

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

LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON EM CONDENSADOS
DE BOSE-EINSTEIN

Jardel Caminha Carvalho Cestari

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Miguel Gusmão e da Profa. Angela Foerster, apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre

Março - 2011

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos que me ajudaram ao longo desta jornada:

- Aos meus pais, que me possibilitaram perseguir os meus sonhos.
- À minha namorada, pelo carinho e apoio.
- Aos professores Miguel Gusmão e Angela Foerster, pela orientação e amizade.
- Aos colegas da sala M 208, pelas discussões animadas e frutíferas.

Muito Obrigado

Resumo

Investigamos a transição de localização induzida por desordem em condensados de Bose-Einstein em redes unidimensionais, no limite não interagente, utilizando os modelos de Anderson e de Aubry-André para a desordem. Através de diagonalização numérica exata, mostramos que, além da fração de superfluido, usualmente empregada, outras ferramentas, como o emaranhamento e a fidelidade, são indicadores claros da transição. Os valores críticos que encontramos para a amplitude da desordem estão de acordo com os resultados conhecidos para a transição de Anderson nos dois modelos. É interessante ressaltar que a fidelidade exhibe boa precisão mesmo para redes pequenas. Efeitos do tamanho do sistema são analisados em detalhe para os dois modelos. Isto inclui a determinação de uma lei de escala de tamanho finito para a amplitude de desordem crítica no modelo de Anderson. Já no modelo de Aubry-André observamos que efeitos de tamanho finito são muito menos pronunciados, estando basicamente associados a diferenças entre tamanho de rede e periodicidade do potencial.

Abstract

We investigate the disorder-induced localization transition in Bose-Einstein condensates on one-dimensional lattices, in the non-interacting limit, utilizing the Anderson and Aubry-André models for disorder. Using exact numerical diagonalization, we show that, in addition to the standard superfluid fraction, other tools such as the entanglement and fidelity can provide clear signatures of the transition. The critical values we find for the disorder amplitude are in agreement with known results for the Anderson transition in both models. Interestingly, the fidelity exhibits good sensitivity even for small lattices. System-size effects are analyzed in detail for both models. This includes the determination of a finite-size-scaling law for the critical disorder strength in the case of the Anderson model. For the Aubry-André model we observe that finite-size effects are much less pronounced, being basically associated with the mismatching between lattice size and periodicity of the potential.

Sumário

1	Introdução	1
2	Metodologia	7
2.1	Detecção da transição de Anderson	7
2.1.1	Fração de superfluido	7
2.1.2	Emaranhamento	10
2.1.3	Fidelidade	13
2.2	Métodos numéricos	15
3	Localização de Anderson no potencial de Aubry-André	16
3.1	Fração de superfluido	17
3.2	Emaranhamento	18
3.3	Fidelidade	20
3.4	Redes pequenas	21
4	Localização de Anderson em um potencial aleatório	23
4.1	Fração de superfluido	24
4.2	Emaranhamento	25
4.3	Fidelidade	27
4.4	Escala de tamanho finito	29
5	Conclusão	31
5.1	Considerações Finais	31
5.2	Perspectivas Futuras	32

Apêndices	34
A Representação matricial do Hamiltoniano de Bose-Hubbard	34
B Exemplo de programa utilizado para os cálculos numéricos	37
C Trabalho publicado	40
Referências Bibliográficas	47

Capítulo 1

Introdução

A condensação de Bose-Einstein foi prevista por A. Einstein [1,2] e S. Bose [3], em 1925. O fenômeno ocorre em um gás de bósons abaixo de uma temperatura crítica, quando todos os bósons passam a ocupar o estado fundamental formando um gás quântico degenerado.

A primeira realização experimental de um condensado de Bose-Einstein em gases atômicos diluídos ocorreu em 1995 [4]. Desde então, a pesquisa na área de átomos ultrafrios avançou enormemente. Recentemente, sistemas de átomos ultrafrios em redes ópticas, nos quais um condensado bosônico é colocado em um potencial periódico obtido através de padrões estacionários de interferência de laser, vêm sendo muito estudados e utilizados para a investigação de transições de fase quânticas, devido ao grande controle experimental sobre os parâmetros do sistema. Por exemplo, a intensidade da interação entre os átomos pode ser ajustada independentemente de outros parâmetros [5].

Um condensado de Bose-Einstein não interagente no seu estado fundamental é superfluido, ou seja, flui irrotacionalmente e sem viscosidade. Se aumentarmos a intensidade da interação repulsiva entre os átomos, U , acima de um valor crítico U_c , a superfluididade é destruída e se forma um isolante de Mott [6,7], o tunelamento dos bósons entre os sítios da rede óptica é suprimido.

Outro tipo de transição superfluido-isolante que tem sido muito estudada em condensados de Bose-Einstein, e que constitui o tema central desta dissertação, é devida à desordem. A localização de ondas em meios com desordem foi prevista por Anderson em 1958, no seu trabalho “*Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*” [8], no contexto de elétrons não interagentes em um cristal desordenado. O modelo atribui a cada sítio de um cristal tridimensional um único nível de energia acessível aos elétrons, com a energia desse nível variando aleatoriamente entre os sítios. Anderson mostrou que, para um valor fixo da amplitude de tunelamento entre os sítios, acima de uma certa amplitude de desordem Δ (largura da distribuição de energias locais) o transporte entre os sítios é suprimido. Nesse modelo,

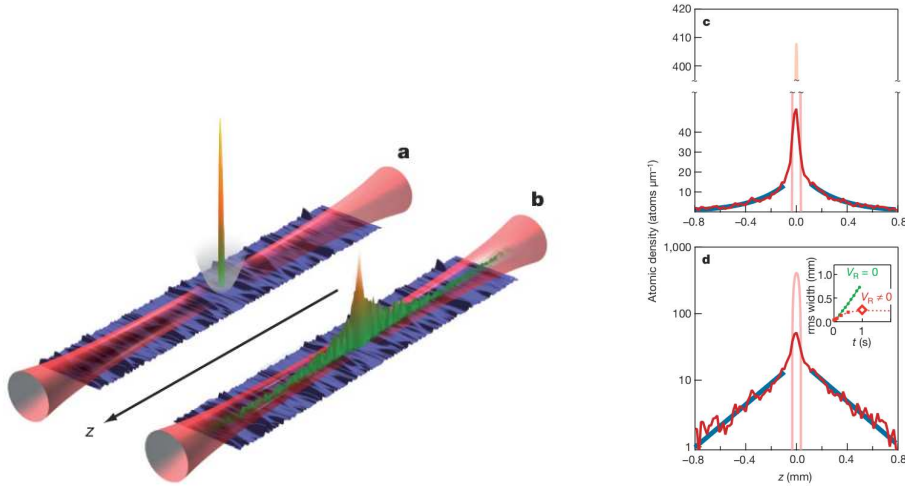


Figura 1.1: Figura retirada da referência [21]. **a:** Inicialmente o condensado está aprisionado. Um potencial aleatório de amplitude pequena está presente. **b:** Quando libertado, o condensado começa a se expandir, e então localiza. **c, d:** Perfis de densidade do condensado após a expansão, em escalas linear e semilogarítmica. A densidade decai exponencialmente ao longo do eixo z .

sistemas de dimensionalidade $d < 3$ não passam por uma transição, pois qualquer amplitude de desordem $\Delta > 0$ resulta em localização. Anderson recebeu o prêmio Nobel de Física em 1977 por sua descoberta.

Outro modelo muito estudado de “desordem” em redes é o de Aubry-André [9], no qual as energias locais apresentam uma variação periódica, mas com período incomensurável com o da rede. Este tipo de rede também é conhecido como bicromática ou quase periódica e tem realização experimental para sistemas de átomos ultrafrios [10, 11]. Assim como no caso do modelo de Anderson para a desordem, aqui também o sistema perde a simetria de translação, embora o potencial de Aubry-André seja determinado em qualquer ponto. Diferentemente do modelo de Anderson, a transição superfluido-isolante ocorre já em sistemas unidimensionais para uma amplitude crítica do potencial incomensurável $\Delta_c \neq 0$.

O fenômeno da localização de Anderson é universal e ocorre para qualquer tipo de onda não interagente, por exemplo a localização de fótons foi observada diretamente em laboratório [12–15]. Os avanços recentes em experimentos com átomos ultrafrios abriram a possibilidade de estudar a localização de Anderson nessa classe de sistemas [16–20]. Em 2008, experimentos envolvendo condensados de Bose-Einstein em redes ópticas unidimensionais resultaram, pela primeira vez, na observação direta da localização de Anderson em ondas de matéria, tanto no contexto do modelo de Anderson [21] quanto no do modelo de Aubry-André [22].

Em um dos experimentos, Billy *et al.* [21] utilizaram um condensado não interagente de ^{87}Rb em uma guia de ondas unidimensional e um potencial óptico desordenado criado pela

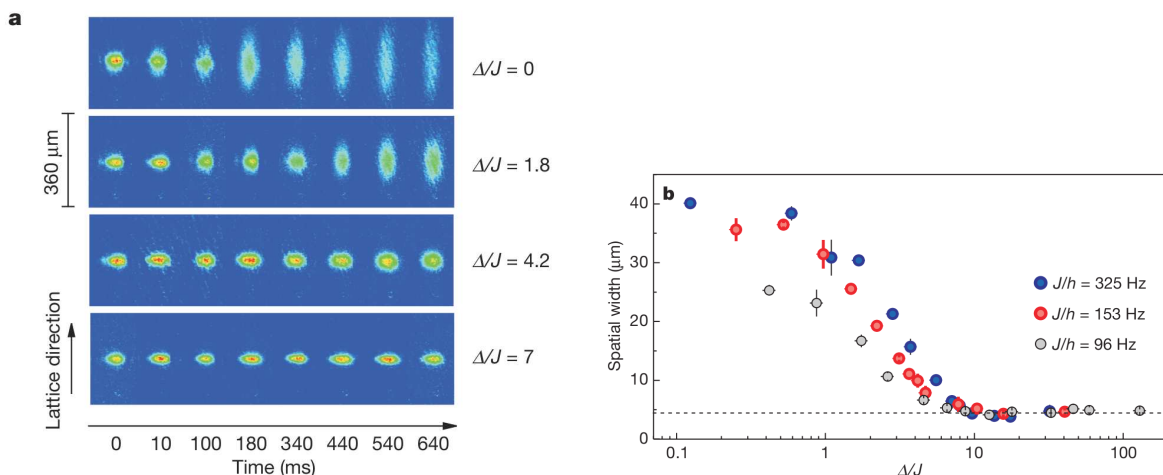


Figura 1.2: Figura retirada da referência [22]. **a**: Imagens da expansão do condensado ao longo do tempo, para diferentes amplitudes do potencial incomensurável. Acima de um valor crítico de Δ ocorre localização. **b**: Desvio quadrático média do tamanho do condensado após 750 ms, para diferentes valores da amplitude do potencial. A transição ocorre no mesmo ponto, mesmo para diferentes valores da amplitude de tunelamento J .

passagem de um laser por uma placa difusora. O potencial criado é efetivamente aleatório. A localização de Anderson foi observada com desordem fraca, ou seja, com amplitude Δ pequena. A figura (1.1), extraída da referência [21], mostra um condensado inicialmente confinado, que se expande, mas não ocupa uniformemente a rede, permanecendo localizado. No lado direito da mesma figura aparece o perfil de densidade do condensado. A amplitude decai exponencialmente, que é a assinatura da localização de Anderson [10]. O experimento confirma o resultado de que a desordem aleatória, mesmo que de amplitude pequena, resulta na localização de ondas não interagentes em uma dimensão.

Roati *et al.* [22] utilizaram um condensado não interagente de ^{39}K em um potencial óptico unidimensional criado por dois lasers de comprimento de onda incomensuráveis, para observar experimentalmente a transição de Anderson no potencial de Aubry-André. A figura (1.2), extraída da referência [22], mostra, do lado esquerdo, a expansão do condensado para diferentes valores da amplitude do potencial incomensurável Δ . Pode-se perceber que não há localização para valores baixos de Δ , porém para amplitudes altas do potencial observa-se que o condensado não se expande. Na direita, podemos ver a largura ocupada pelo condensado após um tempo fixo. Novamente, fica claro que a localização ocorre apenas a partir de um valor crítico da amplitude do potencial, mesmo para diferentes valores da amplitude de tunelamento J .

Um sistema de bósons em uma rede, isto é, um arranjo poços de potencial igualmente

espaçados, entre os quais os átomos do condensado podem tunelar, é descrito pelo hamiltoniano de Bose-Hubbard [23]

$$H = \sum_i \varepsilon_i N_i + \Omega \sum_{\langle ij \rangle} \left(a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i \right) + \frac{U}{2} \sum_i N_i (N_i - 1), \quad (1.1)$$

onde a_i é o operador que aniquila um átomo no i -ésimo sítio da rede e a_i^\dagger é o correspondente operador de criação. Eles obedecem às relações de comutação bosônicas,

$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (1.2)$$

O operador $N_i = a_i^\dagger a_i$ conta o número de átomos no sítio i , e ε_i descreve a energia potencial neste sítio. O segundo termo do hamiltoniano de Bose-Hubbard descreve o tunelamento entre os diferentes sítios, e a notação $\sum_{\langle ij \rangle}$ indica que a soma é feita apenas sobre sítios vizinhos. O número total de átomos N é uma constante de movimento, U é a intensidade da interação entre os átomos e Ω é a amplitude de tunelamento.

No hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1), a desordem aleatória proposta por Anderson pode ser modelada por um potencial no qual energia local de cada sítio é obtida a partir de uma distribuição de probabilidade uniforme no intervalo $0 \leq \varepsilon_i \leq \Delta$, onde Δ é a amplitude da desordem. Já no modelo de Aubry-André (unidimensional) o potencial no i -ésimo sítio da rede é dado pela expressão

$$\varepsilon_i = \Delta \cos(2\pi\beta i), \quad (1.3)$$

onde $\beta = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ é a “razão áurea” e i assume valores inteiros, com a distância entre sítios sendo considerada unitária, isto é, definindo a escala de comprimentos.

Seguindo o trabalho original de Serge Aubry e Gilles André [9], mostraremos que o valor crítico da amplitude do potencial incomensurável para o qual ocorre a transição da localização nesse modelo unidimensional, no caso não interagente, é $\Delta_c = 2$.

Considere o hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1) unidimensional, com L sítios e condições de contorno periódicas, no limite $U = 0$ e escolhendo a amplitude de tunelamento como a unidade de energia, ou seja, $\Omega = 1$. Usando o potencial de Aubry-André (1.3), temos

$$H = \sum_{j=1}^L (a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j) + \Delta \sum_{j=1}^L \cos(2\pi\beta j) a_j^\dagger a_j. \quad (1.4)$$

A utilização de condições de contorno periódicas só é possível se considerarmos apenas redes cujo tamanho L é igual a um número de Fibonacci, redefinindo β como a razão F_L^+/L , onde F_L^+ é o número seguinte a L na sequência de Fibonacci [24], pois a razão entre dois números de Fibonacci consecutivos tende à razão áurea no limite em que esses números tendem a infinito.

Transformamos o hamiltoniano para o espaço de momentum, usando

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_q e^{-i(2\pi\beta qj)} a_q, \quad (1.5)$$

onde

$$a_q = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{i(2\pi\beta qj)} a_j \quad (1.6)$$

é o operador que cria uma partícula com momentum βq . O hamiltoniano fica, então,

$$H = \frac{\Delta}{2} \left\{ \frac{4}{\Delta} \sum_q \cos(2\pi\beta q) a_q^\dagger a_q + \sum_q \left[a_q^\dagger a_{q+1} + a_{q+1}^\dagger a_q \right] \right\}. \quad (1.7)$$

A diferença entre as duas formas de H , (1.4) e (1.7), além do fator global $\Delta/2$ na escala de energias, se resume ao fato de que a amplitude do potencial Δ é invertida para $4/\Delta$ no espaço de momentum. A igualdade entre as duas amplitudes indica o ponto dual $\Delta_c = 2$, que separa as regiões de estados estendidos e localizados.

No experimento de Roati *et al.*, o valor crítico $\Delta_c = 2$ não foi encontrado. A localização só foi observada para $\Delta > 7$. Porém, foi utilizado um potencial incomensurável com $\beta = 1, 1972\dots$ que, sendo diferente da razão áurea, não assegura a condição de dualidade entre os hamiltonianos (1.7) e (1.4) discutida acima.

Os únicos casos do hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1) que podem ser resolvidos exatamente, através do método do *ansatz* de Bethe [25], são um sistema de dois poços ($L = 2$) e a rede unidimensional no limite $L \rightarrow \infty$. No primeiro caso, o hamiltoniano descreve dois condensados acoplados por tunelamento de Josephson [26], enquanto o segundo caso corresponde ao modelo de Lieb-Liniger [25, 27]. Entretanto, deve-se notar que essas soluções exatas, embora levem em conta a interação entre as partículas, não incluem desordem. Para estudar casos mais gerais, isto é, com interação e desordem, deve-se lançar mão de métodos numéricos. Por outro lado, uma dificuldade encontrada no estudo de sistemas de átomos em redes ópticas é o fato de que soluções numéricas estão restritas a tamanhos relativamente pequenos de rede, no máximo da ordem $L \sim 10$ se fixarmos o número de átomos $N = L$. Apenas no limite não interagente é possível analisar redes de tamanho maior.

Nesta dissertação, estudaremos a localização de Anderson como uma transição de fase quântica no sistema não interagente, utilizando o hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1) com $U = 0$. A nossa análise é feita para uma grande gama de tamanhos de rede L , a fim de observarmos como se manifestam efeitos de tamanho finito nos modelos de Anderson e de Aubry-André para a desordem. Sabendo como o tamanho finito da rede influencia as propriedades do estado fundamental do sistema, em um trabalho futuro poderemos analisar o caso com interação, mesmo estando restritos a redes pequenas.

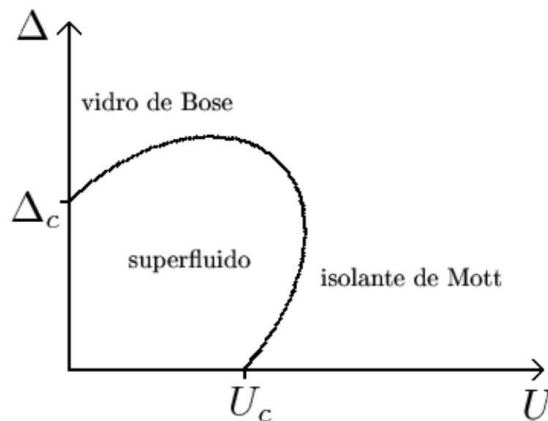


Figura 1.3: Esboço qualitativo do diagrama de fases do estado fundamental do hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1). No modelo de Anderson para a desordem, $\Delta_c = 0$; no modelo de Aubry-André, $\Delta_c = 2$.

A inter-relação entre desordem e interação é um problema muito interessante em aberto na física contemporânea [28], e o diagrama de fases $\Delta \times U$ não está bem definido, nem mesmo em uma dimensão. A figura 1.3 mostra um esboço qualitativo desse diagrama, com as fases superfluida, isolante de Mott e *vidro de Bose* [29], sendo esta última fase resultante da localização. Embora tanto a desordem quanto a repulsão destruam a superfluidez separadamente, observa-se o efeito “dois negativos fazem um positivo”: a adição de desordem no isolante de Mott ou de interação no vidro de Bose resultam na restauração da superfluidez, como pode ser visto nas regiões próximas a U_c e Δ_c na figura 1.3.

Nosso estudo da transição de Anderson será baseado no cálculo de propriedades relevantes do estado fundamental de um sistema de bósons não interagentes na presença de desordem. Além da fração de superfluido, utilizaremos os conceitos de *fidelidade* e *emaranhamento*, estes últimos originários da teoria da informação quântica. Uma discussão detalhada desses conceitos é apresentada no capítulo 2, onde também discutimos superfluidez e definimos transições de fase quânticas (transições que ocorrem em temperatura nula quando variamos um parâmetro do modelo [23]). Na referência [30] também podem ser encontradas mais informações sobre condensação de Bose-Einstein e sobre transições de fase quânticas em condensados. Nos capítulos 3 e 4, demonstramos como a fidelidade, o emaranhamento e a fração de superfluido nos permitem determinar a amplitude crítica de desordem para os modelos de Aubry-André e de Anderson, respectivamente, e analisamos os efeitos de rede finita. Os conteúdos desses dois capítulos são originais, e constituem os principais resultados desta dissertação, publicados na referência [31] (Apêndice C). O capítulo 5 apresenta algumas conclusões e discute perspectivas de continuidade do trabalho.

Capítulo 2

Metodologia

2.1 Detecção da transição de Anderson

As transições de fase que observamos no cotidiano, como a ebulição da água, são chamadas de transições de fase térmicas. Elas ocorrem devido a flutuações térmicas, quando variamos a temperatura de um sistema. Porém, se efeitos de temperatura são desprezíveis, flutuações quânticas, que ocorrem devido ao princípio da incerteza, dominam.

Transições de fase quânticas ocorrem apenas à temperatura nula, quando o sistema se encontra no estado fundamental. Essas transições ocorrem quando variamos algum parâmetro do sistema, modificando assim propriedades do estado fundamental [23]. A transição paramagneto-antiferromagneto, que acontece em alguns materiais ao variarmos a intensidade de um campo magnético externo [23], e a transição superfluido-isolante, que o modelo de Bose-Hubbard exhibe ao variarmos a intensidade das interações [6, 7] ou da desordem [8, 9], são exemplos de transições de fase quânticas.

Neste capítulo, apresentaremos técnicas matemáticas relacionadas a propriedades do estado fundamental que podem ser utilizadas para identificar os valores críticos dos parâmetros para os quais ocorre uma transição de fase quântica. Nos capítulos seguintes aplicaremos essas ferramentas aos modelos de Anderson e Aubry-André unidimensionais, com o intuito de estudar a localização de Anderson.

2.1.1 Fração de superfluido

Podemos imaginar um condensado de Bose-Einstein como sendo formado por duas partes: um fluido normal e um superfluido. A fração de superfluido f_s é o parâmetro de ordem natural para as transições de fase superfluido-isolante [28]. Ela indica a fração do condensado que se comporta como superfluido, isto é, com fluxo irrotacional e sem viscosidade. No limite

termodinâmico (definido em um sistema unidimensional com L sítios e N partículas por $L \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$, com $\frac{N}{L}$ mantido constante), o sistema exhibe $f_s = 1$ na fase de superfluido e $f_s = 0$ nas fases isolantes. O gás ideal de Bose é superfluido no seu estado fundamental [32].

Podemos distinguir entre o fluido normal e o superfluido analisando o comportamento do condensado em um recipiente com paredes móveis. O fluido normal é arrastado no sentido do movimento das paredes, enquanto o superfluido permanece em repouso. No referencial de repouso do recipiente, apenas o superfluido se move.

Mostraremos nesta seção que o movimento das paredes é equivalente à aplicação de um gradiente de fase na função de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ que descreve o condensado. Poderemos, então, encontrar uma expressão para f_s a partir da diferença de energia entre um sistema em que apenas o superfluido se move e outro no qual o condensado inteiro está em repouso. Para este fim, consideremos primeiramente a equação da continuidade, que é uma equação de conservação local com a forma geral

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.1)$$

Esta equação expressa a conservação de uma certa quantidade, da qual $\rho(\mathbf{r}, t)$ é a densidade e $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ é a densidade de corrente. No caso da equação de Schrödinger para uma partícula, a quantidade conservada é a probabilidade de encontrar a partícula. A partir da equação de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi, \quad (2.2)$$

e de sua conjugada,

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*, \quad (2.3)$$

podemos encontrar a forma da densidade de probabilidade e da densidade de corrente de probabilidade. Multiplicando a Eq. (2.2) por ψ^* e a Eq. (2.3) por ψ , e então subtraindo a segunda equação da primeira, obtemos

$$i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \psi \nabla^2 \psi^*. \quad (2.4)$$

Ou seja,

$$\frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0. \quad (2.5)$$

Esta equação da continuidade mostra a forma da densidade de probabilidade e da densidade de corrente de probabilidade para uma função de onda cuja evolução temporal é governada pela equação de Schrödinger,

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.6)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.7)$$

Um condensado de Bose-Einstein, ainda que macroscópico, pode ser descrito por uma função de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$. Neste caso, podemos interpretar $\rho(\mathbf{r}, t)$ como a densidade de partículas do condensado e $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ como a densidade de corrente dessas partículas. De acordo com esta interpretação, a equação da continuidade expressa a conservação do número de partículas N no condensado.

Podemos escrever a função de onda do condensado na forma [33]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} e^{i\varphi(\mathbf{r}, t)}, \quad (2.8)$$

onde φ é uma fase. Então, a densidade de corrente fica

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \rho(\mathbf{r}, t) \nabla \varphi(\mathbf{r}, t). \quad (2.9)$$

Percebemos que a presença de um gradiente de fase gera um campo de velocidades irrotacional e não dissipativo, compatível com as propriedades macroscópicas de um superfluido. A diferença de energia entre um sistema com um pequeno gradiente de fase imposto $|\nabla\varphi| = \frac{\theta}{L}$ e outro com $\nabla\varphi = 0$ se deve somente ao movimento do superfluido, e será igual a

$$E_\theta - E_0 = \frac{1}{2} M_s v^2. \quad (2.10)$$

Na equação acima, $M_s = mNf_s$ é a massa total do superfluido, E_θ é a energia do estado fundamental do sistema submetido ao gradiente de fase, E_0 é a energia do estado fundamental do sistema com $\nabla\varphi = 0$ e $v = \frac{\hbar\theta}{mL}$. A expressão para a fração de superfluido fica, então,

$$f_s = \frac{2mL^2 (E_\theta - E_0)}{N\hbar^2 \theta^2}. \quad (2.11)$$

Tratando, agora, do modelo de Bose-Hubbard unidimensional com L sítios e N partículas, podemos calcular numericamente a fração de superfluido, fazendo a substituição $\frac{\hbar^2}{2m} \rightarrow \Omega$ na fórmula acima, o que resulta em

$$f_s = \frac{L^2 (E_\theta - E_0)}{N\Omega \theta^2}. \quad (2.12)$$

O valor de E_0 pode ser obtido calculando-se a energia do estado fundamental do hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1) com condições de contorno periódicas. Porém, para encontrarmos o valor de E_θ precisaríamos calcular a energia do estado fundamental do hamiltoniano utilizando condições de contorno com diferença de fases. Ou seja, a função de onda de muitos corpos deve satisfazer, para todo j ,

$$\psi_\theta(x_1, \dots, x_j + L, \dots, x_N) = e^{i\theta} \psi_\theta(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N). \quad (2.13)$$

Resolver o problema numérico com tais condições de contorno é muito difícil. Podemos aplicar uma transformação unitária para transferir a condição de contorno da função de onda para o Hamiltoniano [34]. Definindo

$$\hat{U}_\theta = \prod_{j=1}^N e^{i\frac{\theta}{L}\hat{x}_j}, \quad (2.14)$$

temos $\psi_0 = \hat{U}_\theta \psi_\theta$ satisfazendo condições de contorno periódicas, e E_θ é dada por

$$E_\theta = \langle \psi_\theta | H_0 | \psi_\theta \rangle = \langle \psi_0 | \hat{U}_\theta H_0 \hat{U}_\theta^\dagger | \psi_0 \rangle \equiv \langle \psi_0 | H_\theta | \psi_0 \rangle. \quad (2.15)$$

O Hamiltoniano modificado assume a forma

$$H_\theta = \sum_{j=1}^L \left[\varepsilon_j N_j + \frac{U}{2} N_j (N_j - 1) \right] + \Omega \sum_{\langle jk \rangle} \left(a_j^\dagger a_k e^{-i\theta/L} + a_k^\dagger a_j e^{i\theta/L} \right). \quad (2.16)$$

Para obter o valor de E_θ , basta encontrar a energia do estado fundamental do hamiltoniano modificado (2.16) com condições de contorno periódicas. Para garantir que o único efeito do gradiente de fase seja conferir velocidade ao superfluido, devemos tomar um valor pequeno para θ . Neste trabalho utilizamos $\theta \sim 0.1$ para realizar os cálculos numéricos. Entretanto, valores maiores podem ser utilizados, pois não observamos nenhum desvio no comportamento $E_\theta - E_0 \sim \theta^2$ mesmo para valores de θ que são uma fração significativa de π .

2.1.2 Emaranhamento

O emaranhamento é um fenômeno quântico que pode relacionar dois ou mais sistemas. Diz-se que vários sistemas são emaranhados quando não podem ser descritos separadamente, ou seja, a descrição de todos deve ser feita em termos de um único estado, mesmo que haja uma grande separação espacial entre eles.

O emaranhamento implica em correlações não locais entre sistemas, como exemplifica o *paradoxo EPR*, que na sua versão mais simples trata de um par elétron-pósitron emitidos no decaimento de um pión. O “paradoxo” reside no fato de que sempre mediremos valores opostos de spin ao longo de qualquer eixo para as partículas do par emaranhado, não importando o quão distante elas se encontram uma da outra, fazendo parecer com que haja “comunicação” entre as partículas a uma velocidade infinita. Porém, o emaranhamento quântico não pode ser usado para enviar informação acima da velocidade da luz.

Consideremos dois sistemas quânticos que podem ser descritos separadamente, com espaços de Hilbert H_A e H_B . O estado do sistema composto pertence ao espaço $H_{AB} = H_A \otimes H_B$. Se os dois subsistemas se encontram, respectivamente, nos estados puros $|\phi\rangle_A$ e $|\phi\rangle_B$, podemos

usar bases ortonormais $\{|i\rangle_A\}$ de H_A e $\{|j\rangle_B\}$ de H_B e descrever o estado composto como

$$|\psi'\rangle = |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B = \sum_{i,j} a_i b_j |i\rangle_A |j\rangle_B. \quad (2.17)$$

Se o estado quântico do sistema AB puder ser escrito na forma acima, então A e B não estão emaranhados. Porém, o estado mais geral de H_{AB} não pode ser escrito como um produto tensorial de estados puros dos subsistemas, pois é da forma

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad (2.18)$$

com coeficientes c_{ij} quaisquer. Na verdade, podemos escrever este estado geral de uma maneira mais simples. A decomposição de Schmidt [35] assegura que existem bases ortonormais $\{|i\rangle_A\}$ de H_A e $\{|j\rangle_B\}$ de H_B para as quais podemos escrever o estado $|\psi\rangle$ como

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i\rangle_A |i\rangle_B, \quad (2.19)$$

onde os coeficientes de Schmidt $\{\lambda_i\}$ satisfazem $\lambda_i \geq 0$ e $\sum_i \lambda_i^2 = 1$.

Em um sistema bipartite AB , como o descrito acima, o emaranhamento entre os seus subsistemas pode ser quantificado pela entropia de von Neumann [35]. Primeiramente, tomamos o traço parcial do operador densidade do estado puro $|\psi\rangle$ em relação a B , obtendo assim o operador densidade reduzida do subsistema A ,

$$\rho_A \equiv \text{Tr}_B \rho = \sum_j \langle j | (|\psi\rangle\langle\psi|) | j \rangle_B. \quad (2.20)$$

O emaranhamento entre os subsistemas A e B é dado pela entropia de von Neumann do operador densidade reduzida,

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \ln \rho_B) \quad (2.21)$$

e a decomposição de Schmidt nos assegura que o resultado é independente do subsistema em relação ao qual tomamos o traço parcial.

A entropia de von Neumann satisfaz $0 \leq S \leq \ln d$, onde d é a dimensão do espaço. Se os subsistemas estão em estados puros, como os que compõem o estado $|\psi'\rangle$ discutido acima, a entropia de von Neumann é nula,¹ indicando que A e B não estão emaranhados. Para exemplificar, os estados de Bell (ou pares EPR) são os estados de dois *qubits* maximamente emaranhados,

¹Para autovalores nulos do operador densidade, devemos ter em conta que $\lambda \ln \lambda \rightarrow 0$ quando $\lambda \rightarrow 0$.

$$|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |0\rangle_B - |1\rangle_A |1\rangle_B) \quad (2.22)$$

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |0\rangle_B + |1\rangle_A |1\rangle_B) \quad (2.23)$$

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |1\rangle_B - |1\rangle_A |0\rangle_B) \quad (2.24)$$

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B) \quad (2.25)$$

O emaranhamento entre os subsistemas dos estados de Bell é o maior possível para sistemas dessa dimensionalidade, ou seja, $S = \ln 2$.

O emaranhamento é uma ferramenta muito utilizada para identificar transições de fase quânticas, pois em fases distintas o emaranhamento entre os subsistemas é diferente. Veja, por exemplo, as referências [36, 37] para emaranhamento em condensados de Bose-Einstein. Como não existe uma definição única para quantificar o emaranhamento entre subsistemas de um sistema multipartite, iremos propor abaixo uma definição conveniente para o modelo de Bose-Hubbard.

Consideremos dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento de Josephson [26, 30, 36] (este sistema bipartite pode ser descrito pelo hamiltoniano de Bose-Hubbard com $L = 2$). O estado fundamental do sistema pode ser escrito, no espaço de Fock, na forma

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^N c_i |N-i\rangle_A |i\rangle_B, \quad (2.26)$$

já que para i átomos em um condensado teremos $N-i$ no outro, onde N é o número total de átomos. Tomamos o traço parcial em relação ao subsistema B ,

$$\begin{aligned} \rho_A &\equiv \text{Tr}_B \rho = \sum_{k=0}^N \langle k|_B \left(\sum_{i,j=0}^N c_i c_j |N-i\rangle_A |i\rangle_B \langle j|_A \langle N-j|_B \right) |k\rangle_B \\ &= \sum_{i,j=0}^N c_i c_j |N-i\rangle_A \langle N-j|_A \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Logo, o resultado é que o emaranhamento é dado pela entropia de Shannon [35],

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\sum_{i=0}^N |c_i|^2 \ln |c_i|^2. \quad (2.28)$$

Podemos estender este raciocínio para um sistema com um número qualquer de condensados acoplados. Por exemplo, para $L = 3$ o estado fundamental pode ser escrito, no espaço de Fock, na forma

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-j} \sum_{j=0}^N c_{ij} |N-i-j\rangle_A |i\rangle_B |j\rangle_C. \quad (2.29)$$

Tomando o traço parcial em relação ao subsistema C , temos

$$\begin{aligned}\rho_{AB} &= \sum_{m=0}^N {}_C \langle m | \left(\sum_{i=0}^{N-j} \sum_{j=0}^N c_{ij} c_{kl} |N-i-j\rangle_A |i\rangle_B |j\rangle_C {}_C \langle l | {}_B \langle k | {}_A \langle N-k-l | \right) |m\rangle_C \\ &= \sum_{i=0}^{N-j} \sum_{j=0}^N c_{ij} c_{kl} |N-i-j\rangle_A |i\rangle_B {}_B \langle k | {}_A \langle N-k-l | \delta_{lj}.\end{aligned}\quad (2.30)$$

Em seguida, tomamos o traço parcial em relação ao subsistema B ,

$$\begin{aligned}\rho_A &\equiv \text{Tr}_B \rho_{AB} = \sum_{m=0}^N {}_B \langle m | \left(\sum_{i=0}^{N-j} \sum_{j=0}^N c_{ij} c_{kj} |N-i-j\rangle_A |i\rangle_B {}_B \langle k | {}_A \langle N-k-j | \right) |m\rangle_B \\ &= \sum_{i=0}^{N-j} \sum_{j=0}^N c_{ij} c_{kj} |N-i-j\rangle_A {}_A \langle N-k-j | \delta_{ik}.\end{aligned}\quad (2.31)$$

Logo, temos novamente o resultado de que o emaranhamento é dado pela entropia de Shannon,

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\sum_{i=0}^{N-j} \sum_{j=0}^N |c_{ij}|^2 \ln |c_{ij}|^2.\quad (2.32)$$

É interessante ressaltar que J.-M. Stéphan *et al.* [38] encontraram uma conexão geral entre a entropia de Shannon de um sistema unidimensional e a entropia de von Neumann de outro sistema bidimensional. Embora a decomposição de Schmidt generalizada para sistemas multipartites [39] não seja válida no caso geral (e não o é no nosso caso), a definição acima independe dos subsistemas sobre os quais tomamos os traços parciais e da ordem na qual esses traços são tomados. Esta é a definição que usaremos neste trabalho para quantificar o emaranhamento no modelo de Bose-Hubbard.

2.1.3 Fidelidade

Classicamente, a fidelidade é utilizada como uma medida de distância entre duas distribuições de probabilidade $\{p_i\}$ e $\{q_i\}$, e é definida por [35]

$$F(p_i, q_i) = \sum_i \sqrt{p_i q_i}.\quad (2.33)$$

A fidelidade é simétrica entre as distribuições, e satisfaz $0 \leq F \leq 1$, sendo igual à unidade apenas para distribuições de probabilidade idênticas.

A fidelidade pode ser generalizada para sistemas quânticos, e é uma ferramenta muito utilizada na teoria da informação quântica como uma medida de distâncias entre dois estados.

Para operadores densidade ρ e σ , temos a definição² [35]

$$\mathcal{F}(\rho, \sigma) = \text{Tr} \sqrt{\rho^{\frac{1}{2}} \sigma \rho^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.34)$$

A versão quântica também é simétrica entre os seus argumentos, e satisfaz $0 \leq \mathcal{F} \leq 1$. Quando $\mathcal{F} = 1$ os dois estados são idênticos, enquanto $\mathcal{F} = 0$ indica que os estados são completamente distinguíveis. Deve-se notar que se ρ e σ comutam, então esta definição recai na definição clássica da fidelidade, com $\{p_i\}$ e $\{q_i\}$ sendo autovalores de ρ e σ .

No estudo das transições de fase quânticas, estamos interessados na fidelidade entre estados puros. Se $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ e $\sigma = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, então a fidelidade é o módulo do produto escalar entre os dois estados,

$$\mathcal{F} = |\langle\psi|\varphi\rangle|. \quad (2.35)$$

A fidelidade é uma das ferramentas mais utilizadas para detectar transições de fase quânticas, inclusive em sistemas bosônicos [37, 40, 41]. Embora sua definição não seja única, a fidelidade é extremamente útil nesse tipo de análise, pois costuma indicar com precisão o ponto crítico da transição.

Para identificar o valor crítico de algum parâmetro para o qual ocorre uma transição de fase quântica, comparamos através da fidelidade dois estados fundamentais com valores ligeiramente diferentes do parâmetro. A localização de Anderson, por exemplo, é uma transição de fase quântica que ocorre devido à desordem. Utilizando o hamiltoniano de Bose-Hubbard para modelar bósons em uma rede com amplitude de desordem Δ , comparamos estados fundamentais obtidos com valores ligeiramente diferentes de Δ ,

$$\mathcal{F}(\Delta) = |\langle\psi_0(\Delta - \delta\Delta)|\psi_0(\Delta + \delta\Delta)\rangle|. \quad (2.36)$$

Genericamente, no limite termodinâmico a fidelidade é nula para o valor crítico do parâmetro [42]. Isso ocorre pois estamos comparando estados fundamentais que pertencem a fases quânticas diferentes e, portanto, distinguíveis. Diferentes escolhas para o parâmetro $\delta\Delta$ alteram apenas a profundidade do mínimo, mas não a sua localização. Utilizaremos $\delta\Delta = 10^{-2}$ em todos os cálculos numéricos.

²Através da sua decomposição espectral, define-se $f(A) = \sum_i f(a_i) |a_i\rangle\langle a_i|$ como sendo a função f de um operador linear A , onde $|a_i\rangle$ são os autovetores e a_i os autovalores de A .

2.2 Métodos numéricos

Neste trabalho, consideramos redes unidimensionais com L sítios e obtemos a energia e o vetor do estado fundamental como função da amplitude de desordem Δ , realizando a diagonalização exata da matriz do hamiltoniano de Bose-Hubbard com condições de contorno periódicas,

$$H = \sum_{i=1}^L \varepsilon_i N_i + \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i). \quad (2.37)$$

Como estamos tratando do limite sem interação, e todos os bósons condensam no estado de mais baixa energia, a densidade de energia por partícula do sistema não depende do número de partículas. Portanto, para o cálculo das quantidades físicas de interesse, podemos fixar o número de átomos como sendo $N = 1$.

Para a base do espaço de Hilbert, escolhemos estados com um número determinado de partículas localizadas em cada sítio da rede, ou seja, escolhemos a representação de número de ocupação no espaço de Fock. Por exemplo, para $L = 3$ e $N = 1$, os vetores da base deste espaço são $\{|100\rangle, |010\rangle, |001\rangle\}$.

Um exemplo explícito de construção da matriz do hamiltoniano de Bose-Hubbard é apresentado no Apêndice A. No Apêndice B encontra-se um exemplo de código de programação, escrito em Fortran 90, utilizado para fazer a diagonalização exata da matriz do hamiltoniano e obter, desse modo, a fração de superfluido, o emaranhamento e a fidelidade. Os programas utilizam, para a obtenção de autovalores e autovetores, rotinas da biblioteca MKL-LAPACK, distribuída em conjunto com o compilador Fortran Intel®[®], de acesso gratuito. Essas rotinas realizam processamento em paralelo de forma automática quando os programas são compilados e executados em computadores com mais de um processador.

Capítulo 3

Localização de Anderson no potencial de Aubry-André

Neste capítulo, estudaremos a localização de Anderson em um condensado de Bose-Einstein unidimensional não interagente no contexto do *modelo de Aubry-André*, já apresentado no Capítulo 1. Retomamos, então, o hamiltoniano (1.4), que tem a forma

$$H = \sum_{j=1}^L (a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j) + \Delta \sum_{j=1}^L \cos(2\pi\beta j) a_j^\dagger a_j. \quad (3.1)$$

Conforme comentamos anteriormente, $\beta = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ é a chamada razão áurea, Δ é a amplitude do potencial incomensurável, escolhemos a unidade de comprimento como o espaçamento entre sítios sucessivos e a unidade de energia como a amplitude de tunelamento ($\Omega = 1$). Além disso, para redes de tamanho finito devemos redefinir β como a razão entre dois números de Fibonacci consecutivos [24], com o menor deles (denominador) definindo o tamanho da rede. Os primeiros números dessa sequência (com $L \geq 8$) são 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233 ... Relembramos que essa escolha, apropriada para redes de tamanho finito, reproduz o modelo original (no qual β é a razão áurea) no limite $L \rightarrow \infty$.

Para diferentes tamanhos de rede, calculamos numericamente a fração de superfluido, o emaranhamento e a fidelidade no estado fundamental do modelo de Aubry-André. Isto é feito variando-se a amplitude do potencial Δ , a fim de encontrar o valor a partir do qual ocorre localização. Como veremos em detalhe no que segue, notamos que esse valor é muito pouco dependente do tamanho da rede, contanto que este seja um tamanho de Fibonacci, estando sempre próximo do valor crítico do limite termodinâmico $\Delta_c = 2$.

3.1 Fração de superfluido

Na seção 2.1.1, derivamos uma expressão para a fração de superfluido f_s , que é o parâmetro de ordem natural para transições de fase superfluido-isolante. Se o estado fundamental for superfluido, teremos $f_s = 1$, e se for localizado, $f_s = 0$. A expressão para a fração de superfluido (2.12) com $N = 1$ e $\Omega = 1$ fica

$$f_s = L^2 \frac{(E_\theta - E_0)}{\theta^2}. \quad (3.2)$$

Através de diagonalização exata, utilizando condições de contorno periódicas, obtemos E_0 , a energia do estado fundamental do hamiltoniano original (3.1), e E_θ , a energia do estado fundamental do hamiltoniano modificado

$$H_\theta = \Delta \sum_{j=1}^L \cos(2\pi j\beta) N_j + \sum_{j=1}^L (a_j^\dagger a_{j+1} e^{-i\theta/L} + a_{j+1}^\dagger a_j e^{i\theta/L}). \quad (3.3)$$

A figura 3.1 mostra a fração de superfluido em função da amplitude do potencial incommensurável para alguns tamanhos de rede L , com β irracional. Quando Δ é pequeno, temos $f_s = 1$, ou seja, o sistema é superfluido. A partir de uma certa amplitude Δ temos sempre $f_s = 0$, e o estado fundamental é localizado. À medida que L aumenta, este valor parece ficar cada vez mais próximo do valor da amplitude crítica $\Delta_c = 2$, e a curva da fração de superfluido cai a zero mais abruptamente.

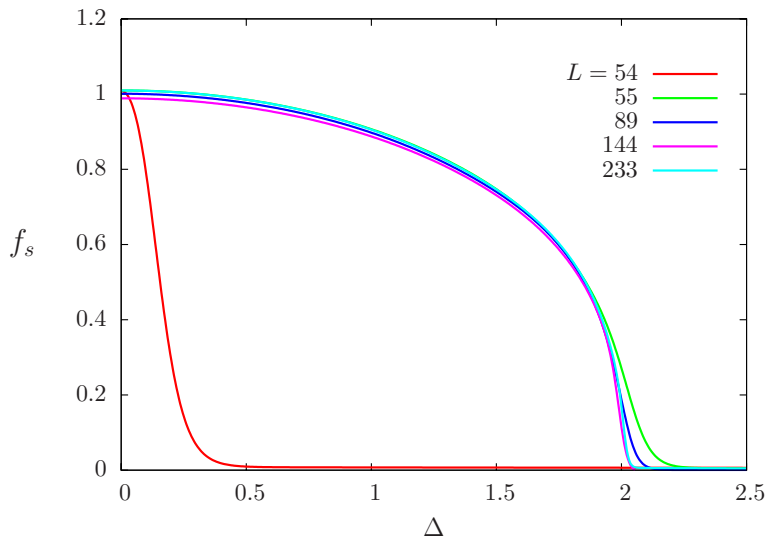


Figura 3.1: Fração de superfluido versus amplitude do potencial de Aubry-André. O valor crítico $\Delta_c = 2$ é bem verificado para L grande e pertencente à série de Fibonacci, porém observamos uma suavização da curva para redes pequenas. Para tamanhos de rede que não são números de Fibonacci, aqui exemplificado por $L = 54$, o comportamento muda drasticamente.

Na figura 3.1 mostramos um exemplo de uma rede com $L = 54$, que não é um número de Fibonacci. Neste caso, a discussão que fizemos na introdução a respeito da condição de dualidade entre os hamiltonianos (1.7) e (1.4) não é válida, e não temos o valor crítico $\Delta_c = 2$.

3.2 Emaranhamento

Na seção 2.2, verificamos que a entropia de Shannon é uma definição apropriada para quantificar o emaranhamento no modelo de Bose-Hubbard. Para estudar a localização através do emaranhamento, escolhemos estados localizados em cada sítio da rede como base para o espaço de Hilbert. Deste modo, um estado completamente estendido terá emaranhamento máximo, enquanto localização em um único sítio resulta em emaranhamento nulo. A entropia de Shannon é dada por

$$S = - \sum_i |c_i|^2 \ln |c_i|^2, \quad (3.4)$$

onde os $\{c_i\}$ são os coeficientes da expansão do vetor do estado fundamental em termos dos vetores da base do espaço de Fock. Estes coeficientes são obtidos através de diagonalização exata do hamiltoniano (3.1) utilizando condições de contorno periódicas.

A figura 3.2 mostra o emaranhamento em função da amplitude do potencial para alguns tamanhos de rede de Fibonacci L , com β irracional, e também para um tamanho de rede que não pertence à esta sequência, $L = 54$. Quando $\Delta = 0$ sempre temos o maior valor possível $S = \ln L$, ou seja, o estado fundamental é estendido. Podemos perceber um decaimento cada vez mais acentuado na curva do emaranhamento conforme L aumenta, próximo ao ponto $\Delta_c = 2$. Para valores de Δ maiores que $\Delta_c = 2$, o emaranhamento entre os sítios torna-se bem menor, devido à localização.

Podemos visualizar melhor esta queda abrupta na figura 3.3, que mostra a derivada do emaranhamento com respeito a amplitude do potencial incomensurável. O mínimo da derivada do emaranhamento é mais pronunciado para tamanhos maiores de rede, mas aparece sempre próximo de $\Delta = 2$, o valor crítico da transição.

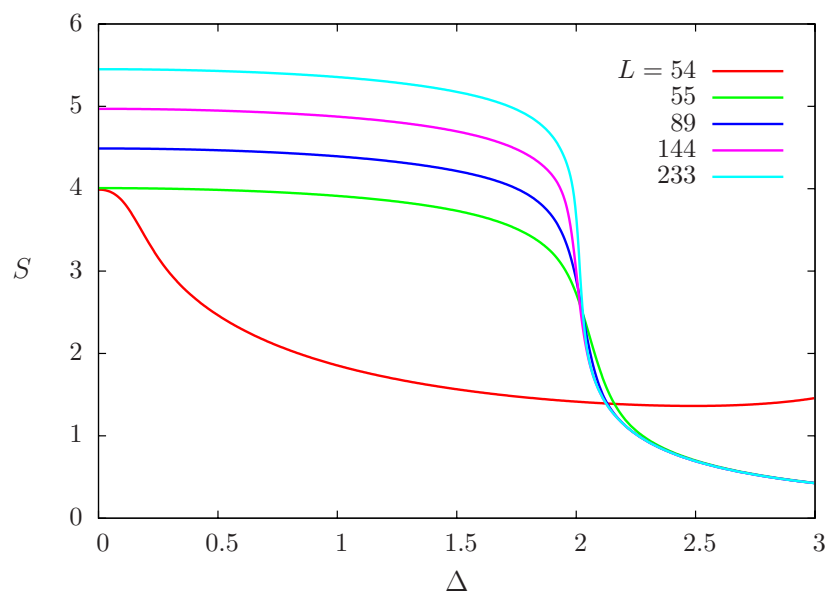


Figura 3.2: Emaranhamento do estado fundamental contra amplitude do potencial incomensurável. Observamos uma queda súbita no ponto crítico $\Delta_c = 2$ para tamanhos de rede de Fibonacci, enquanto a curva para $L = 54$ mostra um comportamento completamente diferente.

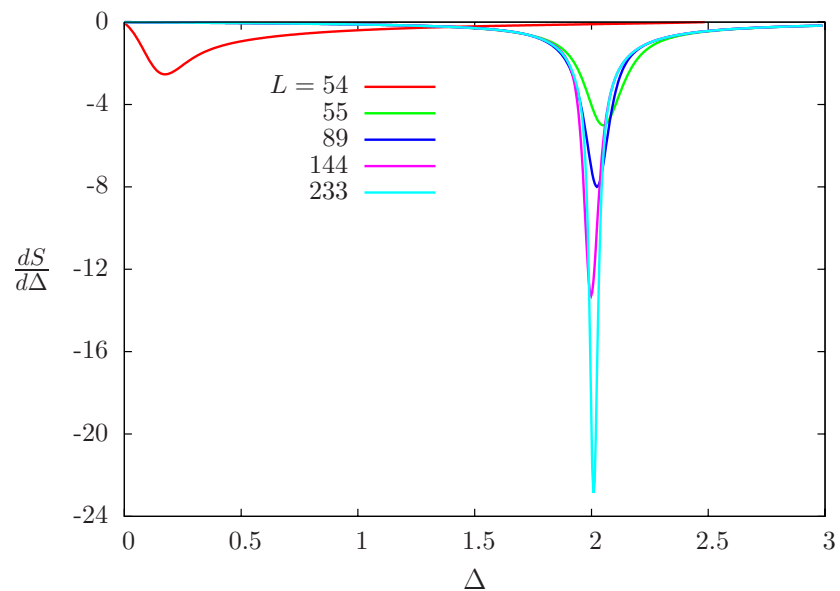


Figura 3.3: Derivada do emaranhamento contra amplitude do potencial. O mínimo é mais pronunciado quanto maior o tamanho da rede, porém está sempre próximo do valor crítico $\Delta_c = 2$, para os tamanhos de rede de Fibonacci. Para $L = 54$, o comportamento da curva é diferente.

3.3 Fidelidade

Conforme foi discutido na seção 2.3, a fidelidade pode ser utilizada para comparar estados fundamentais de hamiltonianos com valores ligeiramente diferentes da amplitude do potencial incomensurável Δ ,

$$\mathcal{F}(\Delta) = |\langle \psi_0(\Delta - \delta\Delta) | \psi_0(\Delta + \delta\Delta) \rangle|. \quad (3.5)$$

Se $\mathcal{F} = 1$ os estados comparados são completamente indistinguíveis, portanto pertencem à mesma fase quântica. Quanto menor o valor de fidelidade, mais diferentes são os estados. Neste contexto, mínimos na fidelidade costumam indicar uma transição de fase quântica.

Os autovetores do estado fundamental $|\psi_0\rangle$ foram obtidos através da diagonalização exata do hamiltoniano (3.1) utilizando condições de contorno periódicas. Para os cálculos utilizamos $\delta\Delta = 10^{-2}$, e verificamos que valores diferentes de $\delta\Delta$ não alteram a localização do mínimo, apenas a sua amplitude.

A figura 3.4 mostra a fidelidade em função da amplitude do potencial de Aubry-André para vários tamanhos de rede de Fibonacci L com β irracional, e para $L = 8$ e $L = 13$ com β racionalizado. Claramente, um mínimo ocorre próximo de $\Delta = 2$, mesmo para L pequeno, onde o estado fundamental sofre uma mudança de estendido para localizado. Novamente, para comparação, mostramos a rede com $L = 54$, que não é um número de Fibonacci. Neste caso, o mínimo da fidelidade aparece em um valor de Δ completamente diferente.

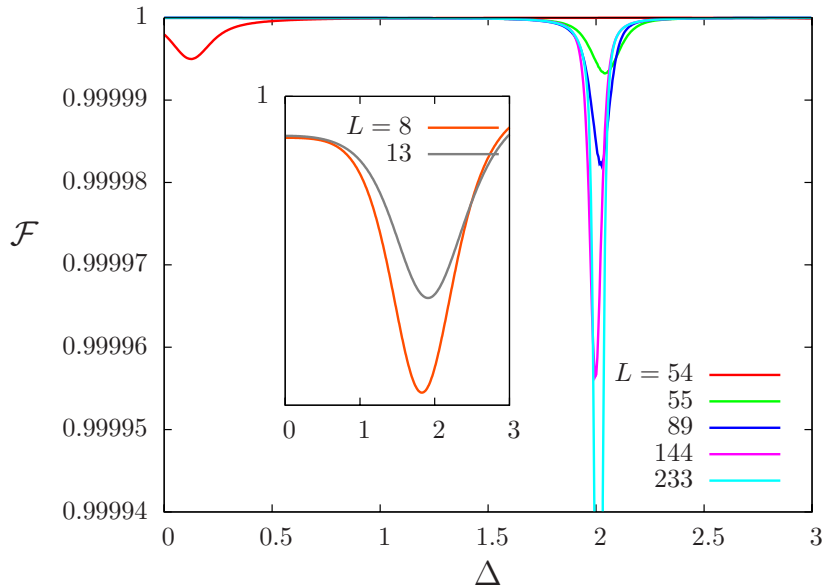


Figura 3.4: Fidelidade em função amplitude do potencial, para alguns tamanhos de rede. O mínimo é próximo do valor crítico $\Delta_c = 2$ se L é um número de Fibonacci, e é mais pronunciado em redes maiores. O mínimo da curva de $L = 54$ não se encontra perto deste valor. O gráfico menor mostra mínimos da fidelidade próximos do valor crítico $\Delta_c = 2$ mesmo para redes pequenas.

Podemos perceber que, quanto maior o tamanho da rede L , mais acentuado é o mínimo. Assim como no caso do emaranhamento, o mínimo aparece sempre próximo de $\Delta = 2$. O fato de $\mathcal{F}(\Delta)$ poder assinalar com razoável precisão a amplitude crítica Δ_c , inclusive para redes pequenas, será discutido na próxima seção.

3.4 Redes pequenas

Nas seções anteriores, percebemos que efeitos de rede finita são pouco pronunciados no modelo de Aubrey-André, e se devem principalmente à incomensurabilidade entre o tamanho da rede e um número inteiro de períodos do potencial. Devido a estas características, o modelo de Aubry-André é ideal para explorar a inter-relação entre desordem e interação. Por razões práticas, se levarmos as interações em conta, soluções numéricas só podem ser obtidas para tamanhos de rede relativamente pequenos. Por isso, nossos resultados são interessantes, pois já para $L = 8$ indicam com boa precisão o ponto crítico para o qual ocorre a localização de Anderson, especialmente o mínimo da fidelidade. Note que a fração de superfluido, usualmente empregada para detectar a transição, não é uma medida tão precisa em redes pequenas.

A figura 3.5 mostra curvas da fração superfluida, do emaranhamento e da fidelidade para $L = 8$, em uma escala arbitrária. Conforme foi discutido no início do capítulo, resultados para redes pequenas são melhores se aproximarmos β como a razão entre dois números de Fibonacci consecutivos, de modo a termos um número inteiro de oscilações do potencial ao longo da rede. Portanto, utilizamos $\beta = \frac{13}{8}$. Note que o mínimo da fidelidade aponta com precisão razoável o valor crítico $\Delta_c = 2$. Como a rede é pequena, notamos que a fração de superfluido e o emaranhamento estão sujeitos a efeitos de rede finita.

A figura 3.6 mostra as derivadas da fração superfluida, do emaranhamento e da fidelidade para $L = 8$, com $\beta = \frac{13}{8}$ e escala arbitrária. As derivadas da fração superfluida e do emaranhamento também indicam razoavelmente bem o ponto crítico $\Delta_c = 2$. A derivada da fidelidade não traz nenhuma informação nova relevante.

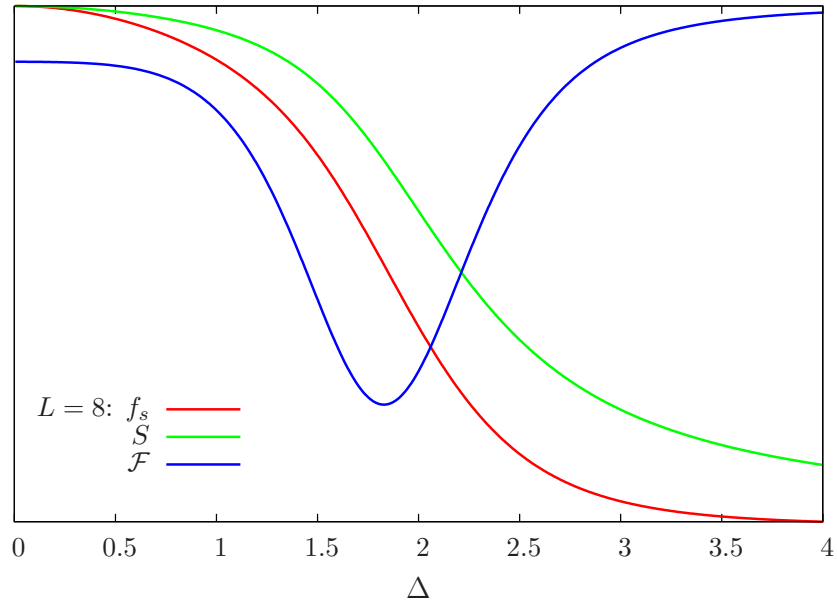


Figura 3.5: Fração de superfluido, emaranhamento e fidelidade em função da amplitude do potencial de Aubry-André, para $L = 8$ e $\beta = \frac{13}{8}$. A fidelidade aponta com boa precisão o valor crítico da amplitude do potencial de Aubry-André, mesmo para redes pequenas.

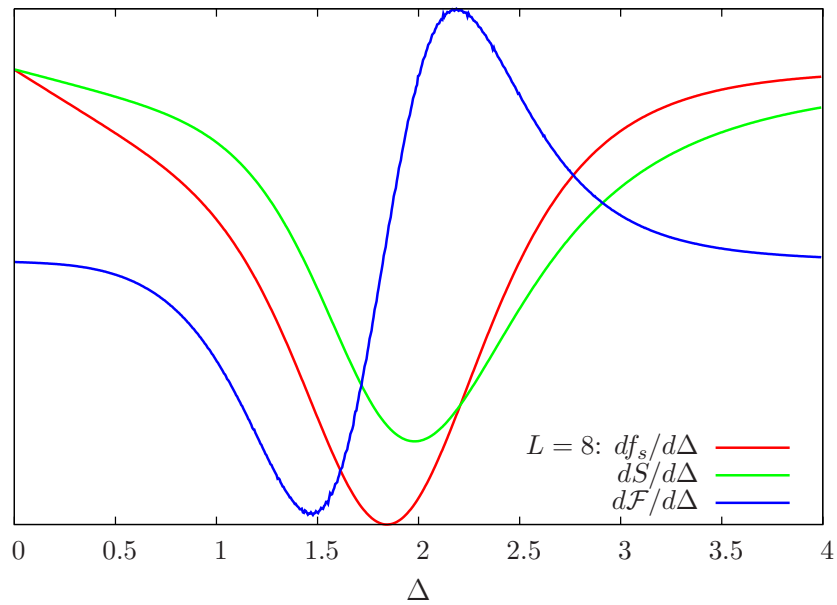


Figura 3.6: Derivadas da fração de superfluido, do emaranhamento e da fidelidade em função da amplitude do potencial de Aubry-André, para $L = 8$ e $\beta = \frac{13}{8}$. As derivadas da fração de superfluido e do emaranhamento também indicam o valor crítico da amplitude do potencial de Aubry-André em redes pequenas, com razoável precisão.

Capítulo 4

Localização de Anderson em um potencial aleatório

Em seu trabalho original [8], P. W. Anderson considerou o transporte de elétrons não interagentes em um cristal tridimensional desordenado (a desordem foi modelada através das energias locais de cada sítio do cristal, que assumiam valores aleatórios), mostrando que existe uma amplitude crítica para a desordem acima da qual ocorre localização e o transporte é suprimido. Esta transição de fase quântica ficou conhecida como localização de Anderson. Com esse tipo de desordem, modelada por um potencial aleatório, a transição de Anderson não ocorre em sistemas de uma ou duas dimensões. Para estas dimensionalidades qualquer amplitude de desordem (desde que não nula) resulta em localização.

Neste capítulo, estudaremos a localização de Anderson em um condensado de Bose-Einstein unidimensional não interagente no contexto do *modelo de Anderson*, ou seja, a desordem é inserida através de um potencial aleatório. Utilizaremos o hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1) sem interação, que escrevemos na forma

$$H = \sum_{j=1}^L \varepsilon_j N_j + \sum_{j=1}^L (a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j), \quad (4.1)$$

utilizando as mesmas escalas de comprimento e energia escolhidas no Capítulo 3. As energias locais de cada sítio são escolhidas aleatoriamente, utilizando uma distribuição de probabilidade uniforme no intervalo $0 \leq \varepsilon_i \leq \Delta$, sendo Δ a amplitude de desordem. Ao calcularmos as quantidades físicas de interesse deste modelo, é necessário fazer uma média sobre um grande número de configurações aleatórias do potencial. Utilizamos neste trabalho amostras de 5000 configurações aleatórias para realizar as médias.

Para diferentes tamanhos de rede, calculamos numericamente a fração de superfluido, o emaranhamento e a fidelidade no estado fundamental do modelo de Anderson. Isto é feito para diferentes valores da amplitude de desordem Δ , a fim de encontrar o valor a partir do

qual ocorre localização. Conforme detalhado no restante deste capítulo, observamos efeitos significativos do tamanho de rede, diferentemente do que ocorre no modelo de Aubry-André. Através de uma análise de escala de tamanho finito (*finite-size scaling*), mostramos que o valor crítico esperado, $\Delta_c = 0$, é obtido no limite termodinâmico.

4.1 Fração de superfluido

Como mencionamos na seção 3.1, a fração de superfluido f_s é o parâmetro de ordem natural para transições de fase superfluido-isolante. Se o estado fundamental for localizado, teremos $f_s = 0$, se for superfluido, $f_s = 1$. A expressão para a fração de superfluido (2.12) com $N = 1$ e $\Omega = 1$ é a mesma apresentada na equação (3.2),

$$f_s = L^2 \frac{(E_\theta - E_0)}{\theta^2}. \quad (4.2)$$

Através de diagonalização exata, utilizando condições de contorno periódicas, obtemos E_0 , a energia do estado fundamental do hamiltoniano original (4.1), e E_θ , a energia do estado fundamental do hamiltoniano modificado

$$H_\theta = \sum_{j=1}^L \varepsilon_j N_j + \sum_{j=1}^L (a_j^\dagger a_{j+1} e^{-i\theta/L} + a_{j+1}^\dagger a_j e^{i\theta/L}). \quad (4.3)$$

A figura 4.1 mostra a fração de superfluido em função da amplitude de desordem para vários tamanhos de rede L . Os símbolos dão os valores numéricos obtidos para f_s após as médias configuracionais. Quando $\Delta = 0$ sempre temos $f_s = 1$, ou seja, o sistema é superfluido, mas para valores de Δ suficientemente grandes temos $f_s \rightarrow 0$ e o estado fundamental se torna localizado. Podemos ver que a localização ocorre para valores de Δ menores à medida que o tamanho L da rede aumenta.

Podemos definir um “valor característico” de desordem Δ_L para cada tamanho de rede observando que as curvas da fração de superfluido são bem aproximadas pela função

$$f_s \simeq e^{(-\frac{\Delta}{\Delta_L})^\alpha}. \quad (4.4)$$

Para todos os tamanhos de rede, o parâmetro de ajuste α assume aproximadamente o mesmo valor $\alpha \simeq \frac{4}{3}$. Fixamos, então, $\alpha = \frac{4}{3}$ e determinamos um Δ_L para cada tamanho de rede através da função acima.

As curvas contínuas na figura 4.1 mostram os ajustes dos valores numéricos da fração de superfluido através da equação (4.4). Uma discussão mais detalhada desses ajustes e dos valores obtidos para Δ_L será apresentada na seção 4.4, onde iremos realizar uma análise de escala de tamanho finito para determinar Δ_L no limite termodinâmico.

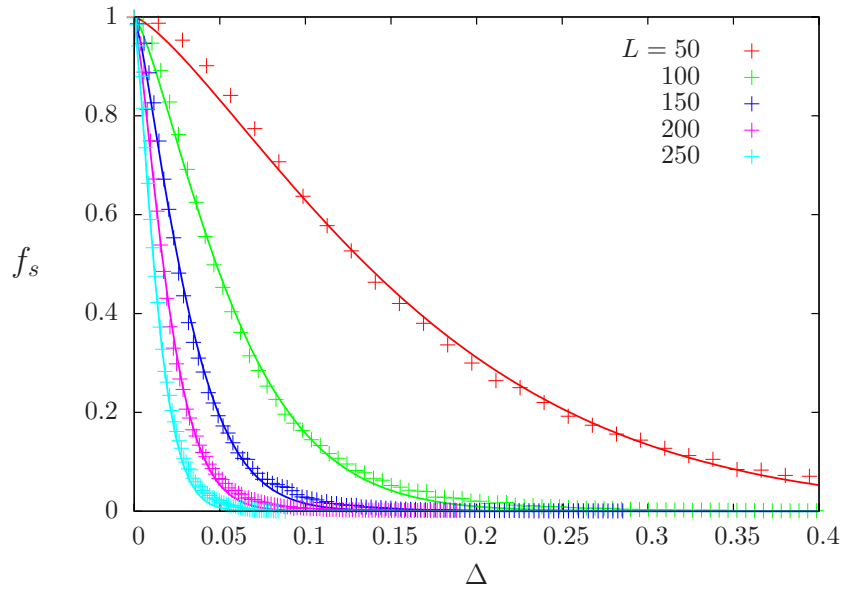


Figura 4.1: Fração de superfluido em função da amplitude da desordem aleatória para diferentes tamanhos de rede. As curvas contínuas são ajustes dos valores numéricos da fração de superfluido (símbolos) usando a equação (4.4).

4.2 Emaranhamento

Na seção 2.1.2, escolhemos a entropia de Shannon como a medida apropriada do emaranhamento em redes de bósons. Tendo em vista que estamos utilizando a mesma base para o espaço de Fock utilizada na seção 3.2, teremos aqui, para o modelo de Anderson, a mesma expressão para a entropia de Shannon, equação (3.4), que usamos no caso do modelo de Aubry-André. Deste modo, o emaranhamento é dado por

$$S = - \sum_i |c_i|^2 \ln |c_i|^2. \quad (4.5)$$

onde os $\{c_i\}$ são os coeficientes da expansão do autovetor do estado fundamental em termos dos vetores da base do espaço de Fock. Estes coeficientes são obtidos através de diagonalização exata do hamiltoniano (4.1) utilizando condições de contorno periódicas.

A figura 4.2 mostra o emaranhamento em função da amplitude de desordem para vários tamanhos de rede L . Quando $\Delta = 0$, sempre temos o maior valor possível, $S = \ln L$, ou seja, o estado fundamental é estendido. Para valores maiores de Δ , o emaranhamento entre os sítios diminui devido à localização.

Assim como no modelo de Aubry-André, podemos perceber um decréscimo do emaranhamento como função da amplitude de desordem. Quanto maior o tamanho da rede L , mais acentuado é este decréscimo, mas não é possível visualizar diretamente na figura 4.2

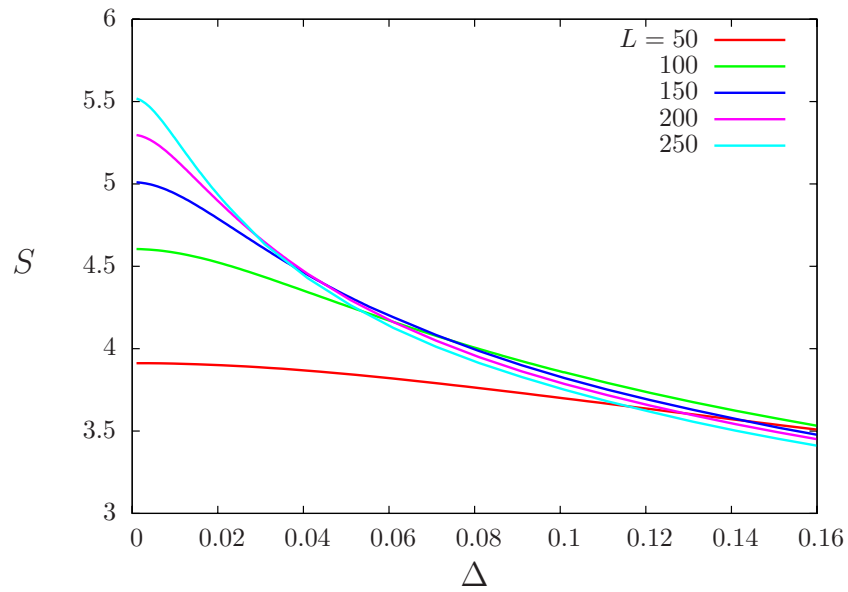


Figura 4.2: Emaranhamento contra amplitude da desordem de Anderson, para diferentes tamanhos de rede. Observamos uma queda mais abrupta para tamanhos de rede maiores.

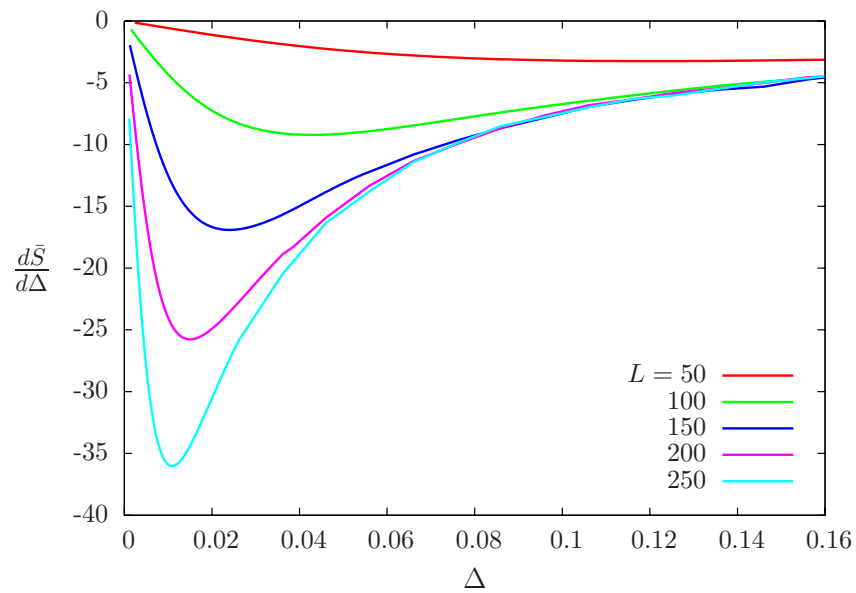


Figura 4.3: Derivada do emaranhamento em função da amplitude de desordem. A posição do mínimo desta derivada, que usamos para definir Δ_L para o emaranhamento, se aproxima de $\Delta_c = 0$ quando L aumenta.

uma sequência de valores característicos de Δ que evolua em direção ao valor crítico $\Delta = 0$ no limite termodinâmico.

Definimos, neste caso, o valor característico para tamanhos finitos Δ_L como sendo o ponto de inflexão na curva do emaranhamento. Este ponto pode ser melhor visualizado como o mínimo da derivada de S com respeito a Δ , que aparece na figura 4.3, deixando mais claro que Δ_L se aproxima de $\Delta = 0$ à medida que L aumenta. Como para a fração de superfluido, uma análise mais quantitativa dessa evolução da amplitude característica de desordem determinada através do emaranhamento será feita na seção 4.4.

4.3 Fidelidade

Conforme foi discutido anteriormente, utilizamos a fidelidade para comparar estados fundamentais de hamiltonianos com valores ligeiramente diferentes da amplitude da desordem Δ , pois um mínimo da fidelidade em função do parâmetro que induz uma transição de fase quântica tende a indicar o valor crítico desse parâmetro, uma vez que estados pertencentes a fases distintas são essencialmente distinguíveis. Nesta análise da localização de Anderson em potencial aleatório utilizamos a mesma definição de fidelidade empregada para o modelo de Aubry-André, ou seja,

$$\mathcal{F}(\Delta) = |\langle \psi_0(\Delta - \delta\Delta) | \psi_0(\Delta + \delta\Delta) \rangle|. \quad (4.6)$$

Os autovetores do estado fundamental $|\psi_0\rangle$ são obtidos através da diagonalização exata do hamiltoniano (4.1) utilizando condições de contorno periódicas. A média configuracional é realizada em $\mathcal{F}(\Delta)$, o que significa que os estados fundamentais a serem comparados correspondem à mesma configuração aleatória do potencial, exceto pelo fator associado à amplitude da desordem. Usamos $\delta\Delta = 10^{-2}$ nos cálculos.

A figura 4.4 mostra a fidelidade em função da amplitude de desordem para vários tamanhos de rede L . Pode-se observar que sempre temos um mínimo em $\Delta = 0$. Para valores maiores de Δ , $\mathcal{F} \rightarrow 1$ e os estados fundamentais comparados tendem a ser idênticos.

Podemos perceber que quanto maior o tamanho da rede L mais acentuado é o mínimo em $\Delta = 0$. menos visível é o fato de o ponto de inflexão da curva se aproxima de $\Delta = 0$. Esse ponto de inflexão pode ser melhor visualizado como o máximo da derivada de \mathcal{F} com respeito a Δ , que aparece na figura 4.5. Assim como no caso do emaranhamento, definimos o valor característico Δ_L para a fidelidade em redes de tamanho finito como sendo a localização desse máximo de $d\mathcal{F}/d\Delta$.

Mais uma vez, salientamos que uma análise mais detalhada dos valores de Δ_L assim obtidos será feita na seção 4.4, em conexão com uma análise de escala de tamanho finito que permitirá inferir o comportamento no limite $L \rightarrow \infty$.

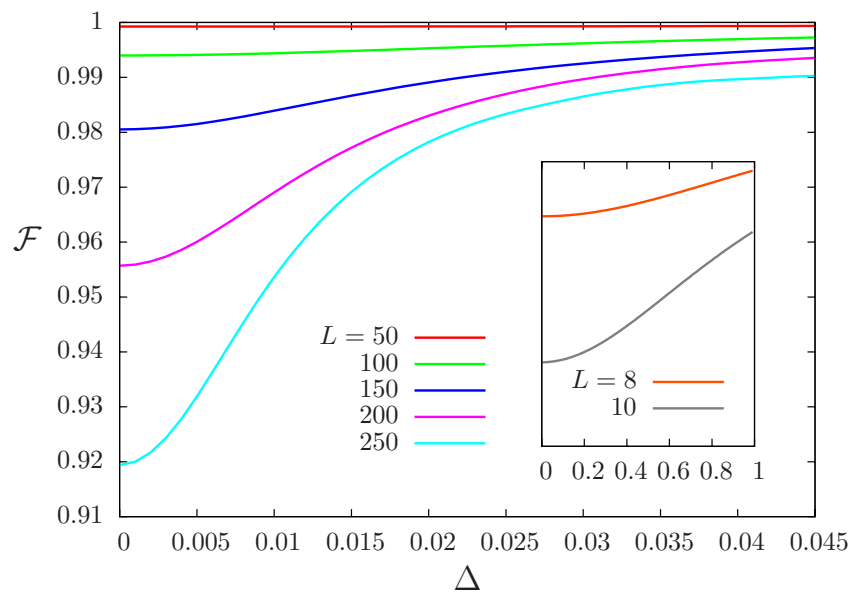


Figura 4.4: Fidelidade em função da amplitude de desordem para diferentes tamanhos de rede. Conforme L cresce, o mínimo fica mais pronunciado. No gráfico menor, mostramos a fidelidade para redes menores. O comportamento qualitativo é sempre o mesmo, com o mínimo em $\Delta = 0$, embora variando a sua profundidade.

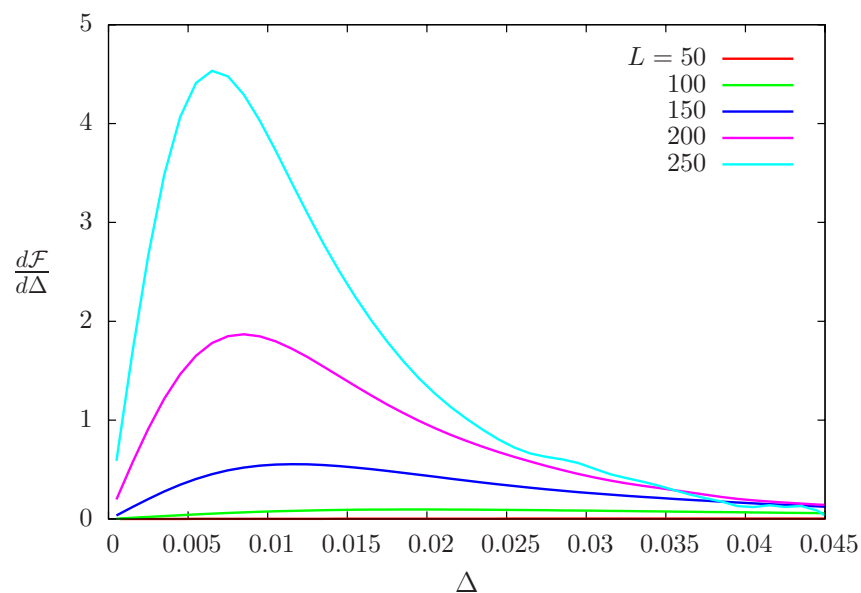


Figura 4.5: Derivada da fidelidade em função da amplitude da desordem aleatória. O máximo da derivada se aproxima de $\Delta = 0$ à medida que L aumenta. Tomamos este máximo como a definição do Δ_L característico para a fidelidade.

4.4 Escala de tamanho finito

Neste capítulo, estudamos a localização de Anderson de um condensado de Bose-Einstein em uma dimensão por efeito de desordem aleatória, isto é, o modelo de Anderson propriamente dito. Diferentemente do que ocorre no modelo de Aubry-André, verificamos que a variação das quantidades relevantes — fração de superfluido, emaranhamento e fidelidade — com o tamanho da rede é bastante significativa.

Nas seções anteriores definimos valores característicos Δ_L da amplitude de desordem em redes de tamanho finito para cada uma das três quantidades físicas que estamos considerando. No caso da fração de superfluido f_s , esse valor característico é basicamente o valor de Δ para o qual $f_s = e^{-1}$. Já para as curvas de emaranhamento S e fidelidade \mathcal{F} , ele corresponde a um ponto de inflexão, ou extremo da derivada.

Cabe ressaltar que, embora as definições de Δ_L para as três quantidades sejam diferentes, nossos resultados indicam que todas obedecem a uma mesma lei de escala,

$$|\Delta_L - \Delta_\infty| = CL^{-\gamma}, \quad (4.7)$$

onde C e γ são constantes positivas e Δ_∞ é o valor crítico da amplitude da desordem no limite termodinâmico.

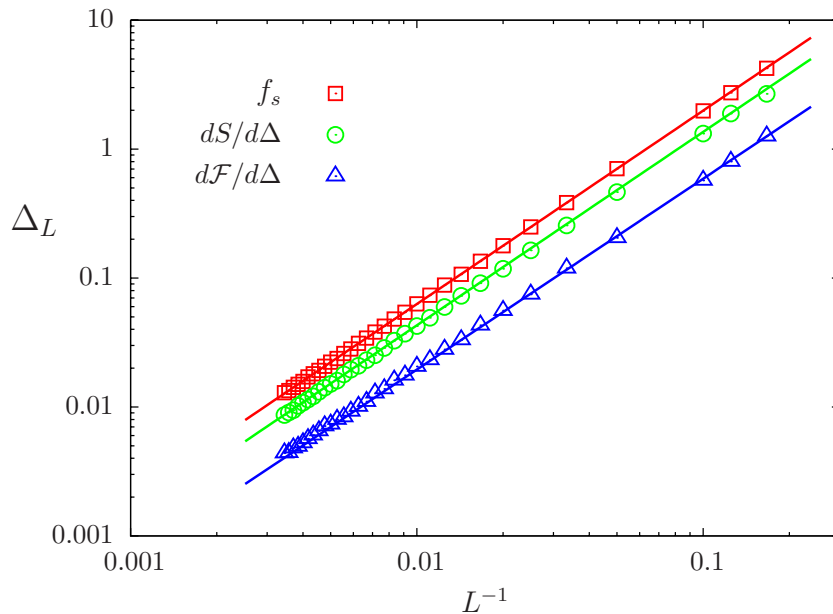


Figura 4.6: Gráfico logarítmico de Δ_L em função de L a partir das três quantidades estudadas. Os símbolos representam os valores obtidos das soluções numéricas e as retas correspondem à equação (4.7) com os parâmetros listados na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Valores obtidos a partir do ajuste da lei de escala. Os resultados indicam que o expoente $\gamma \approx 1.5$ é o mesmo para as três quantidades.

	γ	Δ_∞	C
f_s	1.500 ± 0.004	0.00003 ± 0.0002	62.9 ± 1.0
S	1.506 ± 0.005	0.0006 ± 0.004	43.0 ± 1.0
\mathcal{F}	1.48 ± 0.02	0.0002 ± 0.0003	17.8 ± 1.5

A figura 4.6 apresenta graficamente esse ajuste, com os valores numéricos das três quantidades e as curvas ajustadas (retas na escala logarítmica do gráfico). Na tabela 4.1, apresentamos os valores dos parâmetros da lei de escala (4.7) obtidos a partir do ajuste dos resultados numéricos.

Embora os valores para o pré-fator C sejam diferentes para cada uma das quantidades, encontramos essencialmente o **mesmo expoente** $\gamma \approx 1.5$ nos três casos, e nossos resultados são consistentes com $\Delta_\infty = 0$.

É interessante observar na figura 4.6 que os pontos determinados pela solução numérica coincidem com a reta de ajuste à lei de escala (4.7) até mesmo para tamanhos de rede tão pequenos quanto $L = 6$.

Capítulo 5

Conclusão

5.1 Considerações Finais

O tópico central desta dissertação foi o estudo da localização de Anderson em condensados de Bose-Einstein unidimensionais, no contexto de uma transição de fase quântica. Utilizamos o Hamiltoniano de Bose-Hubbard para descrever o condensado e dois modelos para a desordem: o modelo de Aubry-André, que emprega um potencial de período incomensurável com a rede, e o modelo de Anderson, que consiste no uso de um potencial verdadeiramente aleatório. O nosso principal objetivo foi o de verificar efeitos de tamanho finito, que são importantes já que cálculos numéricos e experimentos com bósons são feitos em redes finitas.

Para a detecção de transições de fase quânticas computamos, através do método de diagonalização exata, três quantidades que foram usadas como uma medida de localização: a fração de superfluido, que geralmente é muito empregada no estudo da localização de Anderson, sendo um parâmetro de ordem natural para transições superfluido-isolante, e também o emaranhamento e a fidelidade, ferramentas provenientes da área da informação quântica que vêm sendo muito empregadas no estudo das transições de fase quânticas em geral.

Verificamos que os efeitos de rede finita são diferentes nos dois modelos. O modelo de Aubry-André considera uma rede periódica, com um potencial incomensurável de período igual à razão áurea β (em unidades do espaçamento da rede). Por este motivo, existe uma restrição quanto aos tamanhos de rede que podem ser considerados, pois o emprego de condições de contorno periódicas impõe uma periodicidade com o tamanho do sistema que só pode ser realizada para tamanhos que se aproximem bastante de um múltiplo do período do potencial, ou seja, o inverso da razão áurea β . Levando em conta que β é o limite do quociente entre dois números de Fibonacci consecutivos quando esses números tendem

a infinito, racionalizamos esse parâmetro, substituindo-o por um quociente desse tipo e escolhendo o número de sítios da rede como o menor entre esses dois números de Fibonacci. Desta forma, obtemos um delta crítico em plena concordância com o valor conhecido $\Delta_c = 2$, mesmo em redes pequenas. Na seção 3.4, mostramos resultados para $L = 8$ que deixam claro como a fidelidade pode indicar o ponto crítico da transição de fase quântica em redes pequenas.

Já no modelo de Anderson, que descreve uma desordem aleatória, é necessário realizar uma média sobre um grande número de configurações do potencial aleatório para obter resultados fisicamente relevantes. Neste modelo, encontramos efeitos significativos de tamanho de rede e mostramos que uma lei de escala é satisfeita pelas três quantidades estudadas: a amplitude de desordem necessária para localização em uma rede finita de tamanho L varia de acordo com a lei de potência $\Delta_L \sim L^{-\gamma}$, com $\gamma = 1.5$. Também no modelo de Anderson observamos que a fidelidade é um bom indicador do valor crítico da transição, já que ela apresenta um mínimo em $\Delta_c = 0$ para todos os valores de L .

5.2 Perspectivas Futuras

Embora o trabalho aqui relatado tenha se restringido ao caso de bósons não interagentes, a inclusão das interações é uma das principais motivações deste estudo. Sem dúvida, a inter-relação entre desordem e interação desperta grande interesse, não apenas em redes de átomos frios, mas também, por exemplo, na área da física de sólidos que estuda os assim chamados sistemas eletrônicos fortemente correlacionados [43, 44].

Conforme discutimos na seção 2.1.1, na ausência de desordem o gás ideal de Bose é superfluido no seu estado fundamental. Nesse sistema não interagente, a introdução de desordem causa a localização de Anderson. Por outro lado, se adicionamos uma interação repulsiva, na ausência de desordem o sistema sofrerá uma transição superfluido-isolante de Mott. Embora tanto Δ quanto U destruam a superfluidez separadamente, observa-se o efeito “dois negativos fazem um positivo”, no qual a adição de desordem no isolante de Mott, ou de interação no vidro de Bose, resultam na restauração da superfluidez. O mesmo se observa com a fase metálica em sistemas eletrônicos de estado sólido, e deve ocorrer para átomos fermiônicos frios, que têm despertado interesse recentemente [45, 46].

Um empecilho no estudo dessa inter-relação entre desordem e interação é o fato de que soluções numéricas para sistemas de átomos interagentes só podem ser obtidas para redes relativamente pequenas, não ultrapassando tamanhos da ordem de $L \sim 10$, com o número de partículas $N \sim L$. Devido aos resultados animadores que encontramos para redes pequenas no sistema não interagente, concluímos que a fidelidade é uma boa candidata para se obter um

diagrama de fases $\Delta \times U$. Embora alguns autores tenham feito algum progresso nesta direção, utilizando a fração de superfluido e outros métodos que não exploramos neste trabalho, evidenciamos que a fidelidade é a ferramenta mais bem talhada para definir com precisão os contornos entre as diferentes fases quânticas do sistema em questão. Já temos resultados preliminares bastante animadores no estudo do modelo de Bose-Hubbard com desordem utilizando a fidelidade como principal indicador das transições de fase.

Apêndice A

Representação matricial do Hamiltoniano de Bose-Hubbard

Neste apêndice vamos mostrar como construir a representação matricial do Hamiltoniano de Bose-Hubbard unidimensional no espaço de Fock, com condições de contorno periódicas, que podemos escrever como segue.

$$H = \sum_{j=1}^L \varepsilon_j N_j + \sum_{j=1}^L (a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^L N_i (N_i - 1). \quad (\text{A.1})$$

Lembramos que a_j é o operador que aniquila um átomo no j -ésimo sítio da rede e a_j^\dagger é o correspondente operador de criação. O operador $N_j = a_j^\dagger a_j$ conta o número de átomos no sítio j , e ε_j descreve a energia potencial neste sítio. A condição de contorno periódica implica que a rede é um anel no qual o primeiro sítio é vizinho do L -ésimo.

O hamiltoniano (A.1) descreve um sistema de N bósons em uma rede com L sítios. A dimensão do espaço de estados é igual ao número de modos diferentes de acomodar as N partículas na rede, lembrando que elas são indistinguíveis. A dimensão do espaço é

$$d = \frac{(N + L - 1)!}{N!(L - 1)!}. \quad (\text{A.2})$$

Para construir a representação matricial do hamiltoniano (A.1), devemos calcular os seus elementos de matriz nos vetores da base,

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_L | H | n_1, n_2, \dots, n_L \rangle. \quad (\text{A.3})$$

Devemos, primeiramente, analisar como os operadores de criação, aniquilação e número de átomos agem nos vetores da base.

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_L\rangle, \\ a_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_L\rangle, \\ N_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle &= n_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Utilizando as expressões (A.4), podemos escrever explicitamente os elementos de matriz do hamiltoniano (A.1),

$$\begin{aligned} \langle n'_1, n'_2, \dots, n'_L | H | n_1, n_2, \dots, n_L \rangle &= \sum_{i=1}^L \left[\varepsilon_i n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \right] \prod_{i=1}^L \delta_{n_i, n'_i} \\ &+ \sum_{\langle ij \rangle} \left(\sqrt{n_j} \sqrt{n_i + 1} \delta_{n_{i+1}, n'_i} \delta_{n_j-1, n'_j} + \sqrt{n_i} \sqrt{n_j + 1} \delta_{n_j+1, n'_j} \delta_{n_i-1, n'_i} \right) \prod_{k \neq i, j} \delta_{n_k, n'_k}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Para ilustrar, vamos escolher $L = 3$ e $N = 2$. Pela equação (A.2), o espaço de Fock possui dimensão $d = 6$. A base é formada pelos vetores

$$\left\{ \begin{array}{l} |2, 0, 0\rangle \\ |1, 1, 0\rangle \\ |1, 0, 1\rangle \\ |0, 2, 0\rangle \\ |0, 1, 1\rangle \\ |0, 0, 2\rangle \end{array} \right\}. \quad (\text{A.6})$$

Neste caso, o hamiltoniano de Bose-Hubbard é representado pela matriz

$$\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1 + U & \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & \varepsilon_1 + \varepsilon_2 & 1 & \sqrt{2} & 1 & 0 \\ \sqrt{2} & 1 & \varepsilon_1 + \varepsilon_3 & 0 & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 2\varepsilon_2 + U & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1 & 1 & \sqrt{2} & \varepsilon_2 + \varepsilon_3 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & 2\varepsilon_3 + U \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Conforme discutimos na seção 2.2 desta dissertação, para analisar o caso sem interação podemos considerar a rede com uma única partícula. Neste caso, a dimensão do espaço de Fock é $d = L$, e a base fica

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 0, \dots, 0\rangle \\ |0, 1, \dots, 0\rangle \\ \vdots \\ |0, 0, \dots, 1\rangle \end{array} \right\}. \quad (\text{A.8})$$

Para $U = 0$ e $N = 1$ a matriz que representa o hamiltoniano é tri-diagonal, exceto pelos termos de tunelamento H_{1L} e H_{L1} , que conectam o primeiro e o L -ésimo sítios. Essa matriz tem a forma

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & \varepsilon_2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varepsilon_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{L-2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \varepsilon_{L-1} & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \varepsilon_L \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Apêndice B

Exemplo de programa utilizado para os cálculos numéricos

Para exemplificar os procedimentos numéricos, apresentamos neste apêndice o código, escrito em Fortran 90, de um programa que calcula a fração de superfluido (2.12) para o modelo de Aubry-André sem interação, com uma única partícula, ou seja, $N = 1$, para vários valores da amplitude do potencial Δ , escolhendo $\Omega = 1$ e $\theta = 0.1$.

O programa monta a matriz do hamiltoniano construída no apêndice A, equação (A.9), com o potencial incomensurável (1.3), e, então, diagonaliza-a através da sub-rotina ‘*heevr*’ do pacote de álgebra linear MKL-LAPACK da Intel®.

Os parâmetros de entrada do programa são o valor inicial da amplitude do potencial ‘delta’, o incremento na amplitude ‘ddel’, o valor final da amplitude ‘dlim’, o tamanho da rede ‘L’ e o próximo número de Fibonacci ‘nL’. Esses parâmetros são fornecidos através de um arquivo de dados de entrada.

```
program becmlr

use mkl95_precision, only: WP => DP
use mkl95_lapack, only: heevr

implicit none
    REAL(WP), ALLOCATABLE :: w(:),w0(:),mu(:)
    COMPLEX(WP), ALLOCATABLE :: h(:,,:),h0(:,,:)
    REAL(WP) :: tt, E0, delta, Ett, fs, ddel, dlim, beta, pi
    INTEGER :: L, i, j, k, nl
```

```

!***** initial parameters *****
read*, delta, ddel, dlim, L, nL

pi = 4*datan(1.d0)
beta = real(nL)/real(L)
!beta = (1.d0 + sqrt(5.d0))/2.d0

ALLOCATE ( h(L,L), h0(L,L), w(L), w0(L), mu(L) )
tt = 0.1d0 ! phase twist angle
fs = 0.d0
mu = 0.d0
w0 = 0.d0
w = 0.d0
E0 = 0.d0
Ett = 0.d0

do while (delta<dlim)

    do i = 1, L
        mu(i) = delta*cos(2*pi*beta*i)/2.d0
!        write(1,*) mu(i), delta
    enddo

!***** generation of hamiltonian *****

h0 = cmplx(0.d0,0.d0)
do i=1,L-1
    h0(i,i) = cmplx(mu(i),0.d0)
    h0(i,i+1) = -cmplx(1.d0,0.d0)
    h0(i+1,i) = conjg(h0(i,i+1))
end do

h0(L,L) = cmplx(mu(L),0.d0)
h0(L,1) = -cmplx(1.d0,0.d0)
h0(1,L)= conjg(h0(L,1))

```

```
CALL heevr(h0,w0) ! diagonalize h0
E0 = minval(w0) ! GS , no twist

!***** twisted hamiltonian *****

h = cmplx(0.d0,0.d0)
do i=1,L-1
  h(i,i) = cmplx(mu(i),0.d0)
  h(i,i+1) = -cmplx(cos(tt/real(L)),-sin(tt/real(L)))
  h(i+1,i) = conjg(h(i,i+1))
end do

h(L,L) = cmplx(mu(L),0.d0)
h(L,1) = -cmplx(cos(tt/real(L)),-sin(tt/real(L)))
h(1,L)= conjg(h(L,1))

CALL heevr(h,w) ! diagonalize h
Ett = minval(w) ! GS , with twist

!*****

fs = real(L*L)*(Ett-E0)/(tt*tt)
print*, delta, fs
delta = delta + ddel

end do

end program becmlr
```

Apêndice C

Trabalho publicado

Finite-size effects in Anderson localization of one-dimensional Bose-Einstein condensates

J. C. C. Cestari, A. Foerster, and M. A. Gusmão

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brazil

(Received 8 November 2010; published 29 December 2010)

We investigate the disorder-induced localization transition in Bose-Einstein condensates for the Anderson and Aubry-André models in the noninteracting limit using exact diagonalization. We show that, in addition to the standard superfluid fraction, other tools such as the entanglement and fidelity can provide clear signatures of the transition. Interestingly, the fidelity exhibits good sensitivity even for small lattices. Effects of the system size on these quantities are analyzed in detail, including the determination of a finite-size-scaling law for the critical disorder strength in the case of the Anderson model.

DOI: [10.1103/PhysRevA.82.063634](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.82.063634)

PACS number(s): 03.75.Nt, 67.85.Hj, 64.60.an, 72.15.Rn

I. INTRODUCTION

Localization of waves in a disordered medium was first predicted by Anderson [1] in the context of noninteracting electrons in a random crystal. Recently, developments in the research into ultracold atomic gases have enlarged the possibilities for studying Anderson localization in new systems. A breakthrough in the area was the experimental realization of Anderson localization of a Bose-Einstein condensate (BEC) in two different kinds of disordered optical potentials [2,3]: Billy *et al.* [2] employed a BEC of ^{87}Rb atoms in the presence of a controlled disorder produced by a laser speckle, while Roati *et al.* [3] utilized a BEC of essentially noninteracting ^{39}K atoms in combination with a one-dimensional quasiperiodic lattice to observe Anderson localization.

Subsequently, this issue has been attracting increasing interest from both the experimental and theoretical communities. From the experimental point of view, a variety of techniques have been implemented, such as bichromatic optical lattices [3–5], speckle laser patterns [2,6,7], and disordered cold atom lattices [8]. Theoretically, different approaches such as a variational method [9], quantum Monte Carlo simulation [10,11], exact diagonalization [4,12–14], renormalization group [15,16], density-matrix renormalization group [17–19], mean-field approximations [20–23], and a perturbative treatment [24], among others, have been explored in this context of disordered ultracold atoms.

The usual model for bosons on a lattice utilizes the so-called Bose-Hubbard Hamiltonian, with the general form

$$H = \sum_i \varepsilon_i n_i + \Omega \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1), \quad (1)$$

with the standard notation for creation, annihilation, and number operators for bosons at lattice sites. Each site is considered to have a single bound state of energy ε_i , the hopping between sites is restricted to nearest neighbors, with amplitude Ω , and U is a local repulsive interaction.

Randomness is introduced via the values of ε_i . These values can have a truly random (usually uniform) distribution in the range $-\Delta/2 \leq \varepsilon_i \leq \Delta/2$, which characterizes the Anderson model [1]. Alternatively, they can vary periodically with a period incommensurate with the lattice spacing. This is the case in the Aubry-André (AA) model [25] for which

the energies, in the one-dimensional case, are written as $\varepsilon_i = \Delta \cos(2\pi\beta i)$, where $\beta = (1 + \sqrt{5})/2$ is the golden ratio, and i assumes integer values from 1 to L (the system size in units of the lattice spacing). Experimentally, speckle patterns can be modeled by the Anderson model, while quasiperiodic potentials can be described by the AA model.

The phenomenology of model (1) at low temperatures involves Bose-Einstein condensation, superfluidity, a Mott (gapped) phase, and Anderson localization, depending on the relative values of Ω , U , and Δ [26]. Theoretical studies of such a rich phenomenology are faced with the usual challenges of interacting many-body problems. For arbitrary interaction strengths perturbation theory cannot be used, which more or less restricts the approach to numerical solutions on finite-size lattices. Then, finite-size effects tend to smear out the sharp phase boundaries expected in the thermodynamic limit. This is true even for the pure Anderson transition in the noninteracting limit. For instance, in his original paper [1] Anderson proved that his model presents localization for any $\Delta > 0$ in one dimension, while Aubry and André [25] proved that in their model localization only occurs for $\Delta \geq 2$, but these critical values are not clearly seen in small lattices.

Our aim in this paper is to discuss in detail the effects of finite size in the noninteracting limit for a one-dimensional lattice. We focus on the size dependence of quantities that provide signatures of quantum phase transitions (QPTs), here applied to Anderson localization. In addition to the superfluid fraction, common in studies of Bose-Einstein condensates, we also employ quantities borrowed from quantum information theory, like entanglement and fidelity [28]. All of these quantities allow us to obtain the correct thermodynamic limit of the critical disorder strength for both Anderson and Aubry-André models. In particular, we are able to show that the critical disorder strength in the Anderson model obeys a scaling law with the system size.

II. LOCALIZATION TRANSITION

We consider one-dimensional lattices of L sites, and perform exact numerical diagonalization of the Hamiltonian matrix, obtaining a chosen number of lowest-energy eigenvalues, and the corresponding eigenvectors. We will focus only on ground-state results. Since interaction is not taken into account here, we restrict our numerical calculations to

a single particle. When evaluating the quantities of interest for the Anderson model, it is necessary to average over a large number of random configurations of the local energies in order to have physically meaningful results.

For each lattice size, we calculate the superfluid fraction, ground-state entanglement, and fidelity, as discussed in detail below. This is done for a wide range of disorder strength values, with the aim of determining a critical value above which the states are localized. Throughout the paper, energy quantities (like Δ) are measured in units of the tunneling amplitude Ω , while the lattice size L is expressed in units of the lattice spacing, which is equivalent to the number of sites.

A. Superfluid fraction

The ground state of a uniform Bose-Einstein condensate should be superfluid. There is some controversy as to whether this remains true in the noninteracting limit. As discussed by Lieb *et al.* [29], if one defines a superfluid as a fluid that does not respond to an external velocity field (e.g., rotation of the container walls), then the ideal Bose gas is a perfect superfluid in its ground state. This is the approach we adopt here. On the other hand, the presence of disorder tends to alter the nature of the quantum states, which become no longer extended over the entire system, but localized over a finite distance. Then, the so-called *superfluid fraction* (here denoted by f_s) can signal whether the states are extended ($f_s \neq 0$) or not ($f_s = 0$).

The superfluid fraction for a discrete lattice system is proportional to the difference in ground-state energy between the systems with periodic and with twisted boundary conditions [4]. Instead, we may keep periodic boundary conditions and use a twisted Hamiltonian

$$H_\theta = \sum_{i=1}^L \varepsilon_i n_i + \Omega \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j e^{-i\frac{\theta}{L}} + a_j^\dagger a_i e^{i\frac{\theta}{L}}), \quad (2)$$

where θ is the twist angle. Ground-state energies of the Hamiltonian (2) are calculated for $\theta = 0$ (E_0) as well as for finite θ (E_θ), and the superfluid fraction is given by [4]

$$f_s = \frac{L^2}{N\Omega} \frac{(E_\theta - E_0)}{\theta^2}, \quad (3)$$

being independent of the twist angle θ as long as $\theta \ll \pi$. In practice, f_s remains the same even for twist angles that are a significant fraction of π . Typically, we use $\theta = 0.1$ in our numerical calculations.

In Fig. 1 we show the superfluid fraction for the Anderson model as a function of disorder strength for different lattice sizes. When $\Delta = 0$ we always have $f_s = 1$, i.e., the system is in a superfluid phase. For large enough Δ we have $f_s \rightarrow 0$, and the ground state is localized.

We define a characteristic value Δ_L of the disorder strength for each lattice size by observing that the superfluid-fraction curves are well fitted by the function

$$f_s \simeq e^{(-\frac{\Delta}{\Delta_L})^\alpha}. \quad (4)$$

For all lattice sizes L we find that the fitting parameter α has approximately the same value $\alpha \simeq \frac{4}{3}$. Lines in Fig. 1 show the fittings with Eq. (4) while symbols are the corresponding values obtained by the numerical solution. Figure 1 seems

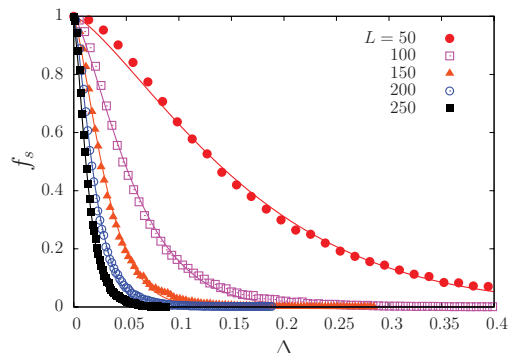


FIG. 1. (Color online) Average superfluid fraction in the Anderson model as a function of the disorder strength Δ for different lattice sizes. The averages were calculated from 5000 random configurations of the potential. The lines correspond to fittings with Eq. (4).

to indicate that $\Delta_L \rightarrow 0$ when $L \rightarrow \infty$, as expected. This behavior will be verified in Sec. III through a finite-size-scaling analysis.

Figure 2 shows the superfluid fraction for the Aubry-André model as a function of the “disorder strength” Δ for different lattice sizes. Actually, Δ is the amplitude of the *Aubry-André potential*, i.e., the incommensurate periodic modulation of local energies. We can see that $f_s(\Delta) = 0$ for Δ larger than a characteristic Δ_L , with $\Delta_L \approx 2$, consistent with the expected critical value $\Delta_c = 2$. However, this happens for certain lattice sizes, but for other values of L the behavior of f_s with Δ is completely different, even for very similar sizes, as exemplified for $L = 54$ and 55 in Fig. 2. The reason for this apparently puzzling feature lies in the mismatching between

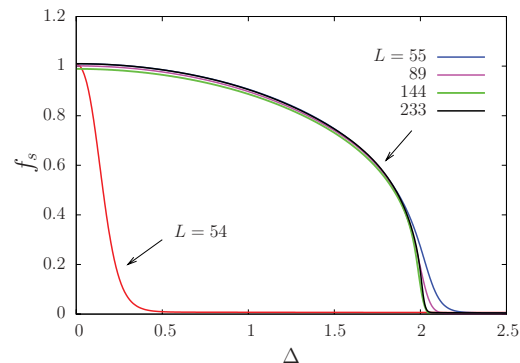


FIG. 2. (Color online) Superfluid fraction in the AA model as a function of the potential amplitude Δ for chosen lattice sizes. The expected critical value $\Delta_c = 2$ is well verified for suitably chosen lattice sizes, but not for others (e.g., $L = 54$ in this figure), as discussed in the text. The lines indicated at the top right corner are essentially indistinguishable, except near $\Delta = 2$, where rounding is more noticeable for smaller sizes.

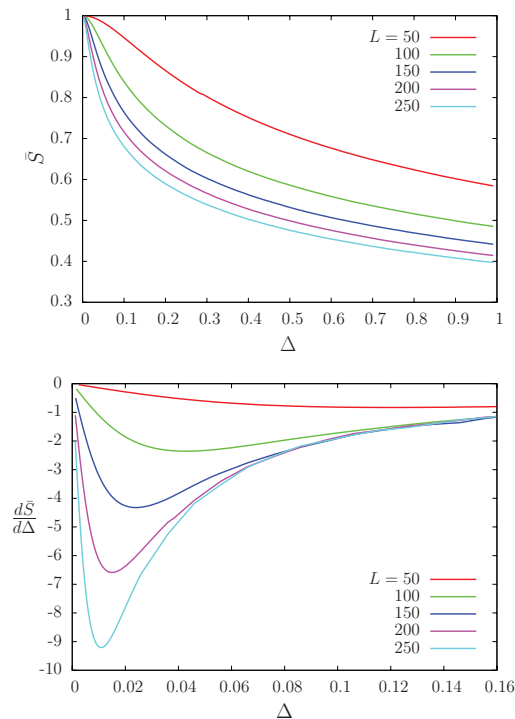


FIG. 3. (Color online) Top: Average entanglement as a function of the disorder strength Δ for different lattice sizes in the Anderson model. Averages were calculated from 5000 random configurations of the potential. Bottom: Derivative of the entanglement with respect to the disorder strength Δ for the same sizes. The location of its minimum for a given system size L is taken as the corresponding critical disorder strength Δ_L . On both panels, curves are associated with increasing lattice sizes from top to bottom.

periodic boundary conditions with integer period L and the Aubry-André potential with irrational period β^{-1} . One can verify that $\Delta_L \approx 2$ occurs when L belongs to the sequence of Fibonacci numbers [27]. The first members of this sequence, for $L \geq 8$, are 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, The ratio between two consecutive Fibonacci numbers approaches the golden ratio when these numbers become very large. For small lattice sizes it is better to redefine the parameter β to be such a ratio of Fibonacci numbers. We do this in order to get better results for smaller sizes like $L = 8$ or 13, which become relevant for numerical solutions in the presence of interactions. It is worth mentioning that departure from the critical $\Delta_c = 2$ was observed in the experiments of Roati *et al.* [3]. They find localization for $\Delta \geq 7$, using an incommensurate potential with $\beta \simeq 1.1972$. This value of β , being significantly different from a ratio of consecutive Fibonacci numbers (the golden ratio is ~ 1.6180), does not ensure the duality condition [27] that yields $\Delta_c = 2$.

B. Entanglement

The concept of quantum entanglement can be used to study localization if we choose a basis for the Hilbert space composed of states that are localized at each of the lattice sites. Then, a fully extended ground state will have maximum entanglement of the basis states. In the opposite limit, the entanglement will be zero for localization at a single site. So, the ground-state Shannon entropy is a good measure of entanglement. It is given by

$$S = - \sum_i p_i \log_2 p_i, \quad (5)$$

where $p_i = |c_i|^2$, with c_i representing the coefficient of the i th basis state in the expansion of the ground-state vector $|\Psi_0\rangle$ [30,31]. For a lattice of L sites, the maximum value of S is $\log_2 L$ and occurs when all the p_i are equal. We define $\bar{S} \equiv S/\log_2 L$ as our measure of entanglement, whose maximum value will be $\bar{S}_{\max} = 1$.

In Fig. 3 (top panel) we show the ground-state entanglement \bar{S} (averaged over disorder) for the Anderson model as a

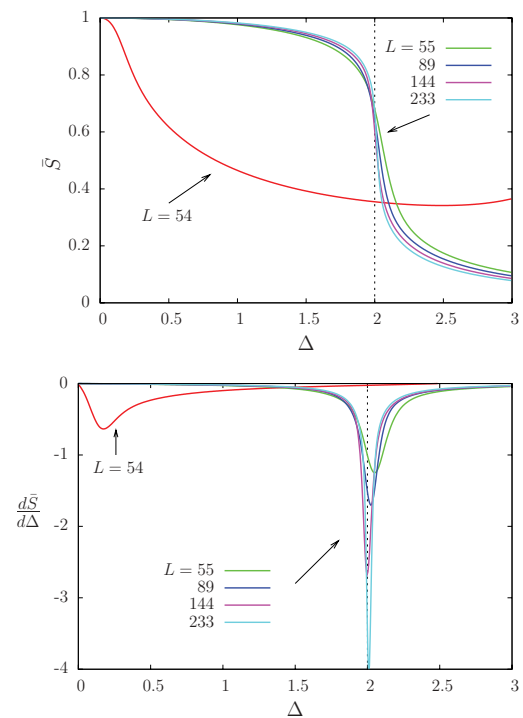


FIG. 4. (Color online) Entanglement (top) as a function of the potential amplitude Δ for chosen lattice sizes in the AA model, and the corresponding derivative (bottom). Notice the sudden drop in the first case, and sharp minima in the second near the point $\Delta = 2$, except for sizes that are not Fibonacci numbers, here exemplified by $L = 54$. The size effect is better noticed in the bottom panel, where deeper minima correspond to larger lattice sizes.

function of the disorder strength Δ for various lattice sizes L . We define the characteristic Δ_L in this case as the inflection point of the entanglement curve. It can be better visualized as the minimum in the derivative of \bar{S} with respect to Δ , as shown in the bottom panel of Fig. 3. Notice that the minimum moves toward $\Delta = 0$ as L increases. We will come back to this point in our finite-size-scaling analysis of Sec. III.

In the case of the AA model, the ground-state entanglement, when calculated for lattice sizes belonging to the Fibonacci series, shows a sudden drop near $\Delta = 2$, as can be seen in Fig. 4 (top panel). This indicates that the derivative $d\bar{S}/d\Delta$ is again a good marker of the quantum phase transition. The bottom panel of Fig. 4 shows this derivative as a function of Δ for different lattice sizes. We can see a sharp minimum in the derivative essentially at $\Delta = 2$, more or less independently of the lattice size. Here, the size effect appears mainly in the depth of the minimum, which increases dramatically with increasing size. A non-Fibonacci size has been included for comparison in Fig. 4.

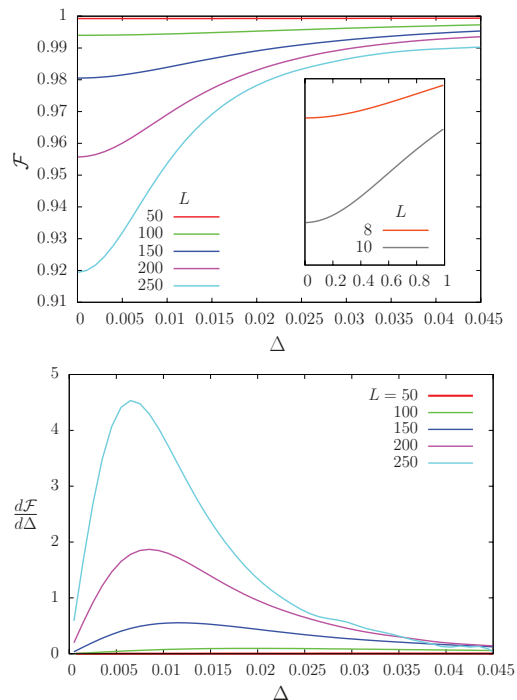


FIG. 5. (Color online) Average ground-state fidelity (top) in the Anderson model as a function of disorder strength for different lattice sizes, and the corresponding derivative (bottom). Averages were calculated from 5000 random configurations of the potential. The top-panel inset shows (in a much smaller vertical scale) that the minimum at $\Delta = 0$ exists even for small lattice sizes. The position of the maximum derivative for a given system size L is taken as the critical disorder strength Δ_L . Deeper minima of the fidelity (higher maxima of its derivative) correspond to larger lattice sizes.

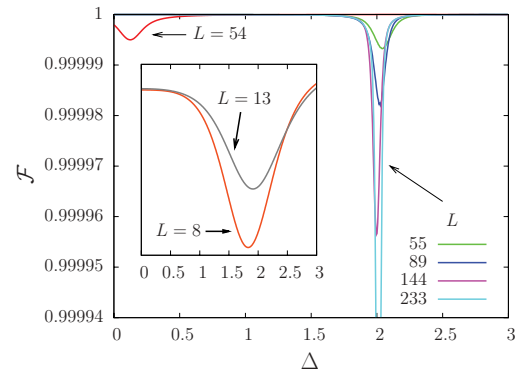


FIG. 6. (Color online) Fidelity as a function of the disorder strength Δ for different lattice sizes. There is a sharp peak close to the point $\Delta = 2$. The inset shows two small lattice sizes in a much narrower scale close to $\mathcal{F} = 1$. We redefined β as $13/8$ and $21/13$ for $L = 8$ and 13 , respectively. The curves indicated at the bottom right show minima that become more pronounced as L increases.

C. Fidelity

The *fidelity* is a measure of how distinguishable two quantum states are. For pure states, it is defined as the absolute value of the overlap between these two states. We use here the scalar product of two ground-state vectors of Hamiltonians with slightly different values of Δ , writing the fidelity as

$$\mathcal{F}(\Delta) = |(\Psi_0(\Delta - \delta\Delta)|\Psi_0(\Delta + \delta\Delta))|, \quad (6)$$

which has values between 0 and 1. Generically, the fidelity exhibits a minimum at a critical parameter value characterizing a QPT. We have checked that although the choice of $\delta\Delta$ affects the magnitude of the minimum, which can be made arbitrarily small, the value of Δ at which the minimum occurs is independent of $\delta\Delta$. Here we use $\delta\Delta = 10^{-2}$ in all numerical calculations. In the case of the Anderson model, we perform the configuration average on $\mathcal{F}(\Delta)$, which means that both ground states are obtained for the same realization of the random local energies.

The average ground-state fidelity for the Anderson model is shown in Fig. 5 (top panel) as a function of the disorder strength for different lattice sizes. It is interesting to notice that it has a minimum for all lattice sizes at $\Delta = 0$, which is the expected critical disorder strength in one dimension for $L \rightarrow \infty$. The inset of Fig. 5 shows that this remains true even for sizes as small as $L = 8$ and 10 . The finite-size effect is noticeable in the minimum depth, which increases with L . Nevertheless, the minima are relatively broad, and an inflection point exists, which moves down in Δ as L increases. This is better seen in the derivative of $\mathcal{F}(\Delta)$, shown in the bottom panel of Fig. 5. Similarly to what we observed for the superfluid fraction, here the maximum of $d\mathcal{F}/d\Delta$ locates a characteristic disorder strength Δ_L for each lattice size. A detailed analysis of the behavior of Δ_L for large L will be presented in Sec. III.

The fact that $\mathcal{F}(\Delta)$ can signal the critical disorder strength for all lattice sizes is confirmed for the AA model. Figure 6 shows the fidelity as a function of Δ for different lattice sizes

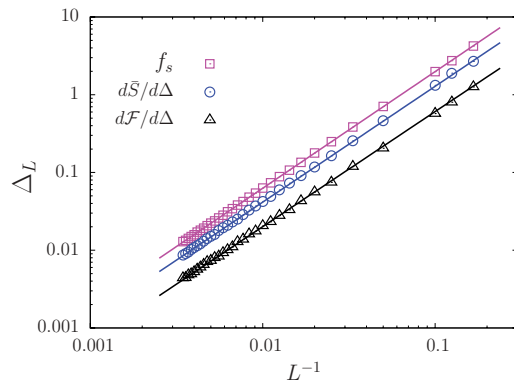


FIG. 7. (Color online) Logarithmic plot of the critical disorder strength Δ_L in the Anderson model as a function of the lattice size, evaluated from superfluid fraction (squares), derivative of the entanglement (circles), and derivative of the fidelity (triangles). The lines are fittings to the scaling law (7), which is satisfied with an exponent $\gamma \approx 1.5$ and with $\Delta_\infty = 0$ for all three quantities.

(all belonging to the Fibonacci series, except $L = 54$). A sharp minimum appears very close to $\Delta = 2$ for all the appropriate sizes, clearly indicating the localization transition. In this case, one does not extract more information from the derivative. The size effect is evident in the minimum depth, which is strongly dependent on the value of L .

We can observe that the ground-state fidelity is a very precise tool to indicate the localization transition, even for small lattice sizes. This is specially relevant in the interacting case, where numerical solutions must be restricted to relatively small sizes. It is interesting to mention that the concept of fidelity was also efficiently applied to identify quantum phase transitions in other models in the BEC scenario [32,33]. For the Bose-Hubbard model without disorder, it was shown [20] that the fidelity is a clearer indicator of a QPT than the entanglement.

III. FINITE-SIZE SCALING

In the previous section, we have seen that good signatures of the localization transition in the one-dimensional AA model are provided by the superfluid fraction, the ground-state entanglement, and the ground-state fidelity. All these quantities (or appropriate derivatives) correctly locate the critical amplitude of the incommensurate potential (equivalent to a “disorder strength”), more or less independently of lattice size, provided this size is not too small, and is chosen to be nearly commensurate with an integer number of oscillations of the AA potential.

For the true Anderson model, however, the results are less clear-cut upon a simple direct visualization. We defined characteristic disorder strengths Δ_L in Sec. II, with different definitions depending on the physical quantity evaluated. In order to determine more quantitatively their size dependence, these different Δ_L 's were calculated for lattice sites from 6 to 300, with random averages being performed typically over 5000 configurations. Despite the different definitions, if we make a log-log plot of Δ_L vs L^{-1} , as is done in Fig. 7, we see that in all the three cases (superfluid fraction, entanglement, and fidelity) the following scaling law is obeyed:

$$\Delta_L - \Delta_\infty = C L^{-\gamma}, \quad (7)$$

where C and γ are positive real numbers, and Δ_∞ is the critical disorder strength in the thermodynamic limit. Despite the fact that the prefactor C in Eq. (7) differs for the three definitions of Δ_L , we find the same exponent $\gamma \approx 1.5$ in all three cases, and the results are consistent with $\Delta_\infty = 0$, in accordance with the exact value for Anderson localization in one dimension. It is also worth noticing in Fig. 7 that the scaling law (7) is satisfied even for lattice sizes as small as $L = 6$.

IV. CONCLUSIONS

We presented a detailed numerical study of disorder-induced localization in the one-dimensional Anderson and Aubry-André models of Bose-Einstein condensates. Through exact numerical diagonalization of the Hamiltonian matrix, we studied the superfluid fraction, entanglement, and fidelity as quantities that can signal the localization transition even at finite size. Here we restricted our analysis to the noninteracting limit in order to reach large lattice sizes. With this, we were able to verify that finite-size-scaling laws are obeyed by all the studied quantities in the case of the Anderson model, with a common exponent. In contrast, finite-size effects in the Aubry-André model are less pronounced, and mainly related to the incommensurability between the potential and the system size. If the incommensurate potential is tuned so that an integer number of periods nearly coincides with the system size, then the localization transition is fairly sharp at the critical potential strength.

Even though all the three quantities analyzed here show clear signatures of the localization transition, we find that the fidelity is less prone to finite-size effects. This makes it specially suited to be used in the interacting case, where numerical solutions are restricted, for practical reasons, to relatively small sizes.

ACKNOWLEDGEMENT

We would like to thank CNPq—Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (Brazil)—for financial support.

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
 [2] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, and A. Aspect, *Nature (London)* **453**, 891 (2008).

- [3] G. Roati, C. D’Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, and M. Inguscio, *Nature (London)* **453**, 895 (2008).

- [4] R. Roth and K. Burnett, *Phys. Rev. A* **68**, 023604 (2003).

- [5] L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarrera, C. Fort, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 130404 (2007).
- [6] J. E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D. S. Wiersma, C. Fort, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 070401 (2005).
- [7] D. Clément, P. Bouyer, A. Aspect, and L. Sanchez-Palencia, *Phys. Rev. A* **77**, 033631 (2008).
- [8] U. Gavish and Y. Castin, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 020401 (2005).
- [9] Y. Cheng and S. K. Adhikari, *Phys. Rev. A* **82**, 013631 (2010).
- [10] P. Sengupta, A. Raghavan, and S. Haas, *New J. Phys.* **9**, 103 (2007).
- [11] R. T. Scalettar, G. G. Batrouni, and G. T. Zimanyi, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 3144 (1991).
- [12] D.-S. Lühmann, K. Bongs, K. Sengstock, and D. Pfannkuche, *Phys. Rev. A* **77**, 023620 (2008).
- [13] R. Pugatch, N. Bar-Gill, N. Katz, E. Rowen, and N. Davidson, e-print [arXiv:cond-mat/0603571v6](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0603571v6).
- [14] P. Louis and M. Tsubota, *J. Low Temp. Phys.* **148**, 351 (2007).
- [15] K. G. Singh and D. S. Rokhsar, *Phys. Rev. B* **46**, 3002 (1992).
- [16] T. Giamarchi and H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **37**, 325 (1988).
- [17] S. Rapsch, U. Scholthöck, and W. Zwerger, *Europhys. Lett.* **46**, 559 (1999).
- [18] C. Kollath, A. Iucci, T. Giamarchi, W. Hofstetter, and U. Schollwöck, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 050402 (2006).
- [19] G. Roux, T. Barthel, I. P. McCulloch, C. Kollath, U. Schollwöck, and T. Giamarchi, *Phys. Rev. A* **78**, 023628 (2008).
- [20] P. Buonsante, V. Penna, A. Vezzani, and P. B. Blakie, *Phys. Rev. A* **76**, 011602(R) (2007).
- [21] B. Damski, J. Zakrzewski, L. Santos, P. Zoller, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 080403 (2003).
- [22] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4075 (1995).
- [23] M. Larcher, F. Dalfovo, and M. Modugno, *Phys. Rev. A* **80**, 053606 (2009).
- [24] G. Orso, A. Iucci, M. A. Cazalilla, and T. Giamarchi, *Phys. Rev. A* **80**, 033625 (2009).
- [25] S. Aubry and G. André, *Ann. Isr. Phys. Soc.* **3**, 133 (1980).
- [26] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [27] G.-L. Ingold, A. Wobst, C. Aulbach, and P. Hanggi, *Eur. Phys. J. B* **30**, 175 (2002).
- [28] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [29] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, *Phys. Rev. B* **66**, 134529 (2002).
- [30] J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier, *Phys. Rev. B* **80**, 184421 (2009).
- [31] A. P. Hines, R. H. McKenzie, and G. J. Milburn, *Phys. Rev. A* **67**, 013609 (2003).
- [32] M. Duncan, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, N. Oelkers, and A. P. Tonel, *Nucl. Phys. B* **767**, 227 (2007).
- [33] G. Santos, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, and S. R. Dahmen, *Phys. Rev. A* **81**, 063621 (2010).

Referências Bibliográficas

- [1] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen gases”, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse*, 261 (1924).
- [2] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen gases - Zweite Abhandlung”, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse*, 3 (1925).
- [3] S. N. Bose, “Plancks gesetz und lichtquantenhypothese”, *Z. Phys. A*, **26**, 178 (1924).
- [4] 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).
- [5] G. Roati, M. Zaccanti, C. D’Errico, J. Catani, M. Modugno, A. Simoni, M. Inguscio, and G. Modugno, “³⁹K Bose-Einstein Condensate with Tunable Interactions”, *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 010403 (2007).
- [6] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch, and I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms”, *Nature*, **415**, 39 (2002).
- [7] M. Greiner, O. Mandel, T. Hänsch, and I. Bloch, “Collapse and revival of the matter wave field of a Bose–Einstein condensate”, *Nature*, **419**, 51 (2002).
- [8] P. W. Anderson, “Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”, *Phys. Rev.*, **109**, 1492 (1958).
- [9] S. Aubry and G. André, “Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices”, *Ann. Isr. Phys. Soc.*, **3**, 133 (1980).
- [10] M. Albert and P. Leboeuf, “Localization by bichromatic potentials versus Anderson localization”, *Phys. Rev. A*, **81**, 013614 (2010).

- [11] G. Roux, T. Barthel, I. P. McCulloch, C. Kollath, U. Schollwöck, and T. Giamarchi, “Quasiperiodic Bose-Hubbard model and localization in one-dimensional cold atomic gases”, *Phys. Rev. A*, **78**, 023628 (2008).
- [12] M. P. V. Albada and A. Lagendijk, “Observation of Weak Localization of Light in a Random Medium”, *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 2692 (1985).
- [13] Z. Q. Zhang, C. C. Wong, K. K. Fung, Y. L. Ho, W. L. Chan, S. C. Kan, T. L. Chan, and N. Cheung, “Observation of Localized Electromagnetic Waves in Three-Dimensional Networks Of Waveguides”, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 5540 (1998).
- [14] T. Schwartz, G. Bartal, S. Fishman, and M. Segev, “Transport and Anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices”, *Nature*, **446**, 52 (2006).
- [15] Y. Lahini, A. Avidan, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D. N. Christodoulides, and Y. Silberberg, “Anderson Localization and Non-linearity in One-Dimensional Disordered Photonic Lattices”, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 013906 (2008).
- [16] J. E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D. S. Wiersma, C. Fort, and M. Inguscio, “Bose-Einstein Condensate in a Random Potential”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 070401 (2005).
- [17] D. Clément, A. F. Varón, M. Hugbart, J. A. Retter, P. Bouyer, L. Sanchez-Palencia, D. M. Gangardt, G. V. Shlyapnikov, and A. Aspect, “Suppression of Transport of an Interacting Elongated Bose-Einstein Condensate in a Random Potential”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 170409 (2005).
- [18] C. Fort, L. Fallani, V. Guarrera, J. E. Lye, M. Modugno, D. S. Wiersma, and M. Inguscio, “Effect of Optical Disorder and Single Defects on the Expansion of a Bose-Einstein Condensate in a One-Dimensional Waveguide”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 170410 (2005).
- [19] T. Schulte, S. Drenkelforth, J. Kruse, W. Ertmer, J. Arlt, K. Sacha, J. Zakrzewski, and M. Lewenstein, “Routes Towards Anderson-Like Localization of Bose-Einstein Condensates in Disordered Optical Lattices”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 170411 (2005).
- [20] U. Gavish and Y. Castin, “Matter-Wave Localization in Disordered Cold Atom Lattices”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 020401 (2005).
- [21] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, and A. Aspect, “Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder”, *Nature*, **453**, 891 (2008).

- [22] G. Roati, C. D’Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, and M. Inguscio, “Anderson localization of a non-interacting Bose–Einstein condensate”, *Nature*, **453**, 895 (2008).
- [23] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 1999.
- [24] G.-L. Ingold, A. Wobst, C. Aulbach, and P. Hanggi, “Delocalization and Heisenberg’s uncertainty relation”, *Eur. Phys. J. B*, **30**, 175 (2002).
- [25] N. Oelkers and J. Links, “Ground-state properties of the attractive one-dimensional Bose-Hubbard model”, *Phys. Rev. B*, **75**, 115119 (2006).
- [26] B. D. Josephson, “Possible new effects in superconductive tunnelling”, *Physics Lett.*, **1**, 251 (1962).
- [27] E. H. Lieb and W. Liniger, “Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State”, *Phys. Rev.*, **130**, 1605 (1963).
- [28] R. Roth and K. Burnett, “Phase diagram of bosonic atoms in two-color superlattices”, *Phys. Rev. A*, **68**, 023604 (2003).
- [29] N. Bar-Gill, R. Pugatch, E. Rowen, N. Katz, and N. Davidson, “Quantum Phases of Ultra Cold Bosons in Incommensurate 1D Optical Lattices”, *arXiv:cond-mat/0603513v7*, (2006).
- [30] G. N. S. Filho, *Modelos de Condensados de Bose-Einstein Exatamente Solúveis*. Tese de Doutorado - UFRGS, 2007.
- [31] J. C. C. Cestari, A. Foerster, and M. A. Gusmão, “Finite-size effects in Anderson localization of one-dimensional Bose-Einstein condensates”, *Phys. Rev. A*, **82**, 063634 (2010).
- [32] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, “Superfluidity in dilute trapped Bose gases”, *Phys. Rev. B*, **66**, 134529 (2002).
- [33] N. Nagaosa, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Springer, 1999.
- [34] R. Roth and K. Burnett, “Superfluidity and interference pattern of ultracold bosons in optical lattices”, *Phys. Rev. A*, **67**, 031602 (2003).
- [35] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.

- [36] A. P. Hines, R. H. McKenzie, and G. J. Milburn, “Entanglement of two-mode Bose-Einstein condensates”, *Phys. Rev. A*, **67**, 013609 (2003).
- [37] P. Buonsante and A. Vezzani, “Ground-State Fidelity and Bipartite Entanglement in the Bose-Hubbard Model”, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 110601 (2007).
- [38] J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier, “Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wave functions”, *Phys. Rev. B*, **80**, 184421 (2009).
- [39] A. Acín, A. Andrianov, L. Costa, E. Jané, J. I. Latorre, , and R. Tarrach, “Generalized Schmidt Decomposition and Classification of Three-Quantum-Bit States”, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 1560 (2000).
- [40] M. Duncan, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, N. Oelkers, and A. P. Tonel, “Emergent quantum phases in a heteronuclear molecular Bose-Einstein condensate model”, *Nucl. Phys. B*, **767**, 227 (2007).
- [41] G. Santos, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, and S. R. Dahmen, “Quantum phase transitions in an interacting atom-molecule boson model”, *Phys. Rev. A*, **81**, 063621 (2010).
- [42] P. Zanardi and N. Paunković, “Ground state overlap and quantum phase transitions”, *Phys. Rev. E*, **74**, 031123 (2006).
- [43] K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, “Mott-Hubbard Transition versus Anderson Localization in Correlated Electron Systems with Disorder”, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 056404 (2005).
- [44] M. A. Gusmão, “Phase diagram of the Anderson-Falicov-Kimball model at half filling”, *Phys. Rev. B*, **77**, 245116 (2008).
- [45] A. Rapp, G. Zaránd, C. Honerkamp, and W. Hofstetter, “Color Superfluidity and “Baryon” Formation in Ultracold Fermions”, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 160405 (2007).
- [46] J. R. Williams, E. L. Hazlett, J. H. Huckans, R. W. Stites, Y. Zhang, and K. M. O’Hara, “Evidence for an Excited-State Efimov Trimer in a Three-Component Fermi Gas”, *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 130404 (2009).