poço esquerdo cuja condição é

$$U' = \frac{1}{2}(\epsilon_R - U). \quad (3.18)$$

Através da Fig. 3.8(b) vemos que tal processo tem pequenas projeções sobre o estado intermediário com apenas uma partícula no poço direito.

Para poços simétricos ($\epsilon_R = 0$), o único processo possível é o tunelamento dos três átomos ligados caracterizando um tunelamento de terceira ordem em J , que pode ser visualizado na Fig. 3.8(c).

Em cada um dos casos, os processos acontecem em escalas diferentes, de forma similar ao caso de duas partículas. As condições de ressonância aparecem de forma bem definidas no mapa (U', ϵ_R) como podemos ver na Fig. 3.9(a) onde as cores representam o valor

máximo do número médio de partículas no poço da direita (M_R) depois de uma longa evolução temporal. Assim como no caso de duas partículas, a linha com $M_R \simeq 1$ é mais larga do que as outras devido a processos virtuais que envolvem a visita de um átomo ao poço da direita fora de ressonância.

Para o subespaço de menor spin ($\mathcal{H}_{s_t=1}$), o número de componentes da base aumenta devido a possibilidade dos poços de dupla ocupação poderem ter um spin igual a zero ou dois, tal característica aumenta os diferentes processos possíveis e pode ser verificado através do número de linhas presentes nas Fig. 3.9. Na dinâmica das três partículas inicialmente ocupando o poço esquerdo ($|\{3,0\}, \{1,0\}, 1\rangle$), processos de primeira ordem em J , isto é, tunelamento de única partícula, podem levar aos estados $|\{2,1\}, \{2,1\}, 1\rangle$ ou

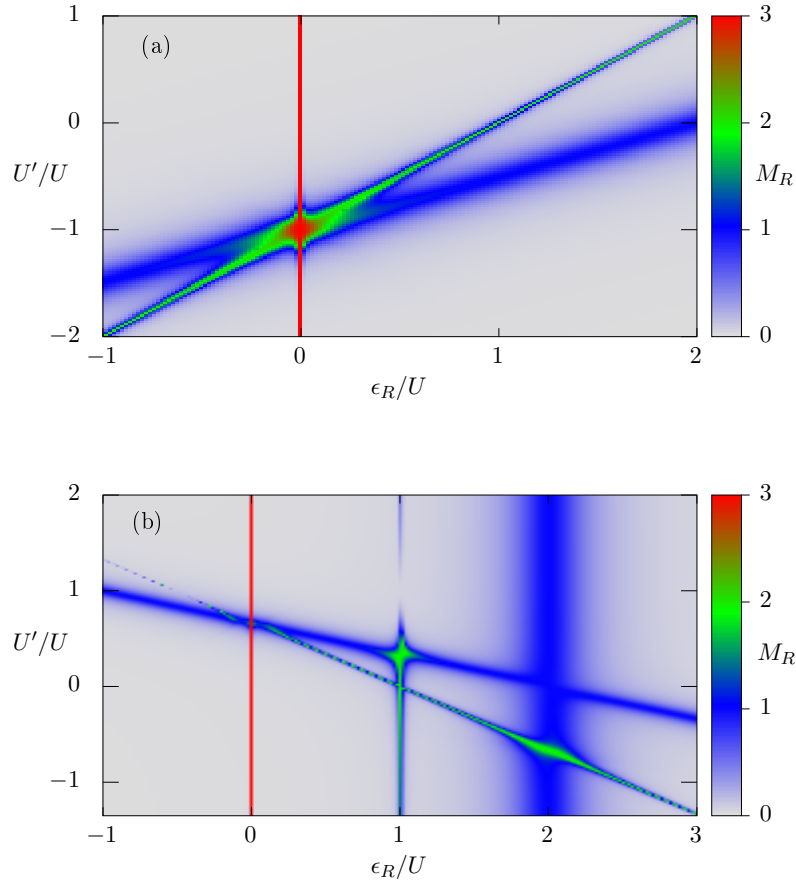


Fig. 3.9: Máximos dos valores esperados do número de partículas no poço da direita $M(N_R)$ para o estado inicial $|\{3,0\}, \{3,0\}, 3\rangle$ (a) e $|\{3,0\}, \{1,0\}, 1\rangle$ (b).

$|\{2, 1\}, \{0, 1\}, 1\rangle$, nas condições

$$U' = \frac{1}{3}(2U - \epsilon_R), \quad (3.19)$$

$$\epsilon_R = 2U, \quad (3.20)$$

respectivamente. Já a transição de pares de partículas envolve processos de tunelamento em segunda ordem, gerando o estado $|\{1, 2\}, \{1, 2\}, 1\rangle$ com a condição

$$U' = \frac{2}{3}(U - \epsilon_R) \quad (3.21)$$

e o estado $|\{1, 2\}, \{1, 0\}, 1\rangle$ com a condição

$$\epsilon_R = U. \quad (3.22)$$

A transição de três partículas é um processo de terceira ordem em J , e só ocorre para $\epsilon_R = 0$, gerando o estado $|\{0, 3\}, \{0, 1\}, 1\rangle$. A evolução temporal das probabilidades dos estados da base é similar ao caso $s_T = 3$, (Fig. 3.8), mostrando tempos um pouco menores mas essencialmente das mesmas ordens de grandeza para processos de tunelamento de uma, duas e três partículas.

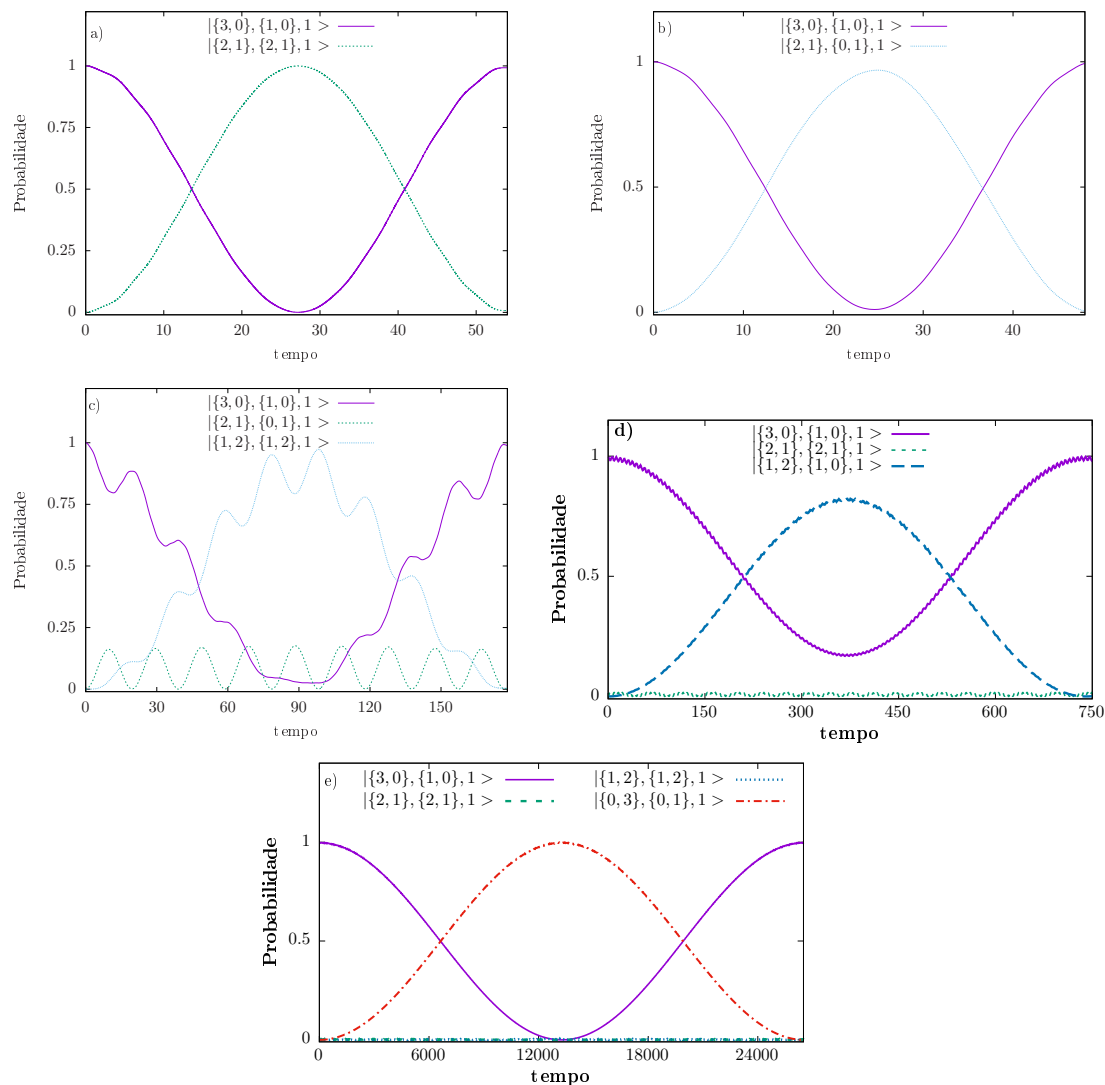


Fig. 3.10: Probabilidades dos estados em função do tempo para $s_T = 1$ com $J = 0.05$ e $U' = -0.2$, nos casos $\epsilon_r = 2.6$ (a), $\epsilon_R = 2.0$ (b), $\epsilon_R = 1.3$ (c), $\epsilon_R = 1$ (d) e $\epsilon_R = 0$ (f).

Capítulo 4

Dinâmica em sistemas de três poços

Voltamos, agora, a nossa atenção para um sistema de três poços, focalizando na geometria que pode ser relacionada a um transistor de efeito de campo. Nesse tipo de transistor, as partes extremas (à esquerda e direita, por exemplo), constituem a *fonte* e o *dreno* de portadores de carga, que atravessam ou não a parte central, *porta* (*gate*), conforme é variado um potencial de porta. No nosso análogo para átomos, o poço da esquerda (L) faz o papel de fonte, o da direita (R) corresponde ao dreno, e introduzimos um poço central (C), de forma que a variação do nível de energia ϵ_C faz o papel do potencial de porta, ajustando a condição de passagem de partículas entre os poços L e R , cujos níveis de energia são mantidos iguais ($\epsilon_L = \epsilon_R = 1$). Considerando que a interação dependente de spin também é um parâmetro de controle (além de ϵ_C), vamos considerar estados iniciais **sempre com uma partícula no poço central**. Neste texto, analisaremos a dinâmica de sistemas cujo estado inicial contém, adicionalmente, uma ou duas partículas no poço da esquerda. Em ambos os casos, vamos estudar a dinâmica de passagem de partículas para o poço da direita em função dos parâmetros de controle ϵ_C e U' .

4.1 Uma partícula no poço esquerdo ($n_T = 2$)

A situação inicial para uma partícula no poço L e uma no C é esquematizada na Fig. 4.1. Esse esquema não indica os estados de spin, que podem ser $s_T = 0, 1, 2$.

Como vimos antes, um panorama geral da eficiência de passagem de partículas através do sistema para as diversas combinações dos parâmetros do sistema é dado por mapas do máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita, $M(N_R)$, para cada estado inicial. O estudo sistemático da dinâmica em função de U' e ϵ_C leva aos mapas apresentados na Fig. (4.2). Vê-se claramente que visitas ao poço R só se tornam significativamente frequentes ao longo de certas linhas retas no espaço (U', ϵ_C) . Pode-se

interpretar esses resultados através de uma análise de perturbação em J , identificando possíveis processos de tunelamento conectando estados de poços isolados.

Para o estado inicial de menor spin total, $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 0\rangle$, a passagem de L para R pode se dar por dois processos:

- $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 0\rangle \rightarrow |\{0, 2, 0\}, \{0, 0, 0\}, 0\rangle \rightarrow |\{0, 1, 1\}, \{0, 1, 1\}, 0\rangle$,
- $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 0\rangle \rightarrow |\{1, 0, 1\}, \{1, 0, 1\}, 0\rangle \rightarrow |\{0, 1, 1\}, \{0, 1, 1\}, 0\rangle$.

O primeiro envolve uma dupla ocupação do poço central, cuja condição de ressonância de energia entre o estado inicial e o estado intermediário gera a equação $U' = \epsilon_C/2$. Para o segundo, a condição de ressonância gera a restrição $\epsilon_C = 1$. Essas duas condições definem exatamente as linhas observadas no primeiro painel da Fig. 4.2. Fora das condições de ressonância, dado que a igualdade entre ϵ_L e ϵ_R é garantida por construção, ainda podemos ter os mesmos processos, mas os estados intermediários são virtuais e a probabilidade é muito menor.

No caso em que o estado inicial é $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 1\rangle$, a restrição dada pela Eq. (2.4) impede a dupla ocupação do poço central com spin total 1. Isso não significa que seja impossível passar pelo poço central, pois o vetor de estado, durante a evolução temporal, é uma combinação de autoestados de energia do sistema (com tunelamento), nos quais o número de partículas e o spin em um dado poço não são quantidades definidas. É a possibilidade de encontrar o estado real $|\{0, 2, 0\}, \{0, 1, 0\}, 1\rangle$ em algum instante que deixa de existir. Assim, o processo dominante é o que envolve a condição $\epsilon_C = 1$ ($C \rightarrow R, L \rightarrow C$). O segundo painel da Fig. 4.2 mostra apenas a linha correspondente a essa condição.

Para spin total máximo, isto é, com estado inicial $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 2\rangle$, a condição de ressonância da dupla ocupação do poço central gera a equação $U' = -\epsilon_C$, que corresponde à linha oblíqua no terceiro painel da Fig. 4.2. A linha $\epsilon_C = 1$ está presente em todos os casos, pois o processo correspondente não envolve estados com mais de uma partícula em um poço e, portanto, não há dependência no spin total.

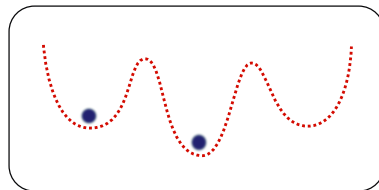


Fig. 4.1: Representação esquemática do estado inicial com uma partícula no poço esquerdo e uma no poço central.

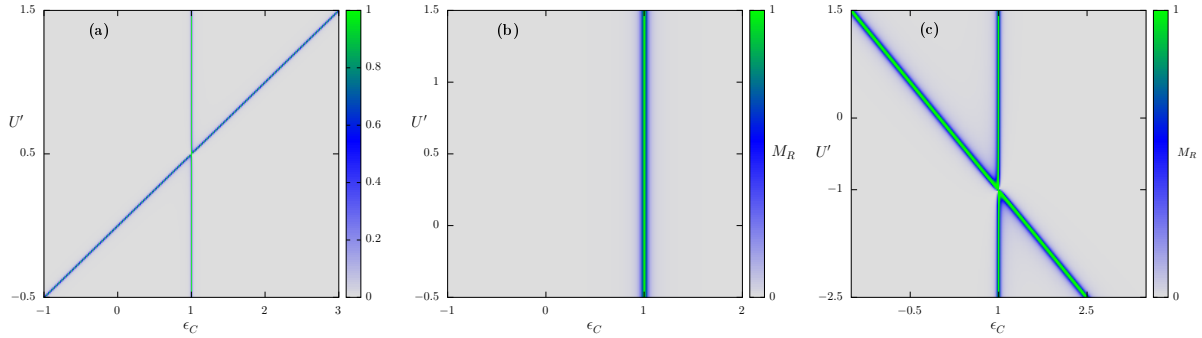


Fig. 4.2: *Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita ($M(N_R)$) para os estados iniciais $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 0\rangle$ (a), $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 1\rangle$ (b) e $|\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 2\rangle$ (c).*

As correlações de spin entre poços, quando não nulas, seguem o padrão observado para dois poços, ou seja, negativas para $s_T = 0$ e positivas no caso $s_T = 2$.

4.2 Duas partículas no poço esquerdo ($n_T = 3$)

Aumentamos, agora, em uma unidade o número de partículas do estado inicial, que passa a ter duas partículas na esquerda e uma no centro, conforme mostra a Fig. 4.3.

O spin total nessa configuração pode ser 3, 2 ou 1. O valor $s_T = 0$ fica excluído porque, de acordo com a Eq. (2.4), o poço esquerdo, com duas partículas de spin 1, não pode ter $s_L = 1$, que seria necessário para gerar $s_T = 0$ no acoplamento $\mathbf{S}_L + \mathbf{S}_C$ com $s_C = 1$. Então, os possíveis estados iniciais são $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 3\rangle$, $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 2\rangle$, $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 1\rangle$, $|\{2, 1, 0\}, \{0, 1, 0\}, 1\rangle$, com duas possibilidades para $s_T = 1$.

Os mapas de ocupação do poço direito em função dos parâmetros de controle são apresentados na Fig. 4.4, e passamos a comentar as características principais aí observadas.

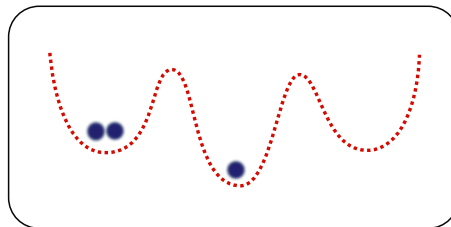


Fig. 4.3: *Representação esquemática do estado inicial com três partículas em três poços.*

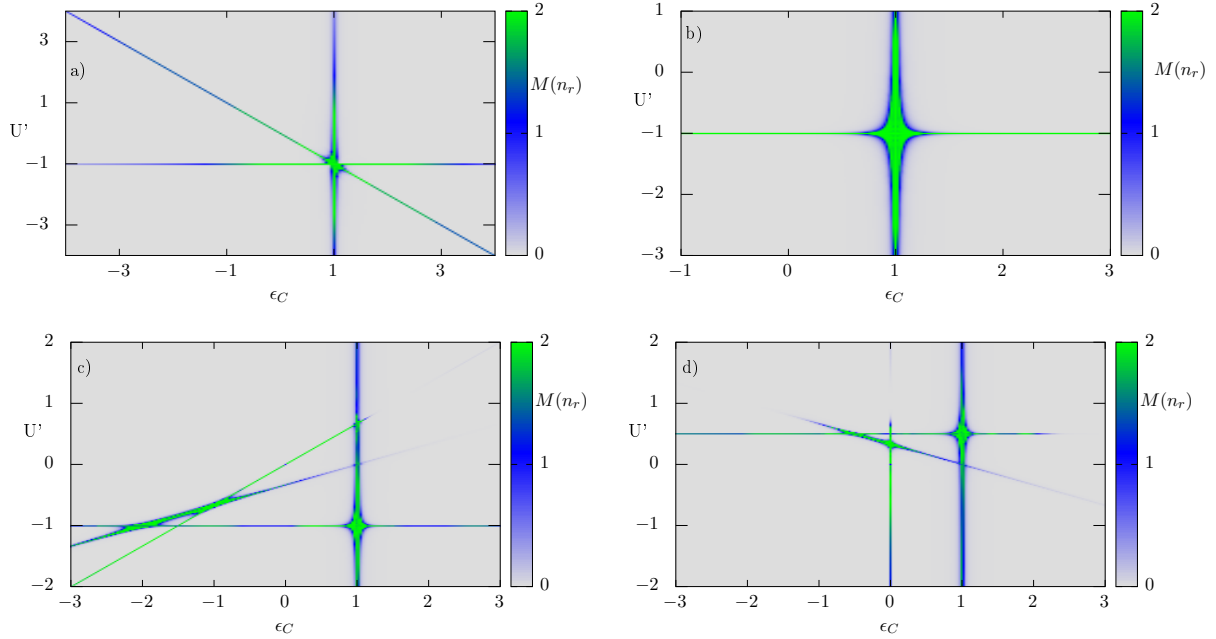


Fig. 4.4: Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita ($M(N_R)$) para os estados iniciais $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 3\rangle$ (a), $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 2\rangle$ (b), $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 1\rangle$ (c) e $|\{2, 1, 0\}, \{0, 1, 0\}, 1\rangle$ (d).

- Existe uma linha $\epsilon_C = 1$, que está presente em todos os casos. Ela é em parte devida ao tunelamento ressonante de uma única partícula entre os poços C e R . Ela também reflete o “tunelamento de par” entre L e C , quando este último está vazio, que é equivalente ao que foi visto para dois poços, seguido da formação do estado simétrico ao inicial (uma partícula em C e duas em R).
- Aparece uma linha horizontal, que é $U' = -1$ nos três primeiros casos (alto spin inicial em L) e $U' = 1/2$ no último (spin inicial nulo em L). Esses são os valores da interação dependente de spin que, em cada caso, compensam a interação de Hubbard para duas partículas em um mesmo poço, tornando-as efetivamente não interagentes. O cruzamento dessas linhas horizontais com a linha $\epsilon_C = 1$ reflete uma situação altamente ressonante, pois os estados com uma dupla ocupação (em qualquer dos poços) e o estado com uma partícula em cada poço têm a mesma energia.
- Para $s_T = 3$ (primeiro painel na Fig. 4.4), tem-se a linha diagonal $U' = -\epsilon_C$. Este caso caracteriza-se pela “transição de par”, no sentido de que se forma um estado com as três partículas no centro, após dois processos virtuais envolvendo o estado intermediário $|\{1, 2, 0\}, \{1, 2, 0\}, 3\rangle$, seguindo-se dois processos virtuais equivalentes

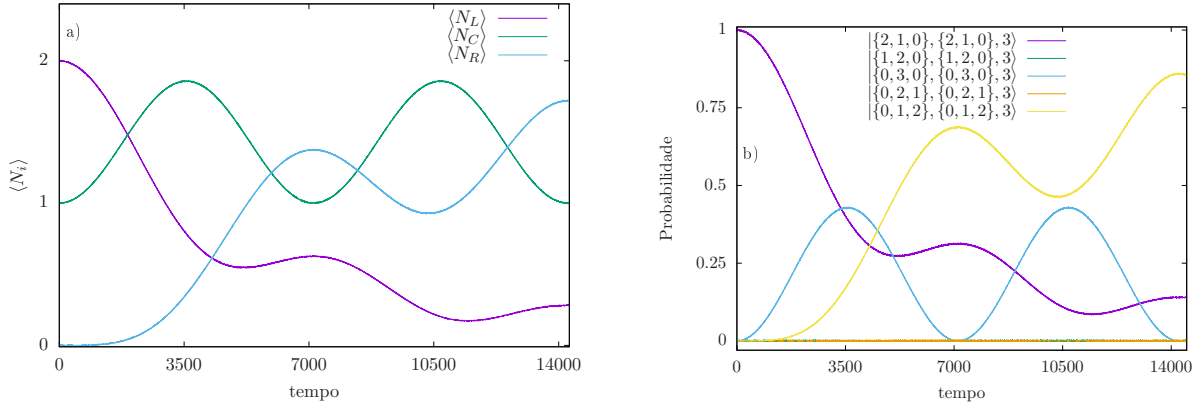


Fig. 4.5: Valor esperado do número de partículas no poço da direita (a) para o estado inicial $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 3\rangle$ juntamente com as funções de probabilidade (b), onde $J = 0.01$, $\epsilon_C = -0.2$ e $U' = 0.2$.

para gerar o estado simétrico ao inicial com duas partículas na direita. A condição $U' = -\epsilon_C$ garante que o estado de tripla ocupação no centro tem a mesma energia do inicial. A diferença de energia do estado intermediário nos processos virtuais é $\Delta E = 1 - \epsilon_C$, o que leva à ressonância completa no cruzamento com a linha $\epsilon_C = 1$. Esse comportamento é ilustrado na Fig. (4.5) para um caso típico (não totalmente ressonante), onde é mostrada a evolução temporal dos valores médios de partícula em cada poço e, consistentemente, das probabilidades de participação dos estados da base no estado do sistema.

- Já para o caso de spin total 2 (segundo painel na Fig. 4.4), a condição dada pela Eq. (2.4) impede a tripla ocupação de qualquer poço. Assim, a ocupação do poço R só é significativa sob as condições $\epsilon_C = 1$ ou $U' = -1$.
- No subespaço de spin total 1 ($s_T = 1$), há duas possibilidades de estado inicial, $|\{2, 1, 0\}, \{2, 1, 0\}, 1\rangle$ e $|\{2, 1, 0\}, \{0, 1, 0\}, 1\rangle$, diferindo pelo valor de s_L .
- Para o estado inicial com $s_L = 2$, podemos ver no painel inferior esquerdo da Fig. 4.4 que, além de continuarem válidas as condições $U' = -1$ e $\epsilon_C = 1$, valores significativos do número de partículas no poço R também ocorrem sobre duas novas retas no espaço de parâmetros de controle, $U' = \frac{2}{3}\epsilon_C$ e $U' = \frac{1}{3}(\epsilon_C - 1)$. O primeiro caso envolve transição de pares, de forma equivalente à discutida para o caso $s_T = 3$, mas a condição sobre U' se altera devido à alteração do spin total. A evolução temporal

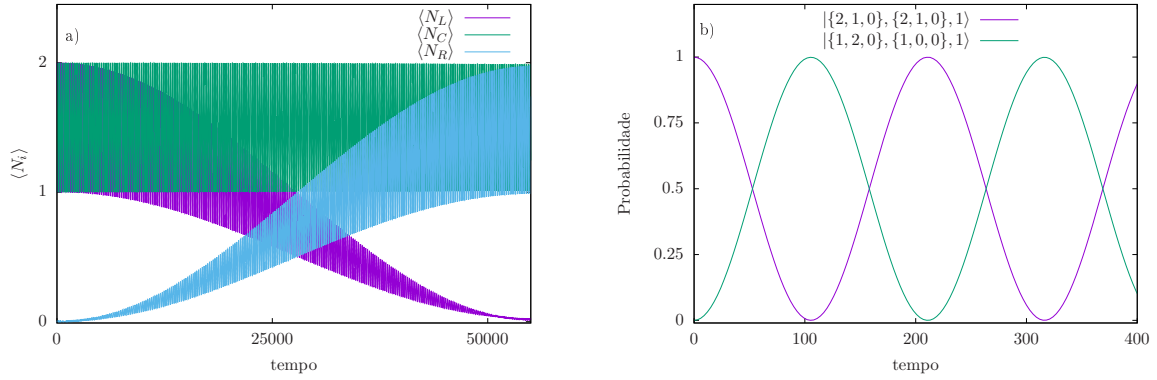


Fig. 4.6: Valor esperado do número de partículas no poço da direita ($\langle N_R \rangle$) e probabilidades em tempos curtos para o estado inicial $|\{2, 1, 0\}, \{0, 1, 0\}, 1\rangle$, com $J = 0.01$, $U' = -0.3$ e $\epsilon_C = 0.1$.

das ocupações de cada poço e da participação dos estados da base envolvidos é muito similar ao que vimos na Fig. 4.5. O segundo caso caracteriza-se por rápidas transições de uma única partícula entre o poço central e um dos poços laterais, notando-se que a ocupação do poço inicial (esquerdo) se reduz lentamente, aumentando a do poço direito, como mostrado para tempos longos no painel (a) da Fig. 4.6. O painel (b) da mesma figura permite observar as oscilações entre os poços L e C a tempos curtos. Deve-se notar que os spins dos poços L e C duplamente ocupados são diferentes, pois um é imposto pela condição inicial e o outro é definido pela menor energia do estado intermediário.

- Os processos envolvidos quando o estado inicial tem $s_L = 0$ (último painel da Fig. 4.4) são da mesma natureza dos anteriores, mas a mudança do papel de U' por causa do spin nulo no poço L altera as relações entre U' e ϵ_C para as condições de ressonância. A condição para formação de um estado de três partículas em C passa a ser $\epsilon_C = 0$, independente de U' , enquanto a outra igualdade muda de sinal, tendo-se a condição $U' = \frac{1}{3}(1 - \epsilon_C)$.

4.3 Três poços com campo magnético estático

Conforme comentamos anteriormente, em realizações físicas de sistemas como os que estamos analisando, as partículas aprisionadas são usualmente átomos alcalinos, como sódio (^{23}Na) e rubídio (^{87}Rb). Esses átomos, em seus estados fundamentais, apresentam o número quântico associado à magnitude do momentum angular total eletrônico $J = 1/2$ e o correspondente ao momentum angular total nuclear $I = 3/2$. O momentum angular atômico (\mathbf{F}) é dado por

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}, \quad (4.1)$$

e a faixa de valores do número quântico associado à sua magnitude é

$$|J - I| < F < |J + I|. \quad (4.2)$$

Portanto, para ^{23}Na e ^{87}Rb a magnitude do momentum angular atômico pode ser $F = 1$ ou $F = 2$, sendo que o estado de menor energia corresponde a $F = 1$, como mostra a Fig. 1.2. Esse é que caracteriza esses átomos como de “spin 1”.

Uma vez que estamos trabalhando com um sistema cujo grau de liberdade relacionado ao spin está livre, é natural que um dos nossos interesses esteja voltado aos efeitos da aplicação de campo magnético. Tais sistemas, conforme Duan et al. [61], podem ser realizados em uma escala de U/\hbar de alguns kHz. Nesta seção, estaremos considerando campos magnéticos que, atuando sobre momentos magnéticos da ordem do magneton nuclear μ_N , levam a energias da ordem de U/\hbar , o que corresponde a magnitudes de indução magnética da ordem de décimos de Gauss.

Para este estudo, vamos supor a aplicação de um campo magnético homogêneo **so-**
mente sobre o poço central do sistema de três poços abordado neste capítulo, com a orientação desse campo definindo a direção do eixo z e sua intensidade expressa através do módulo da indução magnética B_z . O hamiltoniano do sistema é

$$H_B = H + B_z S_C^z, \quad (4.3)$$

onde H é o hamiltoniano a campo zero, dado pela Eq.(2.1), e o índice C identifica o spin do poço central. A presença do termo de campo magnético implica em que

$$[H_B, \mathbf{S}_T^2] \neq 0. \quad (4.4)$$

Logo, o spin total não é mais uma quantidade conservada, mas S_T^z ainda é. Por isso, é conveniente usar a representação para os vetores de base descrita pela Eq. (2.8), especificando a quantidade de partículas existentes em cada poço com cada um dos possíveis valores da componente z do spin individual. Entretanto, optaremos por uma representação mais visual do estado de spin de cada partícula. Por exemplo, o vetor $|\uparrow, \downarrow, 0, \emptyset\rangle$ descreve um estado com uma partícula de spin up no poço da esquerda, uma partícula com spin down e outra com spin zero no poço central, e nenhuma partícula no poço da direita, devendo-se notar a necessidade de explicitar a diferença entre zero partículas (\emptyset) e uma partícula no estado de $s_z = 0$.

Diferentemente das seções anteriores deste capítulo, aqui escolhemos os níveis de energia $\epsilon_L = \epsilon_R = 0$, explorando valores de U' , ϵ_C e B_z como variáveis controláveis, embora na prática os valores de U' sejam determinados pela escolha dos átomos envolvidos. Além disso, continuaremos a utilizar estados iniciais em uma configuração do tipo “transistor”, com uma partícula no poço central e nenhuma no poço do lado direito, tendo como objetivo analisar a passagem de partículas entre L e R dependendo do estado de C .

No subespaço de $S_T^z = -2$ temos apenas uma possibilidade de estado inicial, descrito por $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$, que é autoestado do operador S_T^2 . Na dinâmica a partir desse estado, o mapa de máximos da ocupação do poço da direita no espaço de parâmetros B_z, U' , para um valor fixo de ϵ_C é mostrado na Fig. 4.7. As retas indicam os processos mais prováveis:

- $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle \rightarrow |\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle \rightarrow |\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle$, maximizado para a condição $B_z = (\epsilon_c + U) + U'$;
- $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle \rightarrow |\downarrow, \emptyset, \downarrow\rangle \rightarrow |\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle$, maximizado se $B_z = \epsilon_C$, independente de U' .

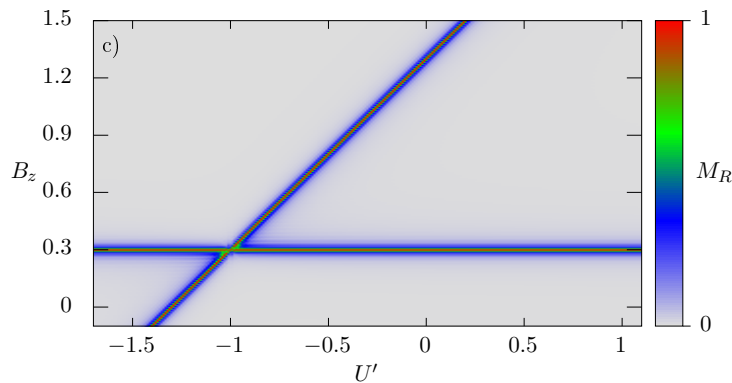


Fig. 4.7: Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita, M_R , para $\epsilon_C = 0.3$.

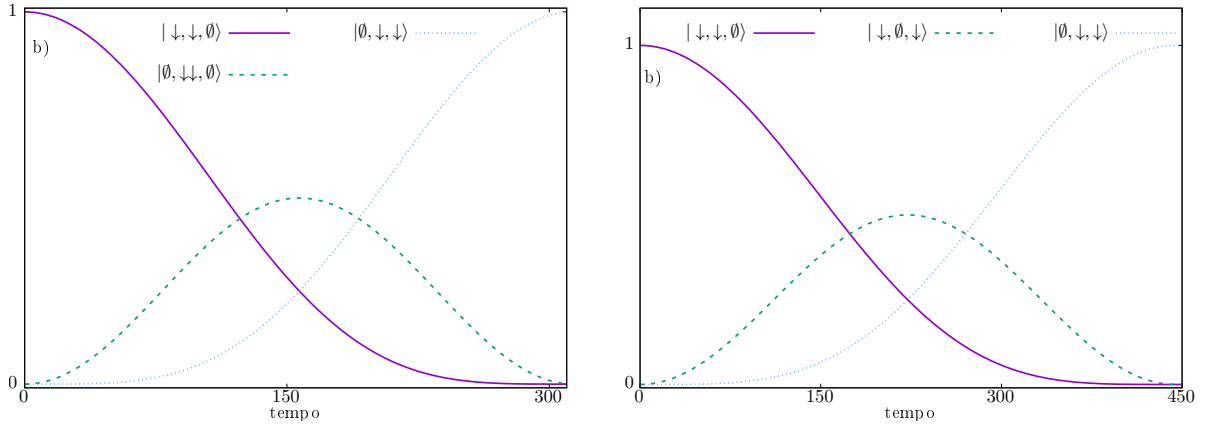


Fig. 4.8: Probabilidades dos estados indicados em função do tempo para o estado inicial $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$, para $B_z = 1.34$ (a) e $B_z = 0.3$ (b).

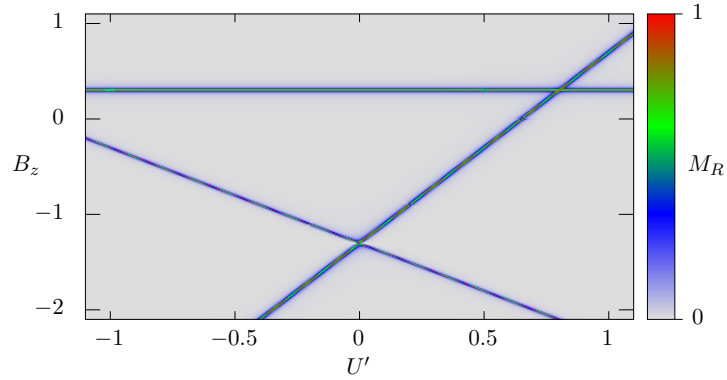


Fig. 4.9: Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita (M_R) para o estado inicial $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, e $\epsilon_C = 0.3$.

A evolução temporal das probabilidades de cada estado da base no estado do sistema pode ser visualizada na Fig. 4.8.

O outro estado inicial relevante é $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$. A dinâmica deste caso é marcada por três possíveis canais, como pode ser visto pelo mapa de M_R na figura (4.9). As condições de ressonância e descrição dos processos são apresentadas abaixo.

- $B_z = -(\epsilon_C + U) - U'$: A transição ocorre passando pela dupla ocupação do poço central em um estado de alto spin total, evoluindo para estado $|\emptyset, \downarrow, \uparrow\rangle$.
- $B_z = -(\epsilon_C + U) + 2U'$: A transição passa pela dupla ocupação do poço central em um estado de baixo spin total, evoluindo para estado $|\emptyset, \downarrow, \uparrow\rangle$.

- $B_z = \epsilon_c$: Passagem do átomo do poço central para o poço da direita, sem movimentação do átomo presente no poço da esquerda. Este caso não é de nosso interesse, pois não envolve a passagem da esquerda para a direita.

A Fig. 4.10 apresenta as probabilidades de ocupação dos estados da base e os valores esperados de S_T^2 para os dois casos relevantes acima.

Este estado inicial pode ser descrito através dos autovalores de spin total como

$$|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\{1, 1, 0\}, \{1, 1, 0\}, 0\rangle, \quad (4.5)$$

onde suas projeções individuais no eixo z são zero.

Ao longo da evolução, na dupla ocupação central, os estados envolvidos deverão ser

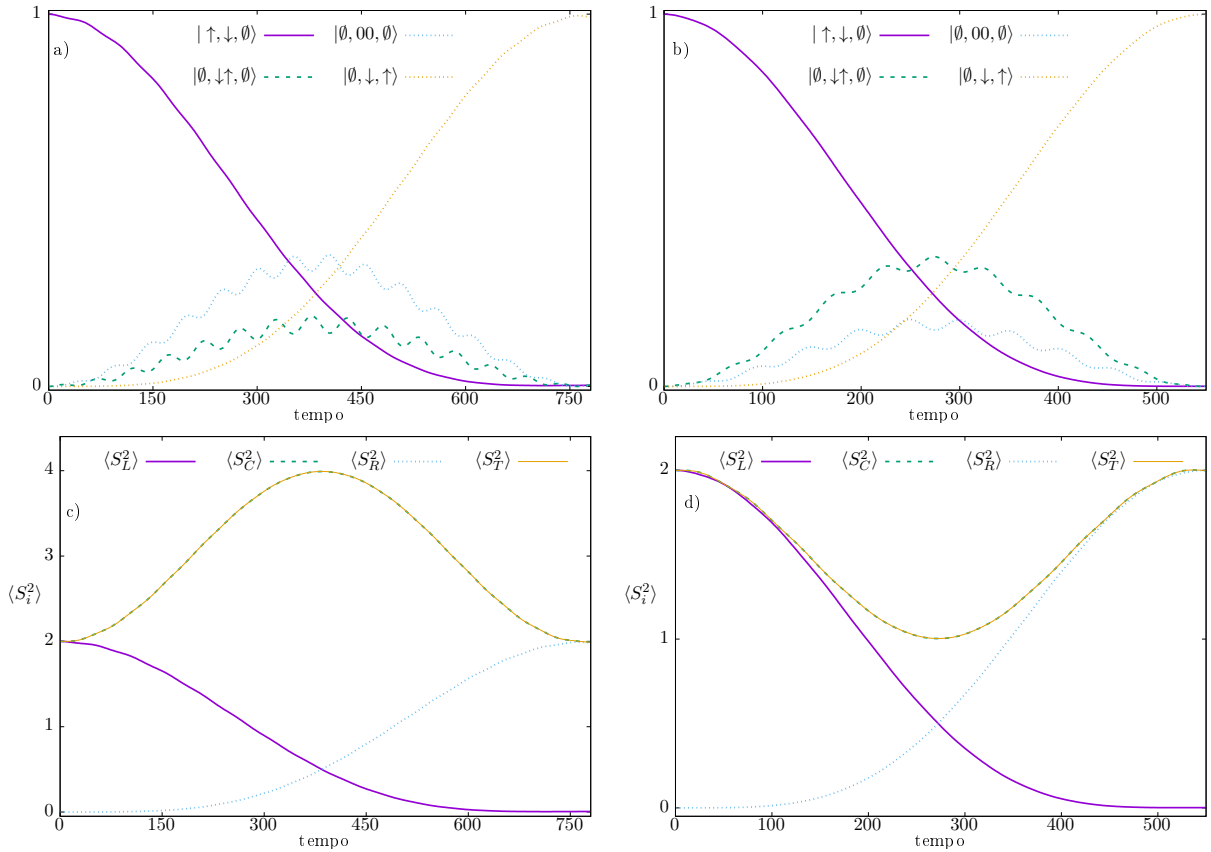


Fig. 4.10: Probabilidades dos estados da base e valores esperados dos $\langle S_i^2 \rangle$ para o estado inicial $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$ e $\epsilon_c = 0.3$, sendo (a) e (c) são para a condição $B_z = -\epsilon_c - U - U'$, enquanto (b) e (d) são para $B_z = -\epsilon_c - U + 2U'$.

combinações de

$$\begin{aligned} |\{0, 2, 0\}, \{0, 2, 0\}, 2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} |\emptyset, \uparrow\downarrow, \emptyset\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\emptyset, 00, \emptyset\rangle \text{ e} \\ |\{0, 2, 0\}, \{0, 0, 0\}, 0\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}} |\emptyset, \uparrow\downarrow, \emptyset\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |\emptyset, 00, \emptyset\rangle, \end{aligned} \quad (4.6)$$

respeitando a condição de simetria dada pela Eq. (2.4). Para $B_z = -(\epsilon_c + U) - U'$, o estado intermediário é uma combinação de alta amplitude e baixa frequência do estado $|\{0, 2, 0\}, \{0, 2, 0\}, 2\rangle$ com uma parcela de baixa amplitude e alta frequência do estado $|\{0, 2, 0\}, \{0, 0, 0\}, 0\rangle$. Para o outro canal, isto é, no caso $B_z = -(\epsilon_c + U) + 2U'$, o estado intermediário é uma combinação de alta amplitude e baixa frequência do estado $|\{0, 2, 0\}, \{0, 0, 0\}, 0\rangle$ com uma parcela de baixa amplitude e alta frequência do estado $|\{0, 2, 0\}, \{0, 2, 0\}, 2\rangle$. Esses comportamentos podem ser observados na Fig. (4.10).

Para os casos cujo estado inicial é $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ e $|\downarrow, \uparrow, \emptyset\rangle$ as dinâmicas são qualitativamente similares as apresentadas e as condições de ressonância são compatíveis com as apresentadas frente a troca de $B \rightarrow -B$. Tal característica pode ser visualizada na Fig. (4.11).

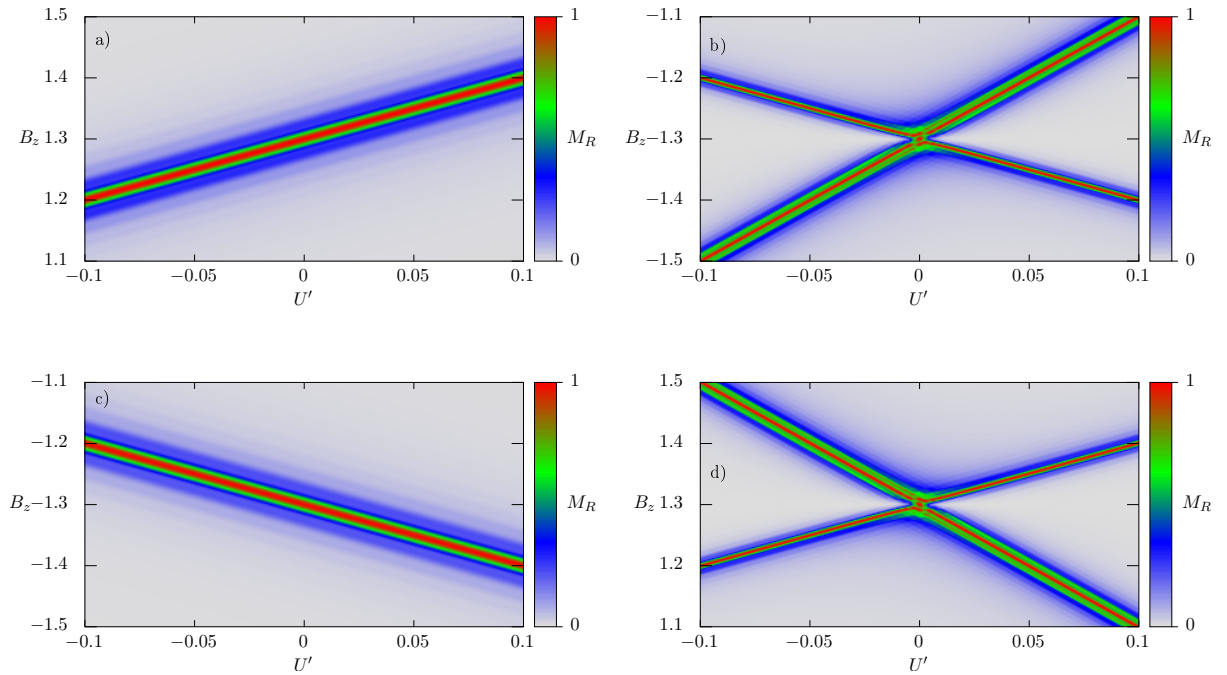


Fig. 4.11: *Máximo do valor esperado do número de partículas no poço da direita ($M(N_R)$) para os estados iniciais $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ (a), $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ (b), $|\uparrow, \uparrow, \emptyset\rangle$ (c), $|\downarrow, \uparrow, \emptyset\rangle$ (d), com $J = 0.005$, $\epsilon_c = 0.3$, numa região de U' próximos aos valores de ^{23}Na e ^{87}Rb .*

4.4 Três poços com campo magnético variável

Nesta seção vamos explorar a possibilidade de empregar variações temporais do campo magnético aplicado para controlar processos de transmissão de uma partícula entre as extremidades de um sistema de três poços. De forma genérica, basta considerar que o campo magnético do hamiltoniano (4.3) é uma função dependente do tempo, de forma que aquele hamiltoniano é reescrito como

$$H_B(t) = H + B_z(t)S_C^z. \quad (4.7)$$

Aqui, vamos considerar apenas uma dependência temporal simples de tratar, que considera $B_z(t)$ variando por uma sequência de valores fixos por intervalos de tempo finitos, podendo ser nulo em alguns intervalos enquanto em outros assume um valor correspondente às condições de ressonância estudadas na seção anterior (restringindo a análise a um sistema de dois bósons de spin 1). Continuaremos mantendo os níveis de energia $\epsilon_L = \epsilon_R = 0$, a interação de Hubbard como a unidade de energia ($U = 1$), e tendo U' e ϵ_C como parâmetros de controle para determinar os possíveis B_z de ressonância a partir de um dado estado inicial com uma partícula na esquerda e outra no centro.

O primeiro caso que apresentaremos é a evolução temporal a partir do estado inicial $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$. Conforme descrito na seção anterior, para a condição $B_z = -(\epsilon_C + U) - U'$ o sistema tem uma evolução cíclica seguindo a sequência de transições:

$$\bullet \quad |\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle \rightarrow |\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle \rightarrow |\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle \rightarrow |\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle.$$

Entretanto, podemos alterar o campo magnético na metade do período, de oscilação de forma a “congelar” o sistema no estado $|\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle$. Para isso supomos o seguinte procedimento:

- O estado inicial é preparado.
- No instante $t = 0$ são ligados o tunelamento e o campo, deixando-se o sistema evoluir naturalmente.
- Decorrido um tempo suficiente para que seja atingida a probabilidade máxima de encontrar uma partícula no poço da direita, o campo é desligado.
- Devido às condições energéticas, o sistema se mantém nesse estado.

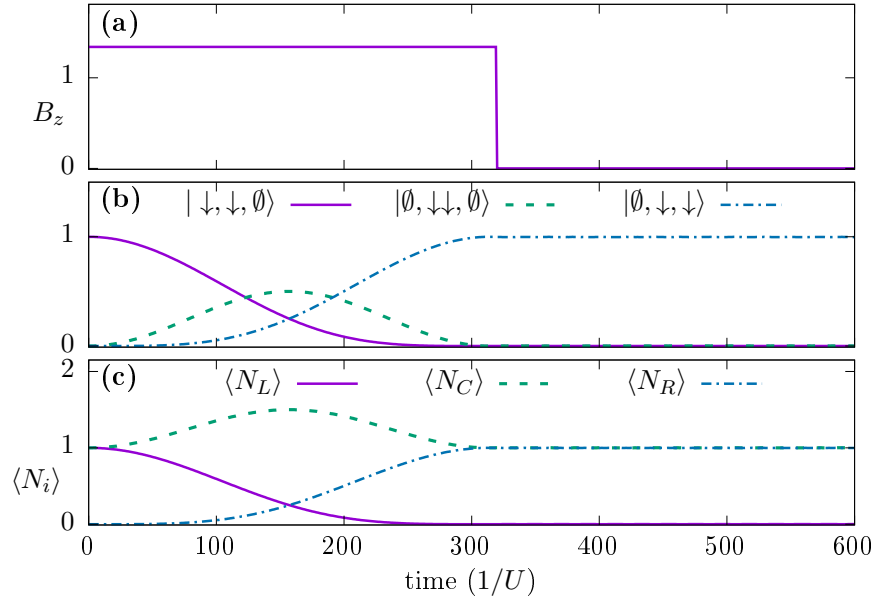


Fig. 4.12: *Varição temporal da intensidade do campo magnético (a), probabilidades dos estados indicados (b), e valor esperado do número de partículas em cada poço (c) para o estado inicial $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$, com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$ e $B_z = 1.34$.*

Podemos visualizar tal processo através da figura (4.12) onde vemos que o sistema inicialmente evolui de forma similar ao exemplo da seção anterior. Porém, após a alteração do campo magnético a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle$ é maior que 99% e o valor esperado do número de partículas no poço da direita mantém-se essencialmente igual a um.

Ainda nestas mesmas condições, podemos aumentar a quantidade de alterações no campo magnético, seguindo, por exemplo, os seguintes passos:

- O estado inicial é preparado.
- Em $t = 0$ é ligado o tunelamento, e o sistema passa a evoluir. Devido à condição energética, não há probabilidade significativa de encontrar uma partícula no poço da direita.
- Após um determinado intervalo de tempo, modifica-se o campo magnético para atingir a condição de ressonância e o sistema passa a oscilar.
- Decorrido um tempo suficiente para que seja alcançado o valor máximo do número médio de partículas no poço da direita para essas condições, o campo magnético

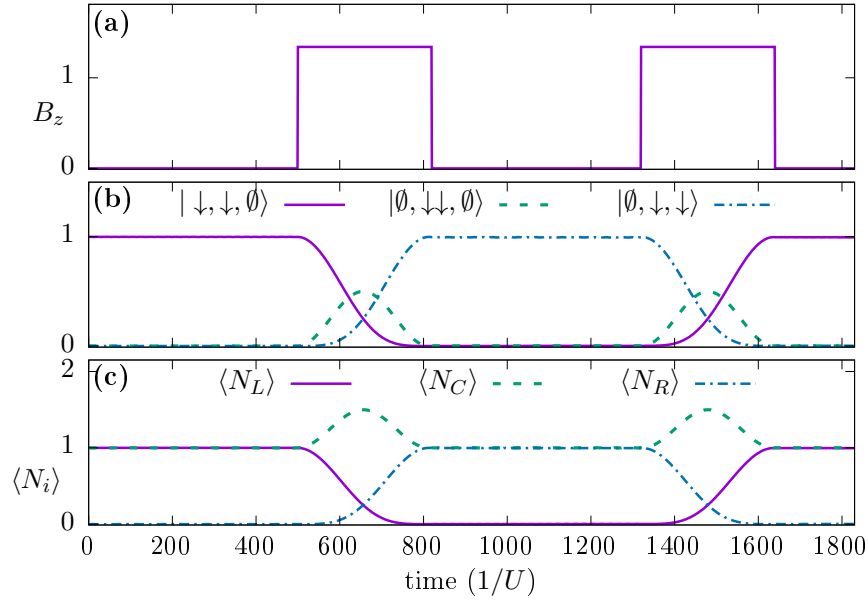


Fig. 4.13: Intensidade do campo magnético (a), probabilidades dos estados envolvidos (b), e valor esperado do número de partículas nos poços (c), para o estado inicial $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$ e $B_z = 1.34$ nos intervalos em que é não nulo.

é desligado. Novamente, a conservação de energia implica na manutenção desta configuração.

- Após um determinado intervalo de tempo, o campo magnético é ligado novamente.
- Decorrido um tempo suficiente para atingir grande probabilidade de encontrar o sistema no estado inicial, desliga-se novamente o campo magnético.
- A partir do desligamento do campo, o sistema permanece essencialmente no estado inicial.

Tal processo pode ser visualizado através da figura (4.13) onde podemos notar o platô central com a grande probabilidade de encontrar o estado $|\emptyset, \downarrow, \downarrow\rangle$, enquanto no platô da direita o estado majoritário é $|\downarrow, \downarrow, \emptyset\rangle$.

Podemos analisar os mesmos procedimentos para o estado inicial, $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$. Inicialmente, consideramos o desligamento do campo apenas uma vez durante a evolução, conforme Fig. 4.14 (a). Neste caso, escolhemos o tempo de desligamento do campo igual à metade do período de oscilação. Assim, temos grande probabilidade obter o estado final $|\emptyset, \downarrow, \uparrow\rangle$ [Fig. 4.14(b)], com o esvaziamento do poço da direita [Fig. 4.14(c)].

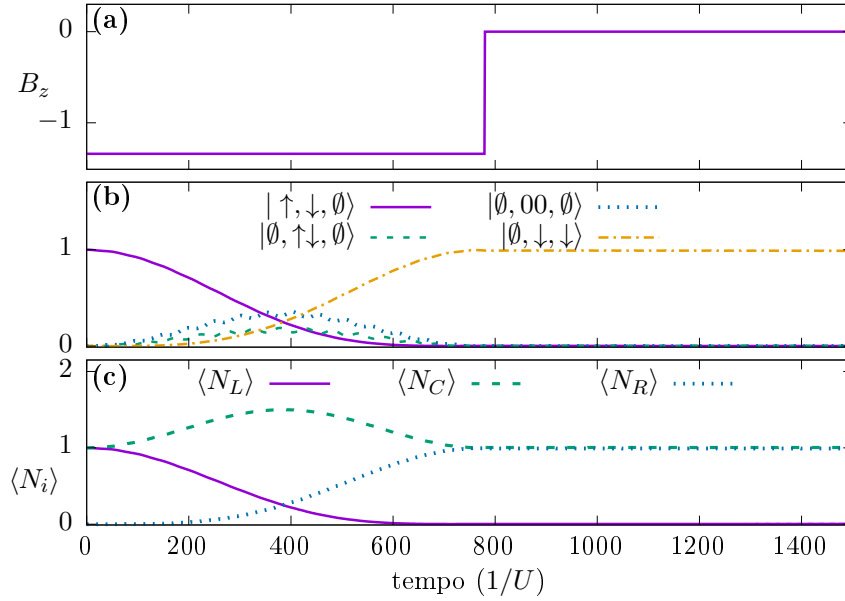


Fig. 4.14: Mudança da intensidade do campo magnético de $B_z = -1.34$ para zero (a), com as consequentes evoluções temporais das probabilidades dos estados envolvidos (b) e do valor esperado do número de partículas em cada poço (c) para o estado inicial $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$, com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$.

Na seção anterior vimos que para este estado inicial ($|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$) há duas condições de ressonância não triviais, descritas pelas equações $B_z = -(\epsilon_c + U) - U'$ e $B_z = -(\epsilon_c + U) + 2U'$. Para explorar isso, no próximo exemplo, ilustrado na Fig. 4.15(a), a intensidade do campo magnético será diferente em cada uma das vezes que for aplicado. O detalhamento do processo é:

- O estado inicial é preparado, com campo nulo.
- Em $t = 0$ é ligado o tunelamento, e o sistema passa a evoluir. Devido à condição energética, não há probabilidade significativa de encontrar uma partícula no poço da direita.
- Após um determinado intervalo, aplica-se o campo magnético na condição de ressonância $B_z = -(\epsilon_c + U) - U'$ e o sistema passa a oscilar.
- Decorrido um tempo suficiente para que seja atingido o valor máximo do número médio de partículas no poço da direita permitido por essas condições, o campo magnético é desligado.

- Após um novo intervalo de tempo, o campo magnético é religado, agora na condição de ressonância $B_z = -(\epsilon_c + U) + 2U'$.
- Decorrido um tempo suficiente para que exista grande probabilidade de encontrar o sistema no estado inicial, desliga-se novamente o campo magnético.
- A partir do desligamento do campo, o sistema permanece essencialmente no estado inicial.

Comparando as Figs. 4.13 e 4.15, destacamos que os intervalos de tempo nos quais ocorrem as transições entre estados diferem em duração bem como nas probabilidades dos estados intermediários para diferentes condições de ressonância. Como consequência, o valor esperado do spin total difere durante essas duas evoluções. Essas diferenças foram mostradas individualmente na seção anterior, e agora aparecem na mesma evolução temporal, como mostra a Fig. 4.16(b).

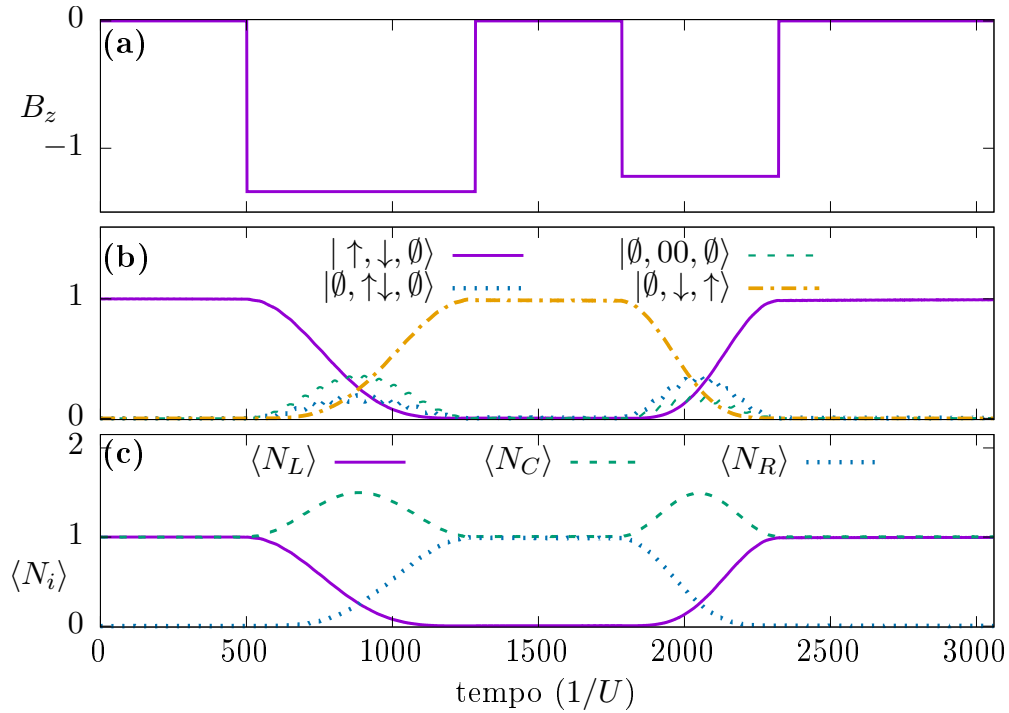


Fig. 4.15: Variações da intensidade do campo magnético (a), com $B = -1.34$ no primeiro platô não nulo e $B_z = -1.22$ no segundo. Variações correspondentes nas probabilidades dos estados da base (b) e valor esperado do número de partículas em cada poço (c) para o estado inicial $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$, com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$.

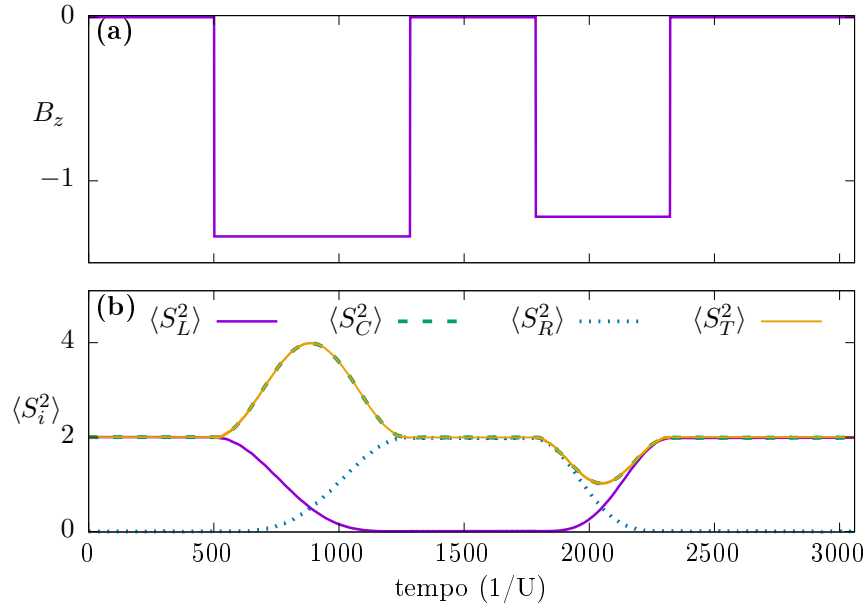


Fig. 4.16: Variação temporal do campo magnético (a), do valor esperado do quadrado do spin total e de cada poço (b) para o estado inicial $|\uparrow, \downarrow, \emptyset\rangle$ com $J = 0.005$, $U' = 0.04$, $\epsilon_C = 0.3$, $B_z = -1.34$ no primeiro platô não nulo e -1.22 no segundo.

Os outros possíveis estados iniciais ($|\uparrow, \uparrow, \emptyset\rangle$ e $|\downarrow, \uparrow, \emptyset\rangle$) têm comportamentos equivalentes, diferindo apenas pelo sinal de B_z .

Os exemplos aqui apresentados ilustram como o campo magnético pode ser usado para alterar a configuração do sistema ou para alternar estados com a frequência desejada.

Capítulo 5

Conclusões

O tópico central desta tese foi o estudo da dinâmica de sistemas de bósons de spin 1 em um número definido de poços de potencial, o que constitui um modelo para sistemas de átomos ultrafrios confinados em redes ópticas. Levando em conta uma interação dependente de spin como extensão do modelo de Bose-Hubbard usual, procuramos descrever processos dinâmicos a partir de estados iniciais definidos, explorando diversos conjuntos de parâmetros do sistema.

No capítulo 2 apresentamos o hamiltoniano utilizado para estudo deste sistema e estabelecemos uma metodologia baseada na diagonalização exata do modelo, verificando as simetrias provenientes da presença do spin que impõem algumas condições sobre os estados possíveis. Discutimos a construção das bases escolhidas para representação do sistema, bem como as limitações do método frente ao número de partículas escolhidos. Completamos esse capítulo discutindo nossa abordagem à dinâmica quântica, explicitando os parâmetros de controle e as quantidades físicas que serviram de base para a análise dos capítulos seguintes.

No capítulo 3 estudamos a dinâmica do sistema de dois poços. Iniciamos a análise para dois bósons sem spin, explorando sua solução exata para identificar as matrizes de representação e as frequências de tunelamento. Apresentamos as principais possibilidades de dinâmica e as condições energéticas relacionadas, destacando o tunelamento de pares e tunelamento condicional. Voltando ao caso de nosso interesse, ou seja, investigar a influência do spin na dinâmica do sistema, identificamos que as matrizes de representação para os subespaços de spin total definido têm semelhança com as matrizes de representação do caso sem spin, podendo assim obter as equações de evolução temporal para o sistema de dois poços com átomos de spin 1. Com base nisso, exemplificamos as diferenças na frequência de tunelamento de pares em cada um dos casos de spin total possível, $s_T = 0, 2$. De forma mais exploratória, varremos o conjunto de parâmetros do hamiltoniano,

investigando o valor máximo para o número de partículas no poço da direita para uma condição inicial com partículas apenas no poço da esquerda. Aí verificamos que há dinâmica relevante apenas nas condições de ressonância definidas pela conservação de energia. Além disso, apresentamos as correlações de spin entre os poços, que podem ser positivas ou negativas. Repetimos o processo para três partículas em dois poços, explorando os possíveis casos de tunelamento e determinando valores do conjunto de parâmetros do hamiltoniano que maximizam a dinâmica.

No capítulo 4 voltamos nossa atenção para um sistema de três poços, em geometria linear e que pode ser relacionada a um transistor de efeito de campo. Iniciamos a análise com uma partícula no poço da esquerda e uma no poço central, com interesse principal no transporte do átomo do poço da esquerda para o da direita. As diferentes possibilidades de spin total inicial criam diferentes canais que podem ser usados, cada um com condições de ressonância específicas. Novamente, exploramos o espaço de parâmetros, buscando as condições energéticas que maximizam a dinâmica, e descrevemos os processos caso a caso, destacando aqueles mais favoráveis ao nosso interesse. Aumentando o número de partículas em uma unidade, repetimos o processo para descrição do estado inicial com duas partículas no poço da esquerda e um no poço central. Posteriormente, investigamos o comportamento deste sistema submetido a aplicação de um campo magnético de intensidade fixa atuando sobre o poço central. Neste caso, o spin total do sistema não é mais uma quantidade conservada, o que nos motivou a utilizar uma outra base de estados do sistema, agora especificando o número de átomos em cada estado de spin individual. Explorando os diferentes estados iniciais possíveis, relatamos como a presença do campo altera as condições de ressonância e conseqüentemente os tempos de oscilação da ocupação dos poços. Por último, alteramos a intensidade do campo ao longo de tempo, restringindo-nos a valores constantes por intervalo de tempo, como forma de provocar oscilações de período controlável nas ocupações dos poços.

Em suma, exploramos o espaço de parâmetros que, em princípio, são ajustáveis em realizações experimentais desse tipo de sistema. Nessa investigação, identificamos diversos tipos de processos dinâmicos relevantes e a importância relativa de cada um nos diversos regimes definidos por relações que se mostraram bastante estritas entre os parâmetros.

A partir do conhecimento acumulado até o momento sobre o problema, pretendemos buscar situações possíveis de implementação em laboratório e de interesse para possíveis aplicações, que naturalmente estariam enquadradas no campo da atomtrônica, conforme comentamos na Introdução. Neste sentido, e tendo em conta a nossa ênfase no papel

do spin, é interessante explorar o transporte dependente de spin em geometrias do tipo transistor, focando em estados iniciais e finais com polarização de spin. Isso significa, do ponto de vista metodológico, o controle da condição inicial dentro da base de estados dada pela Eq. (2.8). Ainda nesta linha, uma aproximação mais realista ao comportamento de transistor deve passar pelo aumento do número de partículas (na medida do possível) e uma formulação que inclua potenciais químicos nos poços laterais, o que corresponderia a conexões com reservatórios de partículas nos terminais fonte e dreno do dispositivo [52].

Apêndice A

Mudança de base

Neste apêndice, apresentamos em detalhe a transformação de base necessária para o estudo deste trabalho uma vez que o hamiltoniano envolve operadores de criação e aniquilação de partículas em poços definidos e com estado de spin definido. Para isso, é conveniente decompor os vetores da base apresentados na Eq. (2.5) em termos de vetores que especificam os números de ocupação de cada estado de spin em cada poço. Para exemplificar o método usaremos o modelo de dois poços, cujo o vetor em questão tem a seguinte forma

$$|N_L^0, N_L^1, N_L^{-1}; N_R^0, N_R^1, N_R^{-1}\rangle, \quad (\text{A.1})$$

onde N_i^j especifica o número de partículas no estado de spin j no poço i .

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

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_L &= \sum_{\sigma\sigma'} L_\sigma^\dagger \mathbf{T}_{\sigma\sigma'} L_{\sigma'}, \\ \mathbf{S}_R &= \sum_{\sigma\sigma'} R_\sigma^\dagger \mathbf{T}_{\sigma\sigma'} R_{\sigma'}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde aparecem as matrizes de spin 1

$$T_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

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

$$T_+ = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_- = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

A partir da Eq. (A.2) e usando as matrizes (A.3), podemos escrever as componentes do operador de spin \mathbf{S}_L

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

$$\mathbf{S}_L^y = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-L_1^\dagger L_0 + L_{-1}^\dagger L_0 + L_0^\dagger L_1 - L_0^\dagger L_{-1} \right), \quad (\text{A.6})$$

$$\mathbf{S}_L^z = L_1^\dagger L_1 - L_{-1}^\dagger L_{-1}, \quad (\text{A.7})$$

e ainda

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

$$\mathbf{S}_L^- = \sqrt{2} \left(L_{-1}^\dagger L_0 + L_0^\dagger L_1 \right), \quad (\text{A.9})$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$|0, 1, 2\rangle, |0, 0, 3\rangle, |1, 0, 2\rangle, |2, 0, 1\rangle, |1, 1, 1\rangle; \quad (\text{A.13})$$

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

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

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

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

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

$$\Gamma(|\{N_L, N_R\}, \{s_L, s_R\}, s_t\rangle, s_{tz}) = \sum_{i=-s_L}^{s_L} \sum_{j=-s_R}^{s_R} C_{s_L, i; s_R, j}^{s_t, s_{tz}} B_L(N_L, s_L, i) \otimes B_R(N_R, s_R, j). \quad (\text{A.14})$$

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

$$\begin{aligned} \Gamma(|E_2\rangle, 0) &= \sum_{i=-1}^1 \sum_{j=-1}^1 C_{1, i; 1, j}^{0, 0} B_L(1, 1, i) \otimes B_R(1, 1, j) = \\ &= C_{1, -1; 1, 1}^{0, 0} B_L(1, 1, -1) \otimes B_R(1, 1, 1) + C_{1, 0; 1, 0}^{0, 0} B_L(1, 1, 0) \otimes B_R(1, 1, 0) \\ &+ C_{1, 1; 1, -1}^{0, 0} B_L(1, 1, 1) \otimes B_R(1, 1, -1) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

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

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

$$\Gamma(|E_2\rangle, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 1, 0; 0, 0, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0, 0; 1, 0, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 0, 1; 0, 1, 0\rangle. \quad (\text{A.16})$$

Embora os cálculos para $N_t = 2$ não sejam muito complexos, encontrar todos os elementos e os respectivos autovalores e autovetores nos casos em que $N_t \geq 3$, em dois ou mais poços, é um trabalho de grandes proporções sem a ajuda de métodos computacionais. Por isso, utilizamos a diagonalização numérica da matriz do hamiltoniano em cada caso estudado, obtendo autovalores e autovetores.

Apêndice B

Evolução temporal

Nesta apêndice exemplificaremos em detalhe a aplicação dos operadores, como número de partículas e spin, sobre um estado genérico pertencente à base, bem como as transformações envolvidas. Denominamos $|S_l^z\rangle$ o l -ésimo elemento da base escolhida, onde $l \in [1, d]$ e d é a dimensão do espaço de Hilbert, no qual depende do subespaço escolhido. Construindo a matriz de representação do hamiltoniano com a base escolhida, podemos diagonalizar e obter um conjunto de autovalores (E_j) e um conjunto de autovetores ($|E_j\rangle$). Com estes valores obtidos na diagonalização, podemos escrever os autovetores $|E_j\rangle$ em termos dos estados $|S_l^z\rangle$:

$$|E_j\rangle = \sum_{l=1}^d h_{j,l} |S_l^z\rangle. \quad (\text{B.1})$$

Para o nosso caso, a matriz de representação do hamiltoniano é real, e portanto, simétrica. Por isso, os valores de $h_{j,l}$ são reais. Podemos inverter a essa representação e escrever

$$|S_j^z\rangle = \sum_{l=1}^d k_{j,l} |E_l\rangle. \quad (\text{B.2})$$

Por definição, o conjunto de autovetores formam uma matriz unitária $\{h\}$, e por isso, podemos dizer que $\{k\}$ é a inversa de $\{h\}$. Aplicando o operador evolução temporal sobre um estado $|S_j^z\rangle$ (da equação (B.2), temos

$$|S_j^z(t)\rangle = U(t) |S_j^z\rangle = \sum_{l=1}^d k_{j,l} e^{-iE_l t} |E_l\rangle, \quad (\text{B.3})$$

mas não sabemos como atuar os operadores sobre os estados $|E_l\rangle$, então reescreveremos o $|E_l\rangle$ em termos de $|S_z\rangle$ (dado pela equação (B.1)), logo

$$|S_j^z(t)\rangle = \sum_{l=1}^d k_{j,l} e^{-iE_l t} (|E_l\rangle) \quad (\text{B.4})$$

$$= \sum_{l=1}^d k_{j,l} e^{-iE_l t} \left(\sum_{m=1}^d h_{l,m} |S_m^z\rangle \right) \quad (\text{B.5})$$

$$= \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,l} h_{l,m} e^{-iE_l t} |S_m^z\rangle \quad (\text{B.6})$$

Aplicando o operador número de partículas na esquerda (N_L) na equação (B.6), obtemos

$$N_L |S_j^z(t)\rangle = \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,l} h_{l,m} e^{-iE_l t} N_L |S_m^z\rangle \quad (\text{B.7})$$

$$= \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,l} h_{l,m} e^{-iE_l t} N_m |S_m^z\rangle, \quad (\text{B.8})$$

onde N_m é o autovalor deste operador, ou seja, o número de partículas na esquerda do m-ésimo estado.

Então o valor esperado de N_L para o estado $|S_j^z(t)\rangle$ é

$$\begin{aligned} \langle S_j^z(t) | N_L |S_j^z(t)\rangle &= \sum_{n=1}^d \sum_{r=1}^d k_{j,n} h_{n,r} e^{-iE_n t} \langle S_r^z | \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,l} h_{l,m} e^{-iE_l t} N_m |S_m^z\rangle \\ &= \sum_{n=1}^d \sum_{r=1}^d \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,n} h_{n,r} k_{j,l} h_{l,m} e^{+iE_n t} e^{-iE_l t} N_m \langle S_r^z | |S_m^z\rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Como $\langle S_r^z | S_m^z\rangle = \delta_{r,m}$,

$$\begin{aligned} \langle S_j^z(t) | N_L |S_j^z(t)\rangle &= \sum_{n=1}^d \sum_{r=1}^d \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,n} h_{n,r} k_{j,l} h_{l,m} e^{+i(E_n - E_l)t} N_m \delta_{r,m} \\ &= \sum_{n=1}^d \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,n} h_{n,m} k_{j,l} h_{l,m} e^{+i(E_n - E_l)t} N_m, \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

que pode ser escrito como

$$\begin{aligned} & \langle S_j^z(t) | N_L | S_j^z(t) \rangle = \\ & = \sum_{n=1}^d \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,n} h_{n,m} k_{j,l} h_{l,m} N_m (\cos[(E_n - E_l)t] + i \sin[(E_n - E_l)t]), \end{aligned}$$

Mas, devido às propriedades das funções trigonométricas,

$$\langle S_j^z(t) | N_L | S_j^z(t) \rangle = \sum_{n=1}^d \sum_{l=1}^d \sum_{m=1}^d k_{j,n} h_{n,m} k_{j,l} h_{l,m} N_m (\cos[(E_n - E_l)t]). \quad (\text{B.11})$$

Este é o resultado final que pode ser usado para inferir tempos de transição e comportamento do sistema. Tal procedimento é apresentado para ilustrar as manipulações algébricas necessárias para obter a dependência temporal de algumas quantidades físicas nos casos estudados.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse, Berlin*, **22**, 261 (1924).
- [2] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases – Zweite Abhandlung”, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse, Berlin*, **1**, 3 (1925).
- [3] S. N. Bose, “Gesetz und Lichtquantenhypothese”, *Zeitschrift für Physik, Berlin*, **26**, 171 (1924).
- [4] W. Ketterle, “Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser”, *Rev. Mod. Phys.*, **74**, 1131 (2002).
- [5] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor”, *Science*, **269**, 198 (1995).
- [6] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, “Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions”, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 1687 (1995).
- [7] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms”, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 3969 (1995).
- [8] D. C. McKay and B. DeMarco, “Cooling in strongly correlated optical lattices: prospects and challenges”, *Reports on Progress in Physics*, **74**, 054401 (2011).

- [9] F. Schäfer, T. Fukuhara, S. Sugawa, Y. Takasu, and Y. Takahashi, “Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices”, *Nature Reviews Physics*, **2**, 411 (2020).
- [10] C. Gross and I. Bloch, “Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices”, *Science*, **357**, 995 (2017).
- [11] E. Cornell, “Very cold indeed: The nanokelvin physics of Bose-Einstein condensation”, *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, **101** (1996).
- [12] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands”, *Proceedings of the Royal Society A*, **273**, 238 (1963).
- [13] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2001.
- [14] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, and M. K. Oberthaler, “Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 010402 (2005).
- [15] H.-J. Chen, Y.-Q. Yu, D.-C. Zheng, and R. Liao, “Extended Bose-Hubbard model with cavity-mediated infinite-range interactions at finite temperatures”, *Scientific Reports*, **10**, 9076 (2020).
- [16] Y. Yanay, J. Braumüller, S. Gustavsson, W. D. Oliver, and C. Tahan, “Two-dimensional hard-core Bose-Hubbard model with superconducting qubits”, *npj Quantum Information*, **6**, 58 (2020).
- [17] T. Wang and X.-F. Zhang, “Quantum phase transition of the Bose-Hubbard model with anisotropic hopping on a cubic lattice”, *Phys. Rev. B*, **102**, 024522 (2020).
- [18] H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, J. Stenger, S. Inouye, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, “Observation of metastable states in spinor Bose-Einstein condensates”, *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 2228 (1999).
- [19] M. D. Barrett, J. A. Sauer, and M. S. Chapman, “All-optical formation of an atomic Bose-Einstein condensate”, *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 010404 (2001).
- [20] M. Swar, D. Roy, D. D. S. Chaudhuri, S. Roy, and H. Ramachandran, “Measurements of spin properties of atomic systems in and out of equilibrium via noise spectroscopy”, *Opt. Express*, **26**, 32168 (2018).

- [21] T.-L. Ho, “Spinor Bose condensates in optical traps”, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 742 (1998).
- [22] M. Melé-Messeguer, B. Juliá-Díaz, A. Polls, and L. Santos, “Thermal spin fluctuations in spinor Bose-Einstein condensates”, *Phys. Rev. A*, **87**, 033632 (2013).
- [23] M. Melé-Messeguer, S. Paganelli, B. Juliá-Díaz, A. Sanpera, and A. Polls, “Spin-driven spatial symmetry breaking of spinor condensates in a double well”, *Phys. Rev. A*, **86**, 053626 (2012).
- [24] B. Juliá-Díaz, M. Melé-Messeguer, M. Guilleumas, and A. Polls, “Spinor Bose-Einstein condensates in a double well: Population transfer and Josephson oscillations”, *Phys. Rev. A*, **80**, 043622 (2009).
- [25] C. C. N. Kuhn, X. W. Guan, A. Foerster, and M. T. Batchelor, “Universality class of quantum criticality for strongly repulsive spin-1 bosons with antiferromagnetic spin-exchange interaction”, *Phys. Rev. A*, **85**, 043606 (2012).
- [26] A. Imambekov, M. Lukin, and E. Demler, “Spin-exchange interactions of spin-one bosons in optical lattices: Singlet, nematic, and dimerized phases”, *Phys. Rev. A*, **68**, 063602 (2003).
- [27] S. Tsuchiya, S. Kurihara, and T. Kimura, “Superfluid–Mott insulator transition of spin-1 bosons in an optical lattice”, *Phys. Rev. A*, **70**, 043628 (2004).
- [28] K. V. Krutitsky and R. Graham, “Spin-1 bosons with coupled ground states in optical lattices”, *Phys. Rev. A*, **70**, 063610 (2004).
- [29] T. Kimura, S. Tsuchiya, and S. Kurihara, “Possibility of a first-order superfluid–Mott-Insulator transition of spinor Bosons in an optical lattice”, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 110403 (2005).
- [30] K. V. Krutitsky, M. Timmer, and R. Graham, “First- and second-order superfluid–Mott-insulator phase transitions of spin-1 bosons with coupled ground states in optical lattices”, *Phys. Rev. A*, **71**, 033623 (2005).
- [31] R. V. Pai, K. Sheshadri, and R. Pandit, “Phases and transitions in the spin-1 Bose-Hubbard model: Systematics of a mean-field theory”, *Phys. Rev. B*, **77**, 014503 (2008).
- [32] T. Ohmi and K. Machida, “Bose-Einstein condensation with internal degrees of freedom in alkali atom gases”, *Journal of the Physical Society of Japan*, **67**, 1822 (1998).

- [33] O. E. Müstecaplıoğlu, W. Zhang, and L. You, “Quantum dynamics of a spin-1 condensate in a double-well potential”, *Phys. Rev. A*, **75**, 023605 (2007).
- [34] A. Wagner, C. Bruder, and E. Demler, “Spin-1 atoms in optical superlattices: Single-atom tunneling and entanglement”, *Phys. Rev. A*, **84**, 063636 (2011).
- [35] A. Wagner, A. Nunnenkamp, and C. Bruder, “Mean-field analysis of spinor bosons in optical superlattices”, *Phys. Rev. A*, **86**, 023624 (2012).
- [36] J. Sebby-Strabley, B. L. Brown, M. Anderlini, P. J. Lee, W. D. Phillips, J. V. Porto, and P. R. Johnson, “Preparing and probing atomic number states with an atom interferometer”, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 200405 (2007).
- [37] C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schau, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr, “Single-spin addressing in an atomic Mott insulator”, *Nature*, **471**, 319 (2011).
- [38] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, “Quantum simulations with ultracold quantum gases”, *Nature Physics*, **8**, 267 (2012).
- [39] M. Endres, M. Cheneau, T. Fukuhara, C. Weitenberg, P. Schauf, C. Gross, L. Mazza, M. C. Bañuls, L. Pollet, I. Bloch, and S. Kuhr, “Single-site- and single-atom-resolved measurement of correlation functions”, *Applied Physics B*, **113**, 27 (2013).
- [40] A. Albert, C. Robens, W. Alt, S. Brakhane, M. Karski, R. Reimann, A. Widera, and D. Meschede, “Super-resolution microscopy of single atoms in optical lattices”, *New Journal of Physics*, **18**, 053010 (2016).
- [41] M. Boll, T. A. Hilker, G. Salomon, A. Omran, J. Nespolo, L. Pollet, I. Bloch, and C. Gross, “Spin- and density-resolved microscopy of antiferromagnetic correlations in Fermi-Hubbard chains”, *Science*, **353**, 1257 (2016).
- [42] H. N. Dai, B. Yang, A. Reingruber, X. F. Xu, X. Jiang, Y. A. Chen, Z. S. Yuan, and J. W. Pan, “Generation and detection of atomic spin entanglement in optical lattices”, *Nature Physics*, **12**, 783 (2016).
- [43] C. Gross and I. Bloch, “Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices”, *Science*, **357**, 995 (2017).

- [44] E. Braaten and H.-W. Hammer, “Universality in few-body systems with large scattering length”, *Physics Reports*, **428**, 259 (2006).
- [45] D. Blume, “Few-body physics with ultracold atomic and molecular systems in traps”, *Reports on Progress in Physics*, **75**, 046401 (2012).
- [46] M. A. García-March, B. Juliá-Díaz, G. E. Astrakharchik, J. Boronat, and A. Polls, “Distinguishability, degeneracy, and correlations in three harmonically trapped bosons in one dimension”, *Phys. Rev. A*, **90**, 063605 (2014).
- [47] K. W. Wilsmann, L. H. Ymai, A. P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, “Control of tunneling in an atomtronic switching device”, *Communications Physics*, **1**, 91 (2018).
- [48] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, “Cold Bosonic atoms in optical lattices”, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 3108 (1998).
- [49] D. W. S. Carvalho, A. Foerster, and M. A. Gusmão, “Ground states of spin-1 bosons in asymmetric double wells”, *Phys. Rev. A*, **91**, 033608 (2015).
- [50] B. T. Seaman, M. Krämer, D. Z. Anderson, and M. J. Holland, “Atomtronics: Ultracold-atom analogs of electronic devices”, *Phys. Rev. A*, **75**, 023615 (2007).
- [51] J. Cooper, R. A. Pepino, D. Z. Anderson, and M. J. Holland, “Atomtronic Circuits of Diodes and Transistors”, *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 140405 (2009).
- [52] R. A. Pepino, J. Cooper, D. Meiser, D. Z. Anderson, and M. J. Holland, “Open quantum systems approach to atomtronics”, *Phys. Rev. A*, **82**, 013640 (2010).
- [53] A. Wagner, C. Bruder, and E. Demler, “Spin-1 atoms in optical superlattices: Single-atom tunneling and entanglement”, *Physical Review A*, **84**, 063636 (2011).
- [54] D. W. Carvalho, A. Foerster, and M. A. Gusmão, “Coupled dynamics of interacting spin-1 bosons in a double-well potential”, *Physical Review A*, **97** (2018).
- [55] S. Zöllner, H.-D. Meyer, and P. Schmelcher, “Tunneling dynamics of a few bosons in a double well”, *Phys. Rev. A*, **78**, 013621 (2008).
- [56] S. Zöllner, H.-D. Meyer, and P. Schmelcher, “Few-Boson dynamics in double wells: From single-atom to correlated pair tunneling”, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 040401 (2008).

- [57] B. Chatterjee, I. Brouzos, S. Zöllner, and P. Schmelcher, “Few-boson tunneling in a double well with spatially modulated interaction”, *Phys. Rev. A*, **82**, 043619 (2010).
- [58] S. Zöllner, H.-D. Meyer, and P. Schmelcher, “Ultracold few-boson systems in a double-well trap”, *Phys. Rev. A*, **74**, 053612 (2006).
- [59] S. Fölling, S. Trotzky, P. Cheinet, M. Feld, R. Saers, A. Widera, T. Müller, and I. Bloch, “Direct observation of second-order atom tunnelling”, *Nature*, **448**, 1029 (2007).
- [60] K. Winkler, G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. H. Denschlag, A. J. Daley, A. Kantian, H. P. Buchler, and P. Zoller, “Repulsively bound atom pairs in an optical lattice”, *Nature*, **441**, 853 (2006).
- [61] L.-M. Duan, E. Demler, and M. D. Lukin, “Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices”, *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 090402 (2003).