

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

Transições de Fase Quânticas em Modelos Unidimensionais para Redes de Átomos Frios

Jardel Caminha Carvalho Cestari

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

Porto Alegre

Janeiro/2016

Agradecimentos

Muitas pessoas me ajudaram ao longo desta jornada. Gostaria de agradecer, especialmente, àqueles que durante os momentos mais difíceis não me deixaram desanimar:

- Aos meus pais, que me possibilitaram perseguir os meus sonhos.
- Aos professores Miguel Gusmão e Angela Foerster, pela orientação e amizade.
- Aos meus amigos mais próximos, uma gente muito esquisita.
- Aos colegas da sala M 208, pelas discussões animadas e frutíferas.

Muito obrigado!

Resumo

Investigamos transições de fase quânticas em condensados de Bose-Einstein unidimensionais em rede, descritos pelo modelo de Bose-Hubbard e generalizações. Nosso foco principal é na transição de localização induzida tanto por desordem aleatória (modelo de Anderson) quanto por potenciais incomensuráveis (modelo de Aubry-André). Por meio de diagonalização exata do Hamiltoniano, calculamos fração de superfluido (parâmetro apropriado para sinalizar localização), emaranhamento, gap de energia, compressibilidade, e fidelidade do estado fundamental. Complementando-se mutuamente, essas quantidades dão claras indicações da ocorrência de transições de fases quânticas, mesmo em redes pequenas. Analisamos em detalhe efeitos de tamanho finito, obtendo expoentes críticos para a transição de localização de Anderson, tanto no limite não interagente quanto com interação fraca. Também estudamos a transição entre as fases isolante de Mott e vidro de Bose para interação forte, que pode ser tratada com um limite de baixa mobilidade (pequena amplitude de *hopping*). Adicionalmente, estudamos propriedades topológicas de um modelo de Aubry-André unidimensional generalizado, e sua inter-relação com a “desordem”, com especial atenção para a estabilidade de certos estados topológicos frente a uma perturbação periódica incomensurável.

Abstract

We investigate quantum phase transitions in one-dimensional Bose-Einstein condensates on a lattice, described by the Bose-Hubbard model and generalizations. Our main focus is on the localization transition induced by either random disorder (the Anderson model) or incommensurate potentials (the Aubry-André model). By means of exact diagonalization of the Hamiltonian, we calculate superfluid fraction (an appropriate parameter to signal localization), entanglement, energy gap, compressibility, and ground-state fidelity. Complementing each other, these quantities provide clear signatures of quantum phase transitions, even for small lattices. We analyze finite-size effects in detail, obtaining critical exponents for the Anderson-localization transition, both in the non-interacting limit and with weak interaction. We also study the transition between the Mott-insulator and Bose-glass phases for strong interactions, which can be treated as a low-mobility (small-*hopping*) limit. In addition, we study topological properties of a generalized one-dimensional Aubry-André model, and their interplay with “disorder”, focusing on the robustness of certain topological states against a periodic incommensurate perturbation.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Modelo de Bose-Hubbard	5
1.2	Transições de fase quânticas	6
1.2.1	Ordem topológica	7
2	Metodologia e Revisão	12
2.1	Quantidades indicadoras de transição	13
2.1.1	Fração de superfluido	13
2.1.2	Entropia de emaranhamento	15
2.1.3	Fidelidade	17
2.2	Leis de escala	19
2.2.1	Fração de superfluido	21
2.2.2	Compressibilidade	21
2.3	Transições de fase no modelo de Bose-Hubbard com desordem	22
2.3.1	Transição superfluido – isolante de Mott	23
2.3.2	Transição isolante de Mott – vidro de Bose	26
2.3.3	Transição superfluido – vidro de Bose	27
2.3.4	Diagrama de fases com densidade unitária	29
2.4	Aspectos topológicos de generalizações do modelo de Aubry-André	30
2.4.1	Mapeamento do modelo de Aubry-André no de Harper 2D	34

3	Localização em $d = 1$ no Limite não Interagente	35
3.1	Desordem do tipo Anderson	35
3.1.1	Fração de superfluido	36
3.1.2	Fidelidade	37
3.1.3	Entropia de emaranhamento	38
3.1.4	Análise de escala de tamanho finito	39
3.2	Modelo de Aubry-André	40
3.2.1	Fração de superfluido	41
3.2.2	Fidelidade	41
3.3	Expoentes críticos da transição de localização	43
3.3.1	Modelo de Anderson	43
3.3.2	Modelo de Aubry-André	44
4	Modelo de Aubry-André com Interação	47
4.1	Diagrama de fases do modelo de Aubry-André	47
4.2	<i>Scaling</i> no limite de interação fraca	49
4.3	<i>Scaling</i> no limite de interação forte	51
4.3.1	Gap de energia	52
4.3.2	Compressibilidade	53
4.3.3	Amplitude de <i>hopping</i> pequena	55
5	Fases Topológicas do Modelo de Aubry-André Generalizado	58
5.1	Hamiltoniano do modelo	58
5.1.1	Localização	59
5.2	Estados topológicos	61
6	Conclusões	67
	Apêndices	70
	A Representação Matricial do Hamiltoniano de Bose-Hubbard	70
	Referências Bibliográficas	73

Capítulo 1

Introdução

A condensação de Bose-Einstein foi prevista por A. Einstein [1,2] e S. Bose [3], em 1924. O fenômeno ocorre em um gás de bósons abaixo de uma temperatura crítica, sendo caracterizado pela ocupação macroscópica do estado fundamental, formando um gás quântico degenerado. Sua realização experimental com átomos ultrafrios em 1995 [4] proporcionou uma nova classe de sistemas quânticos que podem ser estudados em laboratório. Posteriormente, em 2004 [5], foi observado pela primeira vez em laboratório um “condensado fermiônico”, no qual átomos fermiônicos ultrafrios combinam-se em pares para formar um estado superfluido.

Sistemas de átomos ultrafrios em redes ópticas, nos quais um condensado bosônico ou fermiônico (ou uma mistura de ambos os tipos de átomos) é colocado em um arranjo periódico de poços de potencial obtido através de padrões estacionários de interferência de laser, oferecem uma ampla gama de possibilidades de controle experimental. Por exemplo, a intensidade da interação entre os átomos, sua mobilidade (por tunelamento entre poços de potencial vizinhos na rede) e sua densidade podem ser ajustadas independentemente [6–8]. Em vista disso, essas redes ópticas podem ser usadas para teste de modelos que antes só podiam ser aplicados, nem sempre de forma realista, a sistemas de matéria condensada.

Nesta Tese, usamos o modelo de Bose-Hubbard para descrever sistemas de condensados bosônicos em redes ópticas unidimensionais. Temos como objetivo principal o estudo das transições de fase quânticas que ocorrem nesses sistemas, em particular a transição de localização de Anderson e a transição entre as fases *vidro de Bose* e *isolante de Mott*. Esses conceitos são apresentados a seguir.

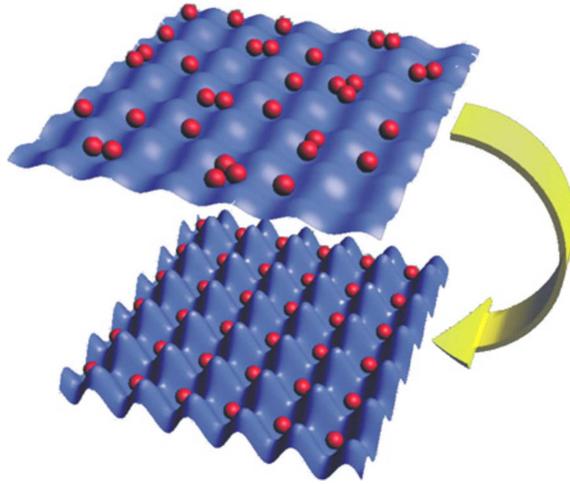


Figura 1.1: Em uma rede, devido ao aumento da intensidade das interações repulsivas, ocorre uma transição de fase SF-MI. (Figura ilustrativa, retirada da Ref. [10].)

Transição de Mott

Um condensado de Bose-Einstein não interagente no seu estado fundamental está na fase superfluida (SF) [9], ou seja, flui irrotacionalmente e sem viscosidade. Em uma rede, com uma interação repulsiva U entre partículas (átomos) no mesmo sítio (poço de potencial), a superfluidez é destruída acima de um valor crítico U_c . A chamada fase *isolante de Mott* (MI – do inglês “Mott Insulator”), ocorre para um número de partículas igual a um múltiplo do número de sítios. Nessa fase as partículas estão localizadas devido à forte interação repulsiva, e o estado fundamental corresponde a um número fixo de partículas em cada sítio. Essa transição superfluido-isolante, que foi observada diretamente pela primeira vez em átomos frios bosônicos em 2002 [10,11], está ilustrada na Fig. 1.1. Ela constitui um exemplo do que se denomina genericamente *transição de Mott*, que também é realizada, em sua versão fermiônica, na transição metal-isolante em sólidos.

No regime superfluido, existe coerência de longo alcance na fase da função de onda e flutuação no número de ocupação de cada sítio. Já na fase de Mott o número de átomos em cada sítio está bem definido. Esta fase é caracterizada por um *gap* de energia para excitações, devido à interação repulsiva, e também por sua incompressibilidade.

Localização de Anderson

Outro tipo de transição superfluido-isolante que tem sido muito estudada em condensados de Bose-Einstein ocorre devido à desordem. A *localização de Anderson* é um fenômeno no qual ondas não interagentes não se difundem em um meio desordenado devido à interferência destrutiva entre as componentes incidentes e espalhadas. Ela foi prevista por P. W. Anderson em 1958 [12], no contexto de elétrons não interagentes em um sólido desordenado.

Em sistemas bosônicos desordenados, este fenômeno aparece como uma transição de fase superfluido-isolante. A fase isolante correspondente é dita *vidro de Bose* (BG – do inglês “Bose Glass”), e é caracterizada por um *gap* de excitações nulo e por uma compressibilidade finita. Nesta fase, o estado fundamental não é homogêneo, mas apresenta pequenas ilhas de superfluido isoladas [13].

O modelo proposto por Anderson atribui a cada sítio de um cristal 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 e em $d \geq 3$ dimensões, uma função de onda inicialmente localizada na origem se mantém localizada se a amplitude da desordem for suficientemente grande. Nesse modelo, sistemas de dimensionalidade $d \leq 2$ apresentam localização para qualquer amplitude não nula de desordem. Anderson recebeu o prêmio Nobel de Física em 1977 por sua descoberta.

A localização de Anderson também é induzida em redes sem a introdução de desordem propriamente dita, mas quebrando a simetria de translação através de uma modulação das profundidades dos poços de potencial com um período incomensurável com o da rede. Isso define o que é atualmente conhecido como modelo de Aubry-André [14]. Esse tipo de rede é frequentemente denominado rede bi-cromática ou quase-periódica. Diferentemente do caso da desordem aleatória, existe uma amplitude crítica deste tipo de potencial para que ocorra a localização de Anderson, mesmo em sistemas unidimensionais.

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 [15–18]. Os avanços recentes em experimentos com átomos ultrafrios abriram a possibilidade de estudar a localização de Anderson nessa nova classe de sistemas [19–23]. Em 2008, experimentos envolvendo condensados de Bose-Einstein em redes ópticas unidimensionais resultaram, pela primeira vez, na observação direta da localização de Anderson

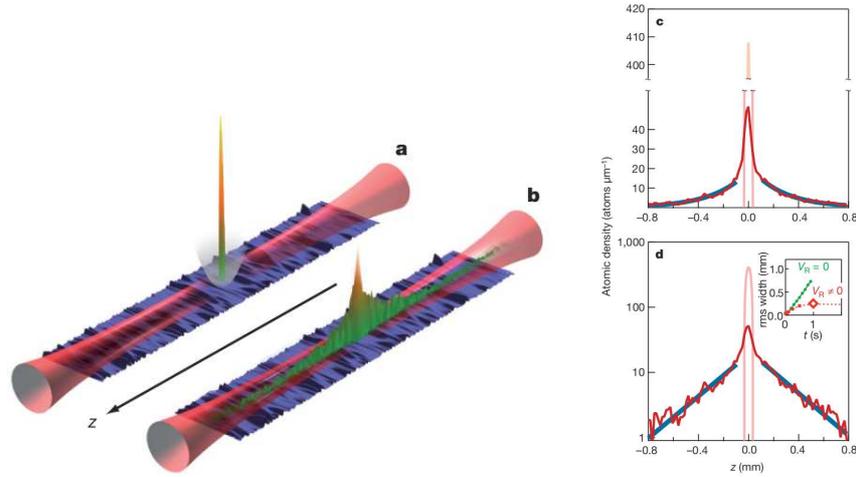


Figura 1.2: (a) Inicialmente o condensado está aprisionado. Um potencial aleatório de amplitude pequena está presente. (b) Quando libertado, o condensado começa a se expandir mas permanece localizado. (c, d) Perfis de densidade do condensado após a expansão, em escalas linear e logarítmica. A densidade decai exponencialmente ao longo do eixo z . (Figura retirada da Ref. [24].)

em ondas de matéria, tanto no contexto do modelo de Anderson [24] quanto no do modelo de Aubry-André [25].

Em um dos experimentos, Billy *et al.* [24] utilizaram um condensado não interagente de ^{87}Rb em um guia de ondas unidimensional e um potencial óptico efetivamente aleatório criado pela passagem de um laser por uma placa difusora (*laser speckle*). A localização de Anderson foi observada com amplitude de desordem Δ pequena. A Fig. 1.2, extraída da Ref. [24], 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 com a posição, que é o indicativo da localização de Anderson [26]. O experimento confirma que a desordem aleatória, mesmo de pequena intensidade, resulta na localização em uma dimensão.

Roati *et al.* [25] utilizaram um condensado não interagente de ^{39}K em um potencial óptico unidimensional criado por dois lasers de comprimentos de onda incomensuráveis para observar experimentalmente a transição de Anderson no potencial de Aubry-André. A Fig. 1.3, extraída da Ref. [25], mostra, à esquerda, 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 mesma figura, à direita, podemos ver

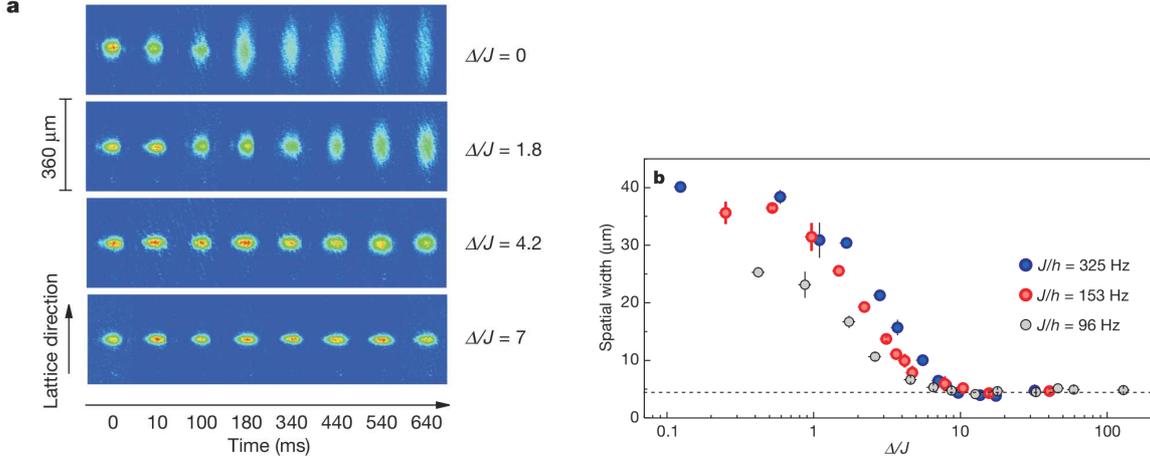


Figura 1.3: (a) Imagens da expansão do condensado ao longo do tempo, para diferentes amplitudes do potencial incomensurável. Acima de um valor crítico de Δ ocorre localização. (b) Desvio quadrático médio da extensão espacial do condensado após 750 ms, para diferentes valores de Δ e da amplitude de tunelamento J . (Figura retirada da Ref. [25].)

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 .

1.1 Modelo de Bose-Hubbard

O modelo usual para descrever bósons interagentes em uma rede (arranjo periódico de poços de potencial) é conhecido como modelo de Bose-Hubbard [27], assim denominado em analogia com o modelo de Hubbard [28], proposto para o estudo de sistemas eletrônicos de estado sólido. O hamiltoniano do modelo é

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \sum_i \left[\varepsilon_i n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \right], \quad (1.1)$$

onde a_i é o operador que aniquila um átomo no sítio i da rede, a_i^\dagger é o correspondente operador de criação, e o operador $n_i = a_i^\dagger a_i$ conta o número de átomos no sítio. O primeiro termo do hamiltoniano de Bose-Hubbard descreve o tunelamento entre os diferentes sítios, com amplitude de tunelamento t , e $\langle i, j \rangle$ denota que a soma é restrita a vizinhos mais próximos; o poço de potencial em cada sítio apresenta um único estado ligado com energia ε_i , e U é a intensidade da interação (repulsiva) entre átomos no mesmo sítio. Os operadores

de criação e aniquilação obedecem às relações de comutação bosônicas

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

No contexto do modelo de Bose-Hubbard, a desordem no *modelo de Anderson* é inserida através de um potencial aleatório. As energias locais de cada sítio são escolhidas aleatoriamente, utilizando uma distribuição de probabilidade uniforme no intervalo $-\Delta \leq \varepsilon_i \leq \Delta$, sendo Δ a amplitude de desordem. Já para o *modelo de Aubry-André*, em $d = 1$ o potencial (nível de energia local) no sítio i é dado pela expressão

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

onde $\beta = (1 + \sqrt{5})/2$ é a “razão áurea” e i assume valores inteiros (definimos a escala de comprimentos tomando a distância entre sítios vizinhos como unidade).

Desde o trabalho pioneiro de M. P. A. Fisher *et al.* [29], diversas abordagens teóricas foram aplicadas ao problema da localização de bósons por desordem, como aproximação de campo médio [30–33], teoria de perturbação [34], método variacional [35], simulação quântica de Monte Carlo [36, 37], diagonalização exata [38–41], grupo de renormalização perturbativo [42], grupo de renormalização da matriz densidade [43, 44], entre outras. A localização de muitos corpos é um problema muito complexo ainda em aberto, e a inter-relação entre desordem e interação é um tópico que atualmente desperta grande interesse em geral, em diversas áreas da física.

No presente trabalho, estamos interessados no estudo do diagrama de fases U vs. Δ do modelo de Bose-Hubbard com desordem, assim como das transições entre suas fases: superfluido, isolante de Mott e vidro de Bose.

1.2 Transições de fase quânticas

É um fato bem conhecido que sistemas físicos podem exibir uma alteração significativa nas suas propriedades macroscópicas quando variamos parâmetros externos, como a pressão ou a temperatura. Esse fenômeno é conhecido como *transição de fase*.

Nas transições de *primeira ordem*, ou descontínuas, existe uma região de coexistência entre fases distintas, isto é, que possuem propriedades macroscópicas diferentes. No regime de coexistência existe metaestabilidade de uma das fases, e a linha de transição no espaço de parâmetros externos é determinada pela mudança do mínimo global da energia livre. Logo,

nestas transições, algumas propriedades termodinâmicas do sistema sofrem uma variação descontínua. Um exemplo comum deste tipo de transição de fase é a fusão de um sólido.

Normalmente, uma linha de transição de primeira ordem termina em um *ponto crítico*, no qual a transição torna-se de *segunda ordem*, ou contínua. Neste tipo de transição, as diferenças entre as quantidades termodinâmicas das duas fases se anulam de forma contínua ao nos aproximarmos do ponto crítico. Uma particularidade das transições de fase contínuas é que, quando o sistema é crítico, isto é, está no ponto crítico, as flutuações das quantidades físicas relevantes estão correlacionadas ao longo de todo o sistema, ou seja, o *comprimento de correlação* ξ é infinito. Um exemplo deste tipo de transição de fase é a transição de Curie em materiais magnéticos. As transições que estudamos neste trabalho são de segunda ordem.

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 dominam.

Transições de fase quânticas ocorrem à temperatura nula, quando o sistema se encontra no estado fundamental, ao variarmos algum dos parâmetros que descrevem os acoplamentos do sistema. A transição paramagneto-antiferromagneto, que acontece em alguns materiais quando variamos a intensidade de um campo magnético externo [27], e a transição superfluido-isolante, que o modelo de Bose-Hubbard exhibe ao variarmos a intensidade das interações (Transição de Mott [10, 11]) ou da desordem (Localização de Anderson [12, 14]), são exemplos de transições de fase quânticas. É importante notar que este tipo de transição de fase pode acontecer mesmo em sistemas unidimensionais; devido à sua natureza quântica, que confere ao sistema uma dimensão espacial efetiva maior, como veremos na seção 2.2.

1.2.1 Ordem topológica

A descrição das transições de fase geralmente se baseia no princípio da quebra espontânea de simetria: em um cristal a simetria de translação é quebrada, enquanto em um superfluido a simetria quebrada é a de calibre [45]. A quebra de simetria leva naturalmente a um parâmetro de ordem, cujo valor esperado não é nulo na fase ordenada.

Porém, nem toda a transição de fase quântica se encaixa nesta descrição, uma vez que

certas transições não quebram nenhuma simetria. Por isso, conceitos mais gerais se fazem necessários, como o de *ordem topológica*. Esta é um tipo de ordem quântica que pode ser atribuída a diferentes fases da matéria, de modo que estados com ordens topológicas distintas não podem se transformar continuamente uns nos outros sem que ocorra uma transição de fase quântica [46].

O efeito Hall quântico, descoberto em 1980 [47], foi o primeiro fenômeno no qual se percebeu uma transição sem quebra de simetria. No estado Hall quântico, um forte campo magnético perpendicular é aplicado a um sistema eletrônico bidimensional. Enquanto o interior (*bulk*) do sistema permanece isolante, existem estados condutores ao longo das bordas. O estado Hall não quebra nenhuma simetria do Hamiltoniano subjacente, mas define uma *fase topológica*: as quantidades que definem esse estado, como o número de estados de borda e a condutividade quantizada, não dependem de detalhes microscópicos do sistema e não se modificam sem que este passe por uma transição de fase quântica. Uma breve discussão sobre o efeito Hall quântico e isolantes topológicos pode ser encontrada na seção 2.4.

Isolantes topológicos em uma dimensão

Um isolante topológico é um material que possui um *gap* de energia no seu interior e estados condutores de borda “topologicamente protegidos”, ou seja, estados protegidos por alguma simetria do Hamiltoniano e que não desaparecem sem que o sistema passe por uma transição de fase quântica [48]. Devido ao grande controle sobre os parâmetros em experimentos com átomos frios em redes ópticas, esses sistemas oferecem uma ótima oportunidade para o estudo de isolantes topológicos.

De maneira geral, se acreditava que este tipo de estado existiria apenas em duas ou mais dimensões. Porém, recentemente foi feita a descoberta de que um sistema de férmions não interagentes em uma rede quase-periódica unidimensional pode se comportar como um isolante topológico quando sua energia de Fermi se encontra em um *gap* [49]. O fato de que sistemas quase-periódicos unidimensionais podem exibir estados de borda e fases topológicas não triviais são atribuídos a uma dimensão efetiva superior, devida à conexão que o modelo de Aubry-André possui com o modelo de Harper [50] bidimensional, que descreve elétrons em uma rede na presença de um campo magnético perpendicular.

Neste caso, o papel da dimensão efetiva adicional é desempenhado pela fase variável ϕ

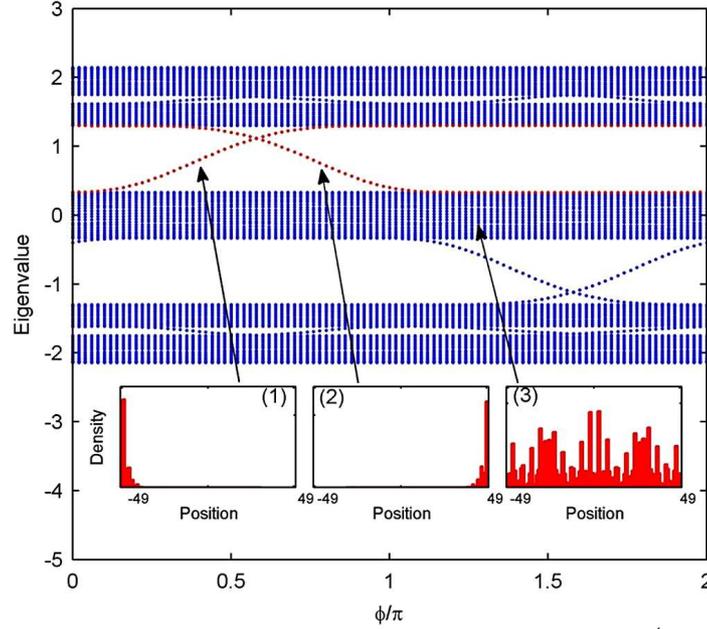


Figura 1.4: Espectro de energia de (1.4) em função da fase ϕ , para $\beta = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{5}}{2}\right)$. (1)-(2) Estados localizados nas bordas atravessam o *gap* de energia. (3) Estado estendido da banda. (Ilustração retirada da Ref. [51]).

entre a rede e o potencial incomensurável:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi i\beta + \phi) a_i^\dagger a_i. \quad (1.4)$$

O espectro deste modelo, calculado numericamente, aparece na Fig. 1.4, juntamente com os estados de borda. No caso unidimensional, embora estes estados sejam *gapless*, são localizados. É interessante perceber que os estados de borda podem ser levados uns nos outros, apenas variando a fase ϕ . Ao se aumentar a fase, percebe-se que o autoestado (1) permanece localizado na borda esquerda até que a sua energia iguale a da banda, quando o estado se torna estendido. Aumentando-se ainda mais a fase, o estado retorna para o *gap*, porém localizado na borda direita.

Modelo de Aubry-André não diagonal

A versão “*off-diagonal*” do modelo de Aubry-André não interagente possui uma modulação incomensurável da amplitude de tunelamento entre sítios vizinhos. Esse modelo é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} -t [1 + \delta \cos(2\pi i\beta + \phi)] a_i^\dagger a_j. \quad (1.5)$$

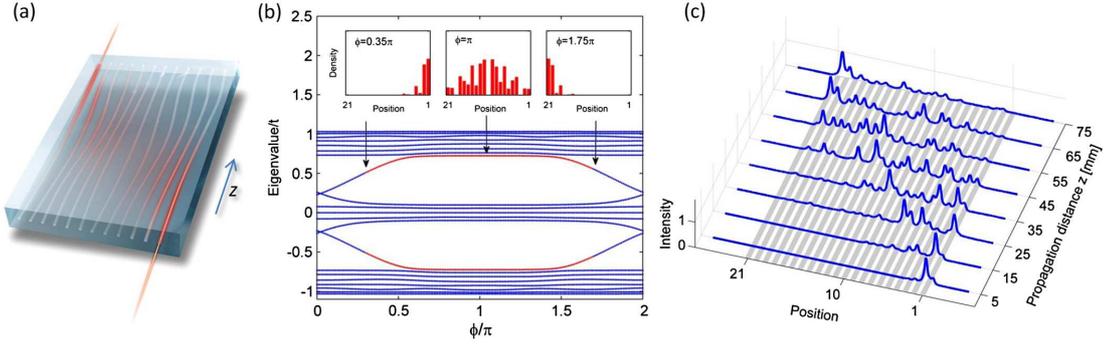


Figura 1.5: Observação experimental do bombeamento adiabático via estados topologicamente protegidos. **(a)** Ilustração da modulação adiabática do quasicristal fotônico. O espaçamento variável entre os guias de onda faz com que a luz sinta uma modulação adiabática na amplitude de tunelamento. **(b)** Espectro do modelo em função da fase, para amplitude de hopping $t = 40/75$ e modulação incomensurável de hopping $\delta = 0.6$. No experimento, a fase ϕ foi escaneada entre 0.35π e 1.75π (marcado com flechas). **(c)** A luz foi injetada no guia de onda da direita (primeiro sítio), em $z = 0$, $\phi = 0.35\pi$. Foram realizadas medidas da distribuição da intensidade nos sítios para vários estágios da evolução adiabática. A luz cruza a rede da direita para a esquerda, e se encontra localizada no sítio 21 em $z = 75\text{ mm}$, $\phi = 1.75\pi$. (Ilustração extraída da Ref. [51]).

Embora a incomensurabilidade com a rede esteja no termo do tunelamento, este modelo é topologicamente equivalente ao modelo de Aubry-André “diagonal” [52], como pode ser visto pelo seu espectro na Fig. 1.5(b).

Os estados de borda deste modelo também pertencem ao mesmo modo, ou seja, podem ser levados uns nos outros ao se variar a fase ϕ . Tais estados topológicos, localizados nas extremidades opostas de uma rede unidimensional com modulação quase-periódica do tunelamento, foram observados a partir da realização experimental do bombeamento adiabático de fótons [51].

Neste experimento, descrito na Fig. 1.5, foram utilizadas guias de onda unidimensionais inscritas à laser em vidro. O espaçamento entre esses guias foi modulado ao longo da direção de propagação, o que simula a modulação da amplitude de *hopping* e realiza a variação de ϕ ao longo desta direção. Um feixe de fótons foi inicialmente injetado no guia da direita (o primeiro sítio), em um autoestado localizado. A distribuição da intensidade da luz foi medida em diferentes posições. Conforme o feixe se desloca, a fase muda e o estado se deslocaliza, até finalmente se localizar na extremidade oposta à que entrou.

Disposição do conteúdo da Tese

Nosso estudo da transição de Anderson é baseado no cálculo numérico de propriedades relevantes do estado fundamental de um sistema de bósons não interagentes na presença de desordem, seguido de uma análise de escala de tamanho finito. A principal propriedade calculada é a fração de superfluido, mas também utilizaremos os conceitos de *fidelidade* e *emaranhamento*, originários da teoria da informação quântica. As mesmas quantidades são usadas para analisar as propriedades topológicas do modelo de Aubry-André unidimensional não interagente.

No capítulo 2, apresentamos uma discussão detalhada dessas quantidades, e fazemos uma breve revisão de conceitos básicos da teoria de transições de fase. Introduzimos as relações de escala de tamanho finito que serão utilizadas para a análise das transições de fase quânticas, e também apresentamos um estudo do diagrama U vs. Δ , tanto para o modelo de Anderson quanto para o de Aubry-André. Além disso, revisamos o Efeito Hall quântico, e mostramos como ele se relaciona com o modelo de Aubry-André em uma dimensão.

No capítulo 3, através da diagonalização numérica do hamiltoniano (1.1) no limite não interagente, apresentamos uma análise de como as quantidades relevantes calculadas se comportam em redes de vários tamanhos. A partir de uma análise de escala de tamanho finito, obtemos o expoente do comprimento de correlação ν e o expoente dinâmico z para a transição de Anderson em $d = 1$ nos dois modelos.

O capítulo 4 aborda o modelo de Aubry-André com interação entre as partículas, na forma do modelo de Bose-Hubbard. Apresentamos um diagrama de fases envolvendo desordem e interação, e discutimos as leis de escala em dois limites: efeito de interação fraca na transição SF-BG, e a transição MI-BG no limite de interações fortes.

O capítulo 5 é dedicado ao estudo do modelo de Aubry-André generalizado, que possui modulação incomensurável tanto nos termos diagonais (potencial local) quanto dos não diagonais (termos de tunelamento), além de um termo não diagonal com modulação comensurável com o espaçamento da rede. Descrevemos as propriedades topológicas deste modelo e construímos o seu diagrama de fases na ausência de modulação incomensurável diagonal, que é o caso mais interessante quanto aos aspectos topológicos.

No capítulo 6 são apresentadas algumas conclusões deste trabalho.

Capítulo 2

Metodologia e Revisão

No que segue, descrevemos as propriedades do estado fundamental calculadas a fim de obter informações sobre as diferentes fases do modelo de Bose-Hubbard (seção 2.1), e discutimos a **análise de escala de tamanho finito** (*finite-size scaling*) (seção 2.2). Apresentamos um estudo preliminar do diagrama de fases U vs. Δ para os modelos de Anderson e de Aubry-André na seção 2.3, e uma revisão sobre o efeito Hall quântico e isolantes topológicos na seção 2.4.

Toda a análise numérica das diferentes fases dos modelos estudados foi realizada através da **diagonalização numérica exata** do hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1). Trabalhamos, no limite não interagente, em redes unidimensionais de diferentes tamanhos com apenas uma partícula. Quando levamos em conta a interação, consideramos o caso $L = N$ (densidade unitária, ou seja, uma partícula por sítio), o que dificulta bastante os cálculos numéricos.

A matriz do hamiltoniano é construída na base de autovetores com número de partículas bem definido em cada um dos sítios da rede. Um exemplo explícito de construção da matriz do hamiltoniano de Bose-Hubbard é apresentado no Apêndice A. Essa matriz é diagonalizada através de rotinas numéricas de álgebra linear (LAPACK). A obtenção dos autovalores e autovetores do hamiltoniano nos permite calcular valores esperados de quantidades físicas de interesse. No caso do modelo de Anderson, são realizadas médias dessas quantidades sobre um grande número de configurações aleatórias.

2.1 Quantidades indicadoras de transição

Nesta seção, descrevemos as quantidades físicas que foram calculadas para obter informações sobre as transições de fase quânticas.

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 uma quantidade importante pois é diretamente observável nos experimentos, e está relacionada com o parâmetro de ordem das transições de fase superfluido-isolante [9, 29, 38]. 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 N/L mantido constante), o sistema exibe $f_s = 1$ na fase de superfluido e $f_s = 0$ nas fases isolantes.

Para uma função de onda $\psi(\mathbf{r}, \tau)$, cuja evolução temporal (o tempo é denotado por τ) é governada pela equação de Schrödinger, a densidade de probabilidade e a densidade de corrente de probabilidade são da forma

$$\rho(\mathbf{r}, \tau) = \psi^*(\mathbf{r}, \tau)\psi(\mathbf{r}, \tau), \quad (2.1)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \tau) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\mathbf{r}, \tau)\nabla\psi(\mathbf{r}, \tau) - \psi(\mathbf{r}, \tau)\nabla\psi^*(\mathbf{r}, \tau)]. \quad (2.2)$$

Um condensado de Bose-Einstein, ainda que macroscópico, pode ser descrito por uma função de onda. Neste caso, podemos interpretar $\rho(\mathbf{r}, \tau)$ como a densidade de partículas do condensado e $\mathbf{j}(\mathbf{r}, \tau)$ 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 bosônico na forma

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, \tau)}e^{i\varphi(\mathbf{r}, \tau)}, \quad (2.3)$$

onde ρ é a densidade e φ é uma fase. Supondo que a função de onda obedece à equação de Schrödinger, a densidade de corrente da equação de continuidade fica:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{m}\rho(\mathbf{r}, \tau)\nabla\varphi(\mathbf{r}, \tau). \quad (2.4)$$

Percebemos que a presença de um gradiente de fase gera um campo de velocidades irrotacional e não dissipativo, o que é compatível com as propriedades macroscópicas de um superfluido. Então, a diferença de energia livre δF entre um sistema com um pequeno gradiente de fase imposto $|\nabla\varphi| = \theta/L$ e outro com $\nabla\varphi = 0$ se deve somente à energia cinética do movimento do superfluido, e será igual a (generalizando para um sistema de dimensionalidade d):

$$\delta F = \frac{1}{2}M_s v^2 = \frac{L^d \rho_s}{2m} |\nabla\varphi|^2. \quad (2.5)$$

Na equação acima, $M_s = mNf_s$ é a massa total do superfluido, $\rho_s = Nf_s/L^d$ é a densidade de superfluido, e $v = \theta/mL$ é a sua velocidade.

Em $T = 0$, se E_θ é a energia do estado fundamental do sistema submetido ao gradiente de fase, e E_0 é a energia do estado fundamental do sistema com $\nabla\varphi = 0$, a expressão para a fração de superfluido fica:

$$f_s = \frac{2mL^2 (E_\theta - E_0)}{N\hbar^2 \theta^2}. \quad (2.6)$$

Tratando agora do modelo de Bose-Hubbard unidimensional com L sítios e N partículas, podemos calcular numericamente a fração de superfluido. Fazendo a substituição $\frac{\hbar^2}{2m} \rightarrow t$, temos:

$$f_s = \frac{L^2 (E_\theta - E_0)}{Nt \theta^2}. \quad (2.7)$$

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 fase. Ou seja, a função de onda de muitos corpos deve satisfazer, para todo $1 \leq j \leq N$,

$$\psi_\theta(x_1, \dots, x_j + L, \dots, x_N) = e^{i\theta} \psi_\theta(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N). \quad (2.8)$$

Resolver o problema numérico com tais condições de contorno é muito difícil. Podemos aplicar uma transformação unitária para transformar o problema em um com condições de contorno periódicas [39]. Definindo

$$\hat{U}_\theta = \prod_{j=1}^N e^{i\frac{\theta}{L}\hat{x}_j}, \quad (2.9)$$

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

$$E_\theta = \langle \psi_\theta | H_0 | \psi_\theta \rangle = \langle \psi_0 | \hat{U}_\theta H_0 \hat{U}_\theta^\dagger | \psi_0 \rangle \equiv \langle \psi_0 | H_\theta | \psi_0 \rangle. \quad (2.10)$$

Através de diagonalização exata, utilizando condições de contorno periódicas, obtemos E_θ , a energia do estado fundamental do hamiltoniano modificado

$$H_\theta = \sum_{j=1}^L \left[-(a_j^\dagger a_{j+1} e^{-i\theta/L} + a_{j+1}^\dagger a_j e^{i\theta/L}) + \frac{U}{2} n_j (n_j - 1) + \varepsilon_j n_j \right]. \quad (2.11)$$

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 , comportamento necessário para que f_s seja independente de θ .

2.1.2 Entropia de 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 é uma ferramenta muito utilizada para identificar transições de fase quânticas, pois geralmente quando o sistema é crítico o emaranhamento entre seus subsistemas é alto. Veja, por exemplo, as referências [53, 54] para emaranhamento em condensados de Bose-Einstein. O emaranhamento do estado fundamental também é empregado na caracterização de estados topológicos de muitas partículas [55]. Porém, como vamos tratar apenas de estados topológicos de uma única partícula, não usaremos o emaranhamento para este tipo de análise.

Consideremos dois sistemas quânticos que podem ser descritos separadamente, com espaços de Hilbert \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B . O estado do sistema composto pertence ao espaço $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, e em geral não pode ser escrito como um produto tensorial de estados puros dos subsistemas, pois é da forma

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad (2.12)$$

com coeficientes c_{ij} quaisquer. Na verdade, podemos escrever este estado geral de uma maneira mais simples. A decomposição de Schmidt [56] assegura que existem bases ortonor-

mais $\{|i\rangle_A\}$ de \mathcal{H}_A e $\{|j\rangle_B\}$ de \mathcal{H}_B para as quais podemos escrever o estado $|\psi\rangle$ como

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i\rangle_A |i\rangle_B, \quad (2.13)$$

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 [56]. Primeiramente, tomamos o traço parcial do operador densidade do estado $|\psi\rangle$ em relação a B , obtendo assim o operador densidade reduzida do subsistema A ,

$$\rho_A \equiv \text{Tr}_B \rho = \sum_j \langle j | (|\psi\rangle\langle\psi|) | j \rangle_B. \quad (2.14)$$

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

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \ln \rho_B) \quad (2.15)$$

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 de Hilbert. Se os subsistemas estão em estados puros, a entropia de von Neumann é nula,¹ indicando que A e B não estão emaranhados.

Emaranhamento para condensados acoplados

Consideremos dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento de Josephson [53, 57], sistema que pode ser descrito pelo hamiltoniano de Bose-Hubbard com $L = 2$. No espaço de Fock, o estado fundamental do sistema pode ser escrito, na forma

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^N c_i |N-i\rangle_A |i\rangle_B, \quad (2.16)$$

onde N é o número total de átomos.

Tomamos o traço parcial em relação ao subsistema B ,

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

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

Logo, o emaranhamento é dado pela entropia de Shannon [56]:

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\sum_{i=0}^N |c_i|^2 \ln |c_i|^2, \quad (2.17)$$

onde os $\{c_i\}$ são os coeficientes da expansão do autovetor do estado fundamental em termos dos vetores da base do espaço de Fock. Podemos estender este raciocínio para um sistema com um número qualquer de condensados acoplados e, novamente, o emaranhamento é dado pela entropia de Shannon,

$$S = -\sum_i |c_i|^2 \ln |c_i|^2. \quad (2.18)$$

Estes coeficientes são obtidos através de diagonalização exata do hamiltoniano (1.1), utilizando condições de contorno periódicas.

Como escolhemos estados localizados em cada sítio da rede como base para o espaço de Hilbert, um estado completamente estendido terá emaranhamento máximo, enquanto localização em um único sítio resulta em emaranhamento nulo.

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 [56]

$$F(p_i, q_i) = \sum_i \sqrt{p_i q_i}. \quad (2.19)$$

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 [56]

$$\mathcal{F}(\rho, \sigma) = \text{Tr} \sqrt{\rho^{\frac{1}{2}} \sigma \rho^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.20)$$

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

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 .

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, frequentemente estamos interessados na fidelidade entre estados puros (com operadores densidade $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ e $\sigma = |\varphi\rangle\langle\varphi|$). Neste caso, a fidelidade é simplesmente o módulo do seu produto escalar,

$$\mathcal{F} = |\langle\psi|\varphi\rangle|. \quad (2.21)$$

A fidelidade é muito utilizada para detectar transições de fase quânticas, inclusive em sistemas bosônicos [54, 58, 59]. 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 deste 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 , e intensidade de interações U , comparamos estados fundamentais obtidos de diagonalizações exatas com valores ligeiramente diferentes de Δ ,

$$\mathcal{F}_\Delta(\Delta, U) = |\langle\psi_0(\Delta - \delta\Delta, U)|\psi_0(\Delta + \delta\Delta, U)\rangle|. \quad (2.22)$$

De modo geral, no limite termodinâmico a fidelidade é nula para o valor crítico do parâmetro [60]. Isso ocorre pois estamos comparando estados fundamentais que pertencem a fases quânticas diferentes e, portanto, distinguíveis. Em redes finitas, um mínimo na fidelidade é observado próximo ao valor crítico do parâmetro. Conforme o tamanho da rede aumenta, o mínimo da fidelidade se aproxima do valor crítico.

Outra possível definição para a fidelidade, que também usamos ao longo do trabalho, é

$$\mathcal{F}_U(\Delta, U) = |\langle\psi_0(\Delta, U - \delta U)|\psi_0(\Delta, U + \delta U)\rangle|. \quad (2.23)$$

Diferentes escolhas para os parâmetros $\delta\Delta$ e δU alteram apenas a profundidade do mínimo, mas não a sua localização. Para os cálculos numéricos, utilizamos valores de $\delta\Delta$ e δU entre 10^{-3} e 10^{-2} .

2.2 Leis de escala

Em uma transição de fase de segunda ordem, algumas quantidades físicas seguem lei de potências próximo ao ponto crítico. Os expoentes dessas leis são ditos *expoentes críticos*. Uma *lei de escala* é uma relação entre quantidades físicas envolvendo tais expoentes.

Historicamente, em uma análise voltada para a transição (clássica, termodinâmica) paramagneto-ferromagneto, foram definidos expoentes α , β , γ e δ , e os expoentes críticos de outras transições contínuas são definidos em analogia com os dessa transição. Sendo M o parâmetro de ordem (magnetização), definindo-se a temperatura reduzida $t = (T - T_c)/T_c$, relativa à temperatura crítica T_c , e o campo magnético externo reduzido $h = H/k_B T_c$, os expoentes críticos são definidos pelas leis de escala a seguir [61].

Calor específico a campo zero:

$$C(h = 0) \sim |t|^{-\alpha}. \quad (2.24)$$

Magnetização espontânea:

$$M(h \rightarrow 0^+) \sim (-t)^\beta. \quad (2.25)$$

Susceptibilidade a campo zero:

$$\chi(h = 0) \sim |t|^{-\gamma}. \quad (2.26)$$

Magnetização em T_c :

$$M(t = 0) \sim |t|^{1/\delta}. \quad (2.27)$$

Conforme mencionamos na introdução (na seção 1.2), em uma transição de segunda ordem o comprimento de correlação ξ diverge com uma lei de potência, o que define o expoente do comprimento de correlação ν ,

$$\xi(h = 0) \sim |t|^{-\nu}. \quad (2.28)$$

Os demais expoentes críticos, que geralmente são relevantes no contexto de transições de fase à baixas temperaturas, são definidos na seção seguinte.

É observado que muitos sistemas diferentes possuem os mesmos expoentes, e que o valor destes não depende dos detalhes microscópicos do sistema, mas sim de propriedades como as simetrias do hamiltoniano [61]. Diz-se que estes sistemas pertencem à mesma *classe de universalidade*.

Sistemas quânticos críticos

Leis de escala também são verificadas para algumas quantidades físicas próximo a transições de fase quânticas de segunda ordem, e todos os expoentes são definidos em analogia aos do caso clássico. Costuma-se denotar por g o valor do parâmetro que induz a transição, medido em relação ao seu valor crítico.

Em $T = 0$ as quantidades dinâmicas e estáticas estão interligadas, já que a função de partição Z , neste caso, é obtida a partir da ação S . Para um campo escalar real ϕ , por exemplo, a função de partição é dada pela integral funcional (utilizando unidades nas quais $\hbar = 1$),

$$Z = \int \mathcal{D}[\phi] e^{-S}. \quad (2.29)$$

A ação de um sistema quântico de dimensão espacial d , descrito por um hamiltoniano H , no formalismo de tempo imaginário de Matsubara [62],

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\int d^d x \phi(x, \tau) \partial_\tau \phi(x, \tau) + H(\phi) \right], \quad (2.30)$$

pode ser vista, no limite $\beta \rightarrow \infty$ (β é o inverso da temperatura), como o hamiltoniano efetivo de um problema clássico em $d + 1$ dimensões. O análogo de um “comprimento de correlação” ao longo dessa dimensão adicional é um tempo de relaxação característico do sistema.

O expoente dinâmico z relaciona-se com propriedades dinâmicas. Próximo ao ponto crítico, o tempo de relaxação característico τ diverge como

$$\tau \sim \xi^z \sim |g|^{-\nu z}. \quad (2.31)$$

Logo, em uma transição de fase quântica a quantidade $d + z$ tem o papel de uma dimensão espacial efetiva [63], o que explica por que essas transições podem ocorrer mesmo em $d = 1$ (uma dimensão espacial), onde não existem transições de fase clássicas (térmicas).

Ao longo deste trabalho vamos utilizar uma lei de escala bem conhecida [63],

$$F_s/L^d \sim |g|^{\nu(d+z)}, \quad (2.32)$$

que descreve como a parte singular F_s da energia livre se comporta próximo a um ponto crítico quântico.

Seguindo a abordagem de M. P. A. Fisher *et al.* [29], vamos deduzir uma relação de escala para a fração de superfluido f_s e para a compressibilidade κ nas proximidades de

uma transição de fase contínua. Mais tarde, usaremos tais relações para determinar os expoentes críticos da transição de Anderson.

2.2.1 Fração de superfluido

A parte singular da densidade de energia livre obedece à relação de escala (2.32)

$$F_s/L^d \sim |g|^{\nu(d+z)} G(\xi/L, \xi^z/\beta), \quad (2.33)$$

já que estas são as únicas escalas de comprimento e energia disponíveis para o sistema. A partir desta, e da Eq. (2.5), temos duas expressões para o acréscimo de densidade de energia livre de um sistema com um gradiente de fase $|\nabla\varphi| = \theta/L$:

$$\delta F/L^d \sim \rho_s |\nabla\varphi|^2 \sim \rho_s/L^2, \quad \delta F/L^d \sim |g|^{\nu(d+z)} (G_\theta - G_0). \quad (2.34)$$

Portanto, devemos ter $G_\theta - G_0 \sim (\xi/L)^2$, de onde concluímos que $\rho_s \sim \xi^2 |g|^{\nu(d+z)}$. Como o comprimento de correlação, próximo a um ponto crítico, diverge de acordo com $\xi \sim |g|^{-\nu}$, a densidade de superfluido obedece à relação de escala

$$\rho_s \sim |g|^{\nu(d+z-2)}. \quad (2.35)$$

Em sistemas finitos, mesmo na criticalidade, o comprimento de correlação é limitado pelo tamanho do sistema L . Então, a lei de escala de tamanho finito para a densidade de superfluido é

$$\rho_s \sim L^{-(d+z-2)} F(L/\xi) \sim L^{-(d+z-2)} F(L|g|^\nu), \quad (2.36)$$

onde F é uma função de escala. Temos, finalmente, a relação correspondente para a fração de superfluido,

$$f_s \sim L^{2-z} F(L|g|^\nu). \quad (2.37)$$

2.2.2 Compressibilidade

A ação de um campo escalar complexo $\psi = \sqrt{\rho} e^{i\varphi}$, no formalismo de tempo imaginário de Matsubara,

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\int d^d x \psi^* (\partial_\tau - \mu) \psi + H(\psi^*, \psi) \right], \quad (2.38)$$

possui a simetria

$$\mu \rightarrow \mu + i\delta\mu, \quad \psi \rightarrow \psi e^{i\delta\mu\tau}. \quad (2.39)$$

Consideremos agora um deslocamento de fase temporal θ em $\varphi(\tau)$, com $0 \leq \tau \leq \beta$. Este deslocamento é equivalente à mudança do potencial químico $\mu \rightarrow \mu - i\theta/\beta$. Esta mudança de potencial químico altera a energia livre do sistema da seguinte forma:

$$\delta F = -\frac{i\theta}{\beta} \frac{\partial F}{\partial \mu} - \frac{1}{2} \frac{\theta^2}{\beta^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \mu^2} + \mathcal{O}(\theta^3). \quad (2.40)$$

Como a densidade e a compressibilidade do sistema são dadas por

$$\rho = -\frac{1}{L} \frac{\partial F}{\partial \mu}, \quad \kappa = -\frac{1}{L} \frac{\partial^2 F}{\partial \mu^2}, \quad (2.41)$$

e a variação temporal da fase é $\dot{\varphi} \equiv \partial_\tau \varphi = \theta/\beta$, a partir da Eq. (2.5) e da Eq. (2.40), temos a ação efetiva de baixa energia que descreve um superfluido:

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \int d^d x \left[i\rho \dot{\varphi} + \frac{\kappa}{2} \dot{\varphi}^2 + \frac{\rho_s}{2m} |\nabla \varphi|^2 \right]. \quad (2.42)$$

A partir da relação de escala para a parte singular da densidade de energia livre (2.32)

$$F_s/L^d \sim |g|^{\nu(d+z)} G(\xi/L, \xi^z/\beta), \quad (2.43)$$

com G uma função de escala, temos duas expressões diferentes para o acréscimo de densidade de energia livre em um sistema com diferença de fase temporal

$$\delta F/L^d \sim \kappa \dot{\varphi}^2 \sim \kappa/\beta^2, \quad \delta F/L^d \sim |g|^{\nu(d+z)} (G_\theta - G_0). \quad (2.44)$$

Assim, devemos ter $G_\theta - G_0 \sim (\xi^z/\beta)^2$, de onde concluímos que $\kappa \sim \xi^{2z} |g|^{\nu(d+z)}$. Logo, a compressibilidade obedece à relação de escala:

$$\kappa \sim |g|^{\nu(d-z)}. \quad (2.45)$$

2.3 Transições de fase no modelo de Bose-Hubbard com desordem

Nesta seção, revisamos as transições de fase quânticas que ocorrem no modelo de Bose-Hubbard na presença de desordem, e discutimos a topologia do diagrama de fases tanto no modelo de Anderson quanto no de Aubry-André.

2.3.1 Transição superfluido – isolante de Mott

Se não nos restringirmos à densidade unitária (introduzindo o potencial químico μ), temos o diagrama de fases t vs. μ , que é caracterizado pelos chamados *lóbulo de Mott*, ilhas isolantes de densidade inteira em meio à fase superfluida. Este diagrama pode ser visualizado na Fig. 2.1, proveniente de uma aproximação de campo médio [29]. A compressibilidade $\kappa = \partial\rho/\partial\mu$ claramente é nula nos lóbulos, onde a densidade ρ é constante. O primeiro lóbulo corresponde à densidade $n = 1$, que é o caso particular no qual estamos interessados.

O *gap* de energia para excitações partícula-buraco em um ponto dentro de um lóbulo é igual à largura do lóbulo na direção μ . A transição de Mott à densidade constante ocorre na ponta dos lóbulos, onde o *gap* de energia se anula. Perguntamos-nos como a presença de desordem modifica essa transição.

A presença de desordem reduz a área dos lóbulos de Mott. Isto pode ser visto em uma teoria de campo médio, em inglês “Mean-Field Theory” (MFT), a qual substitui o termo não local do hamiltoniano de Bose-Hubbard por um termo local

$$H_K \equiv -t \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j \longrightarrow -2td \sum_i \left(\psi^* a_i + a_i^\dagger \psi - \psi^* \psi \right), \quad (2.46)$$

onde $\psi^* = \langle a_i^\dagger \rangle$ e $\psi = \langle a_i \rangle$. Aplicando esta substituição ao hamiltoniano de Bose-Hubbard

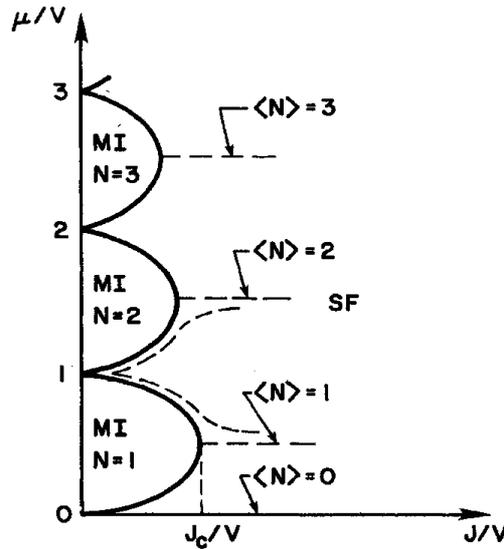


Figura 2.1: Lóbulos de Mott, que delimitam a transição de fase quântica superfluido - isolante de Mott, em MFT e com $\Delta = 0$. Retirado da Ref. [29]. Aqui, V corresponde a U , e J a t .

com desordem, e adicionando o potencial químico, temos

$$H = H_K + \sum_i \left[\frac{U}{2} n_i (n_i - 1) + \varepsilon_i n_i - \mu n_i \right] \equiv H_K + H_0. \quad (2.47)$$

Escrevendo a função de partição como

$$Z = \prod_i Z_0^{(i)} \left\langle \hat{T}_\beta e^{-\int_0^\beta H_K^{(i)}(\tau) d\tau} \right\rangle_0, \quad (2.48)$$

onde $H_K(\tau) = e^{H_0\tau} H_K e^{-H_0\tau}$ e \hat{T}_β é o operador de ordenamento temporal, e então fazendo uma expansão em $|\psi|^2$, segue que

$$Z(\psi^*, \psi) = \prod_i Z_0^{(i)} \left[1 - 2dt |\psi|^2 \beta + 4t^2 d^2 |\psi|^2 \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \left\langle a_i^\dagger(\tau_1) a_i(\tau_2) + a_i(\tau_1) a_i^\dagger(\tau_2) \right\rangle_0 + \mathcal{O}(|\psi|^4) \right]. \quad (2.49)$$

No limite $\beta \rightarrow \infty$, a energia livre fica

$$F = \sum_i \left[-\frac{1}{\beta} \ln Z_0^{(i)} - 4t^2 d^2 |\psi|^2 \left(\frac{n_i + 1}{h_{n_i+1}^{(i)} - h_{n_i}^{(i)}} + \frac{n_i}{h_{n_i-1}^{(i)} - h_{n_i}^{(i)}} - \frac{1}{2td} \right) + \mathcal{O}(|\psi|^4) \right], \quad (2.50)$$

onde $h_{n_i}^{(i)}$ é o menor autovalor de energia, no limite local ($t = 0$), do hamiltoniano do sítio i , com n_i partículas.

Em campo médio, a transição de fase ocorre quando o termo linear em $|\psi|^2$ se anula. Na fase isolante de Mott, o número de partículas n por sítio é fixo e homogêneo. Deste modo, o termo linear em $|\psi|^2$ é nulo quando

$$\frac{U}{2td} = \frac{1}{L} \sum_i \left(\frac{n+1}{n - \mu/U + \varepsilon_i/U} + \frac{n}{1 - n + \mu/U - \varepsilon_i/U} \right). \quad (2.51)$$

No caso do modelo de Aubry-André, como o potencial é quase-periódico, ele acaba por assumir eventualmente todos os valores x entre $-\Delta$ e $+\Delta$, com densidade de probabilidade $\Delta \cos(x)$. Então, podemos substituir as somas por integrais:

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \sum_i \frac{n+1}{n - \mu/U + \varepsilon_i/U} &\longrightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(n+1) dx}{(n - \mu/U) + \Delta \cos(x)/U}, \\ \frac{1}{L} \sum_i \frac{n}{1 - n + \mu/U - \varepsilon_i/U} &\longrightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{n dx}{(1 - n + \mu/U) - \Delta \cos(x)/U}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Deste modo, no modelo de Aubry-André em MFT, a equação para o n -ésimo lóbulo de Mott é

$$\frac{U}{2td} = \frac{n+1}{\sqrt{(n-\mu/U)^2 - (\Delta/U)^2}} + \frac{n}{\sqrt{(1-n+\mu/U)^2 - (\Delta/U)^2}}. \quad (2.53)$$

Já no caso do modelo de Anderson, se a distribuição de probabilidade para a energia em cada sítio é uniforme no intervalo $-\Delta \leq \varepsilon \leq \Delta$, temos

$$\frac{U}{2td} = \frac{n+1}{\Delta/U} \ln \left(\frac{n-\mu/U+\Delta/U}{n-\mu/U-\Delta/U} \right) + \frac{n}{\Delta/U} \ln \left(\frac{1-n+\mu/U+\Delta/U}{1-n+\mu/U-\Delta/U} \right). \quad (2.54)$$

Note que a aproximação de campo médio não captura a fase vidro de Bose, já que corresponde ao limite de infinitas dimensões, onde esta fase não existe se $t > 0$. Logo, a MFT não nos revela a verdadeira topologia do diagrama de fases completo. Porém, um argumento simples permite-nos concluir que a fase BG cerca todos os lóbulos de Mott na presença de desordem, com a possível exceção da ponta [29]: Mesmo na fronteira dos lóbulos, existe um gap para as excitações partícula-buraco. Supondo uma transição contínua, a densidade ρ muda continuamente ao sairmos da fase MI. Quando a densidade extra $\delta\rho$ é pequena, as quase-partículas (ou quase-buracos) estão presentes em uma concentração muito baixa e, portanto, não interagem entre si. Mesmo que na ausência de desordem elas sejam superfluidas, se $\Delta > 0$ essas quase-partículas ficam localizadas devido ao potencial efetivo criado pelas partículas do fundo e pela desordem. Este argumento não funciona para a transição com densidade constante, já que o gap para excitações partícula-buraco é nulo na ponta do lóbulo.

Porém, um teorema descrito a seguir assegura que nunca existe transição direta entre o superfluido e o isolante de Mott para desordem aleatória, de modo que o lóbulo de Mott sempre está completamente cercado pelo vidro de Bose [64]. Este resultado não é válido para um potencial incomensurável, para o qual uma transição direta MI-SF pode ocorrer na ponta do lóbulo. Como veremos, existe forte evidência numérica de que tal transição realmente ocorre no modelo de Aubry-André [44].

Em seu trabalho original, L. Pollet *et al.* introduziram o chamado *Teorema das Inclusões* [64], mostrando que uma transição SF-MI é impossível na presença de desordem aleatória. A prova se apoia no fato de que, em um potencial aleatório limitado, sempre é possível encontrar regiões arbitrariamente grandes, ao longo da linha de transição superfluido-isolante, similares à uma outra configuração qualquer dada. Deste modo, sempre podemos encontrar em uma vizinhança da linha de transição configurações correspon-

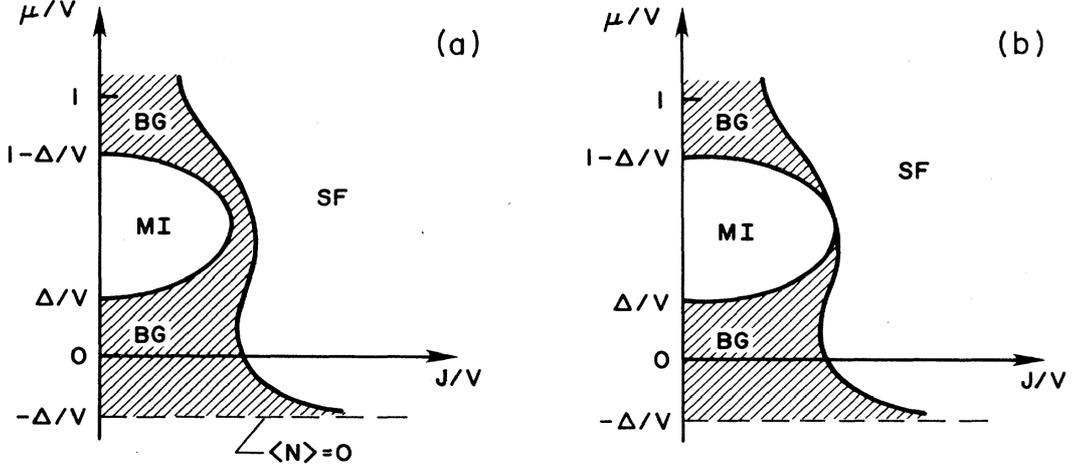


Figura 2.2: (a) Lóbulo de Mott $n = 1$ no modelo de Anderson, no qual não ocorre a transição direta MI-SF. (b) Lóbulo $n = 1$ no modelo de Aubry-André, para o qual a evidência numérica sugere que a transição MI-SF ocorre no caso de preenchimento inteiro. Em nossa notação, V corresponde a U , e J a t . (Ilustração qualitativa, retirada da Ref. [29].)

dentes a uma região superfluida. Logo, próximo à transição, existem regiões superfluidas raras, porém arbitrariamente grandes, e a transição superfluido-isolante deve ser para a fase vidro de Bose. Então, no modelo de Anderson a transição SF-MI só ocorre com $\Delta = 0$.

O Teorema das Inclusões não se aplica ao modelo de Aubry-André, já que neste caso o potencial é determinístico. Permanece, então, a dúvida sobre a possibilidade da ocorrência de uma transição direta SF-MI na presença de um potencial incomensurável. Uma análise numérica recente deste modelo [44] com ocupação unitária sugere que tal transição realmente ocorre em um potencial incomensurável, ao contrário do que acontece no caso de desordem aleatória. O diagrama de fases t vs. μ na presença de desordem fraca ($\Delta < U/2$) aparece na Fig. 2.2 [29].

2.3.2 Transição isolante de Mott – vidro de Bose

A transição MI-BG (*Mott insulator to Bose glass*) é uma transição contínua. Um estudo dessa transição pode ser encontrado na Ref. [65], onde os autores mostram que as transições correspondentes a preenchimentos inteiros e a fracionários estão em classes de universalidades diferentes (como também ocorre no sistema “limpo”). De forma geral, não

são conhecidos os expoentes críticos para a transição com densidade constante.

Nas transições MI-SF e BG-SF, o comprimento de correlação relevante é o comprimento de coerência de fase (da função de onda), que diverge na fase superfluida. Porém, as correlações de fase decaem de forma exponencial tanto no estado MI quanto no BG. Na transição MI-BG, o comprimento de correlação relevante é a distância entre as regiões raras, que diverge na fase isolante de Mott [65].

No limite local de sítios desacoplados, a distribuição das partículas $\{n_i\}$ minimiza a energia total

$$E = \sum_i \left[\varepsilon_i n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \right], \quad (2.55)$$

sujeita ao vínculo $\sum_i n_i = N$.

Note que, no limite termodinâmico, as energias locais estão na região $-\Delta \leq \varepsilon_i \leq \Delta$. Então, a fase isolante de Mott (na qual $n_i = 1$) minimiza a energia se $\Delta < U/2$. Nesse caso, o gap de excitação de uma partícula é da forma

$$\Delta E_{MI} = U - 2\Delta. \quad (2.56)$$

Para $\Delta > U/2$, o estado fundamental é do tipo vidro de Bose. No ponto $\Delta = U/2$, o gap de energia se anula. Logo, para valores pequenos da amplitude de tunelamento t , a transição MI-BG ocorre próximo à esta linha.

Um estudo mais detalhado do diagrama de fases próximo ao limite local ($t \rightarrow 0$) é feito na seção 4.3.

2.3.3 Transição superfluido – vidro de Bose

Para sistemas não interagentes, esta transição é conhecida como localização de Anderson. Como vimos anteriormente, para desordem aleatória em $d = 1$ não ocorre transição, já que qualquer amplitude finita de desordem resulta em localização.

Em seu trabalho original, Serge Aubry e Gilles André [14] mostraram que, no que veio a ser denominado modelo Aubry-André, a localização de Anderson só ocorre quando a amplitude do potencial é maior que o valor crítico $\Delta_c = 2$, a partir de uma dualidade entre as representações do hamiltoniano no espaço de posição e de momentum. Abaixo, reproduzimos esse argumento.

É conveniente redefinir β como a razão entre dois números de Fibonacci consecutivos [66], $\beta_n \equiv F_{n+1}/F_n$, cujo limite ao $F_n \rightarrow \infty$ é a razão áurea. Note que, em redes finitas,

a utilização de condições de contorno periódicas só é possível se considerarmos apenas redes cujo tamanho L é igual a um número de Fibonacci F_n . Os primeiros números dessa sequência (com $L \geq 8$) são 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233 etc. 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, $t = 1$. Usando o potencial de Aubry-André (1.3), temos

$$H = \sum_{j=1}^L \left[-(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j) + \Delta \cos(2\pi\beta j) a_j^\dagger a_j \right]. \quad (2.57)$$

Transformamos o hamiltoniano para o espaço de momentum, usando

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_q e^{-i(2\pi\beta qj)} a_q, \quad (2.58)$$

onde

$$a_q = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{i(2\pi\beta qj)} a_j \quad (2.59)$$

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

$$H = -\frac{\Delta}{2} \sum_q \left[\frac{4}{\Delta} \cos(2\pi\beta q) a_q^\dagger a_q - (a_q^\dagger a_{q+1} + a_{q+1}^\dagger a_q) \right]. \quad (2.60)$$

A diferença entre as duas formas de H , (2.57) e (2.60), além do fator global 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.

De modo geral, na presença de interações e incluindo o potencial químico, no limite local $t = 0$ e para desordem limitada no intervalo $-\Delta \leq \varepsilon_i \leq \Delta$, o estado fundamental do hamiltoniano de Bose-Hubbard é isolante de Mott quando

$$n - 1 + \frac{\Delta}{U} < \frac{\mu}{U} < n - \frac{\Delta}{U}, \quad (2.61)$$

para algum n inteiro. Caso contrário, o estado fundamental é um vidro de Bose. Entre os lóbulos de Mott a densidade varia continuamente, e então temos $\kappa = \partial\rho/\partial\mu > 0$, ou seja, a compressibilidade é não nula também na fase vidro de Bose.

Como, próximo a uma transição de fase contínua, a compressibilidade se comporta de acordo com a relação (2.45)

$$\kappa \sim |g|^{\nu(d-z)} \quad (2.62)$$

e é não nula tanto na fase SF quanto na BG, ela não diverge nem se anula na transição [29], de modo que devemos ter $z = d$ para esta transição na presença de interações repulsivas.

2.3.4 Diagrama de fases com densidade unitária

S. Rapsch *et al.* [43] investigaram numericamente o diagrama de fases do modelo de Anderson com o grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG). Na Fig. 2.3(a), mostramos o diagrama de fases obtido neste estudo. Podemos ver claramente que a partir de certos valores máximos de repulsão U_{max} ou desordem Δ_{max} não existe superfluidez.

É interessante notar que o aumento da amplitude da desordem restaura a superfluidez quando o sistema está na fase isolante de Mott, e o mesmo acontecendo com o aumento da intensidade da repulsão no vidro de Bose (desde que a repulsão não seja maior que U_{max} e que a desordem não seja maior que Δ_{max}).

Também utilizando o grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG), G. Roux *et al.* [44] investigaram numericamente o diagrama de fases do modelo de Aubry-André.

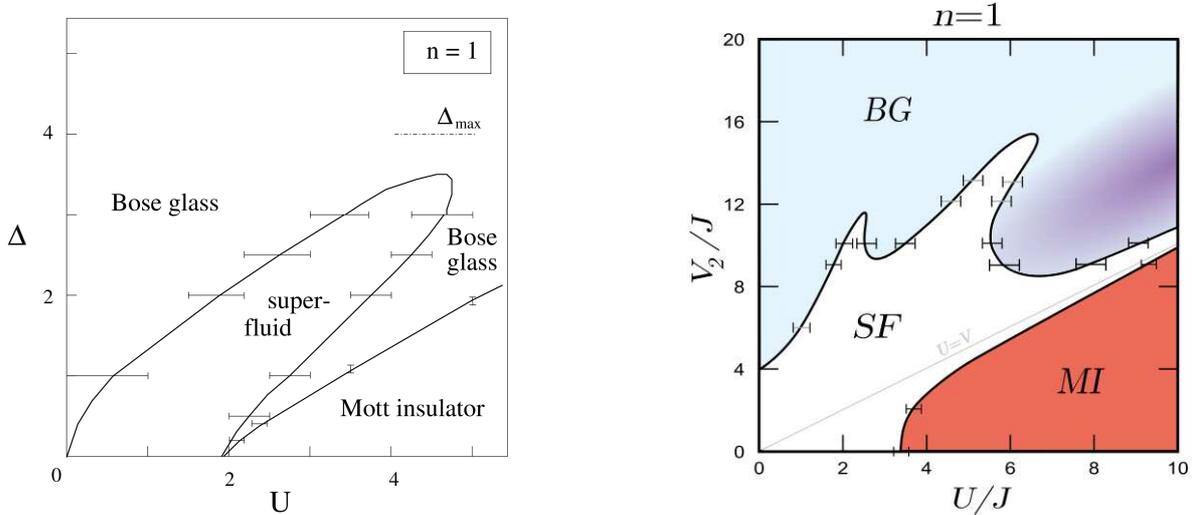


Figura 2.3: (a) Diagrama de fases do modelo de Anderson, com preenchimento unitário, obtido a partir de resultados numéricos do DMRG [43]. A amplitude de tunelamento foi tomada como a unidade de energia, porém existe um fator multiplicativo 2 entre a escala de energia usada por S. Rapsch *et al.* e aquela utilizada no presente trabalho. (b) Diagrama de fases do modelo de Aubry-André, com preenchimento unitário, inferido a partir de resultados numéricos do DMRG [44]. Aqui, V_2 corresponde a 2Δ , e J a t .

O diagrama de fases inferido neste estudo aparece na Fig. 2.3(b). Novamente nota-se que o aumento da amplitude do potencial incomensurável na fase isolante de Mott ou a intensidade das interações no vidro de Bose restaura a superfluidez.

A evidência numérica sugere que no modelo de Aubry-André o vidro de Bose não existe se $\Delta < U/2$, e que nesse regime a transição superfluido-isolante sempre é para a fase de Mott. Já na presença de desordem de Anderson, a transição superfluido-isolante sempre ocorre para a fase vidro de Bose.

Conforme foi discutido na introdução, estudar a competição entre os efeitos de desordem e de interação para bósons em uma dimensão é um dos objetivos principais desta Tese. Ao longo do capítulo 4, principalmente na seção 4.1, mostramos os resultados que obtivemos em nosso estudo do diagrama de fases U vs. Δ para o modelo de Aubry-André, e realizamos uma comparação entre nossos resultados e aqueles obtidos por G. Roux *et al.* [44], Fig. 2.3(b).

2.4 Aspectos topológicos de generalizações do modelo de Aubry-André

Como mencionado na introdução desta Tese, extensões do modelo de Aubry-André com uma modulação dos termos fora da diagonal (termos de tunelamento) leva a existência de estados topológicos, já observados experimentalmente [51]. Eliminando a modulação local do modelo AA original e substituindo-a por um termo de modulação **periódica** do *hopping*, dois cenários distintos foram descritos na literatura. Se o período da modulação do hopping é incomensurável com a rede, obtém-se um espectro equivalente ao de um isolante topológico, com estados de borda (*edge states*) conectando as bandas de energia através do *gap*, como mostra o lado esquerdo da Fig. 2.4 [51]. Por outro lado, se essa modulação não diagonal é comensurável com a rede (por exemplo, o dobro do período) o espectro, mostrado no lado direito da Fig. 2.4, lembra o de um supercondutor topológico [67]. Neste último caso, os *edge states* têm energia fixa em zero, podendo ser descritos por férmions de Majorana. Revisões sobre isolantes topológicos e férmions de Majorana em supercondutores topológicos podem ser encontradas, respectivamente, nas referências [48] e [68].

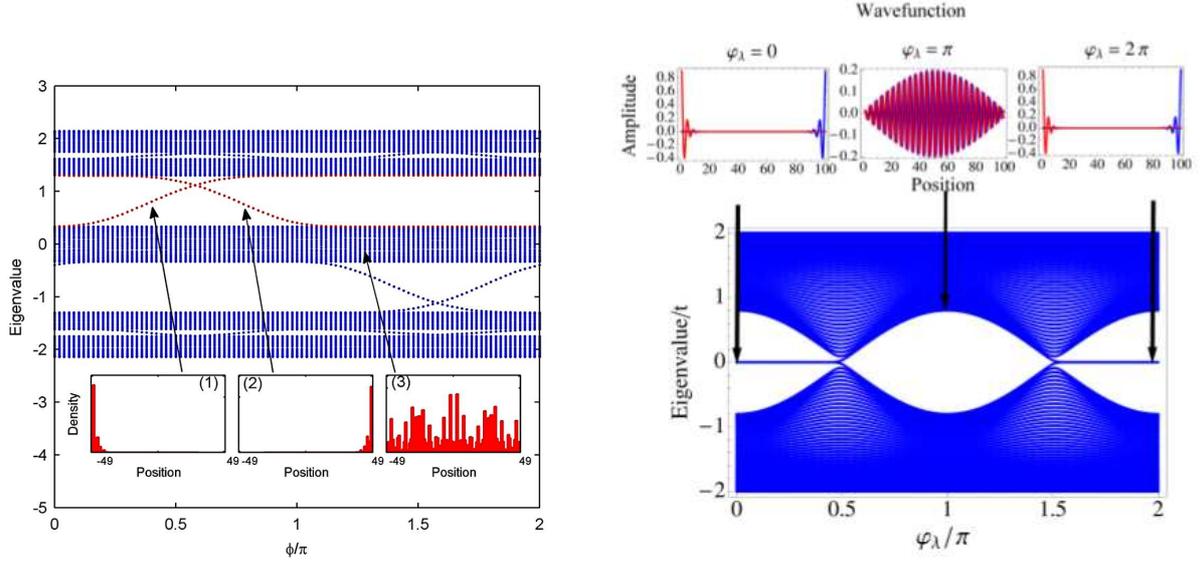


Figura 2.4: Estados topológicos no modelo de Aubry-André generalizado (5.1). (a) Modelo com modulação incomensurável δ da amplitude de hopping apenas ($\phi = \varphi_\delta$); equivalente a um isolante topológico. (Retirado da Ref. [51].) (b) Modelo com modulação comensurável λ da amplitude de hopping apenas; equivalente a um supercondutor topológico. (Retirado da Ref. [67].)

Estados de borda no efeito Hall quântico

A existência de estados de borda foi inicialmente observada no efeito Hall quântico (QHE). Esse efeito ocorre quando elétrons são confinados em um sistema bidimensional e um forte campo magnético perpendicular é aplicado. As energias da banda de condução deixam de ter uma distribuição contínua, passando a constituir uma sequência de estados quantizados, conhecidos como níveis de Landau [69], separados por *gaps* de valor $\hbar\omega_c$, onde $\omega_c = eB/m$ é a frequência de ciclotron.

Estritamente, níveis de Landau discretos só ocorreriam para elétrons livres. Na presença de um potencial periódico devido à estrutura cristalina, os níveis de Landau se alargam, formando uma estrutura de bandas de energia. Suponha que ν níveis de Landau estejam preenchidos, de modo que o nível de Fermi do sistema se encontre entre bandas. Neste caso, existe um *gap* de energia para as excitações, assim como ocorreria em um isolante normal (topologicamente trivial). O que diferencia o estado Hall é o fato de que um campo elétrico aplicado leva à corrente Hall, que é caracterizada por uma condutividade quantizada:

$$\sigma_H = \nu \frac{e^2}{h}. \quad (2.63)$$

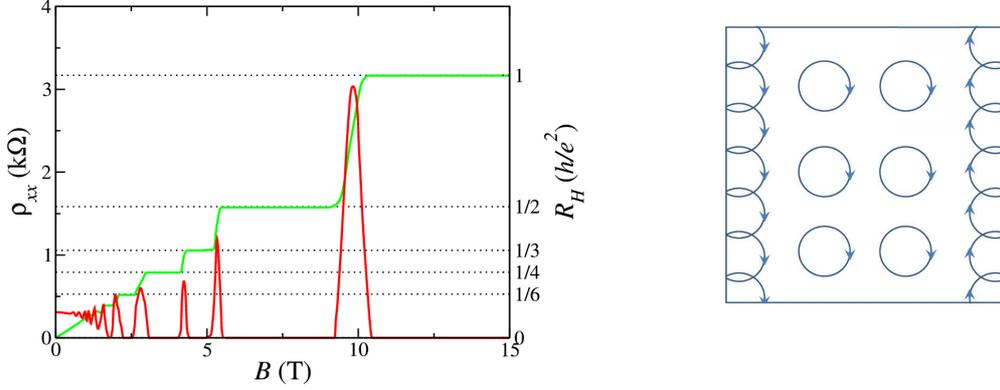


Figura 2.5: (a) Resistividade ρ_{xx} (curva vermelha) e resistência Hall R_H (curva verde) como função do campo magnético aplicado. (b) Visualização pictórica dos elétrons se movendo ao longo das bordas.

A quantização da condutividade Hall é tão precisa (com medidas que desviam de múltiplos inteiros em menos de 1 parte por bilhão), que a constante de von Klitzing $R_k = h/e^2 = 25812.807 \Omega$ é utilizada na definição da unidade de resistência elétrica [70]. Na Fig. 2.5(a) podemos ver a quantização da resistência Hall R_H , e a resistividade ρ_{xx} em função do campo magnético aplicado (o campo elétrico é aplicado na direção \hat{x}). Picos na resistividade ρ_{xx} indicam a passagem por um nível de Landau.

Os estados de borda condutores no efeito Hall podem ser visualizados como elétrons realizando o movimento de ciclotron e sendo “refletidos” nas bordas. Esse efeito está ilustrado na figura 2.5(b). Esses estados são ditos *quirais*, pois se propagam em apenas uma direção ao longo de cada uma das bordas. Como não existem estados disponíveis para espalhamento, esses estados de borda são robustos frente à desordem, o que explica a quantização da resistividade Hall. É importante ressaltar que a existência de estados quirais nas bordas e a quantização da resistividade R_H manifestam a natureza topológica do estado Hall quântico, pois não dependem de detalhes do sistema. A inclusão de desordem e distorções não altera essas quantidades.

É possível classificar topologicamente todos os sistemas isolantes a partir de classes de equivalência entre Hamiltonianos, considerando variações contínuas de seus parâmetros: se dois isolantes podem ser transformados um no outro a partir de uma transformação contínua do Hamiltoniano, sem que o *gap* de energia se feche, então eles são ditos *topologicamente equivalentes* [46]. Isolantes atômicos, semicondutores e o vácuo pertencem todos

à mesma classe topológica (a classe dos isolantes triviais).

Uma consequência direta dessa classificação é que, na fronteira entre materiais de classes topológicas distintas aparece um estado condutor. Isso ocorre pois, ao passarmos de um material com uma ordem topológica para outro com uma ordem diferente, o *gap* deve se fechar.

Efeito Hall quântico fracionário

Nos experimentos com efeito Hall quântico, o fator de preenchimento ν também pode assumir valores racionais (como por exemplo, $\nu = 1/3, 2/5, 3/7, 2/3, 3/5, 1/5, 2/9, 3/13, 5/2$ etc). O estado Hall fracionário é muito mais complexo, e se deve fundamentalmente à natureza fortemente correlacionada do sistema. Esse efeito exhibe propriedades extremamente interessantes, como quase-partículas de carga e estatísticas fracionárias. Possivelmente, *anyons* não abelianos³ foram observados em sistemas Hall com $\nu = 5/2$ [71, 72].

As origens microscópicas destes fenômenos ainda não são totalmente compreendidas, e atualmente este tópico é foco de muitas pesquisas na física da matéria condensada. O sistema Hall quântico pode vir a ter uma variedade de aplicações tecnológicas, por exemplo na área da computação quântica [73] devido à insensibilidade das excitações a perturbações locais.

No caso do QHE, os estados de borda são condutores devido à geometria bidimensional do sistema. Em contraste, os estados de borda que aparecem no modelo de Aubry-André unidimensional são localizados, apesar desses estados possuírem *gap* de excitações nulo. A Fig. 2.4 mostra o espectro do modelo em função da fase, e também os estados topológicos. O modelo de Aubry-André pode ser mapeado no de Harper bidimensional, e então a fase se revela como a componente transversal do vetor de onda, como detalhado a seguir.

³Diferentemente do caso tridimensional, no qual toda a partícula deve obedecer ou à estatística de Fermi-Dirac ou à estatística de Bose-Einstein, em sistemas bidimensionais existem estatísticas intermediárias, na qual a troca de quasipartículas idênticas adiciona uma fase complexa à função de onda. Partículas que seguem esse tipo de estatística são chamadas de *anyons*, já que a troca destas pode introduzir qualquer fase (*any phase*) na função de onda.

Quando há degenerescência no sistema, múltiplos estados podem ter as mesmas configurações de partículas. Nesse caso, uma troca de partículas pode levar o sistema a um estado diferente, podendo ser vista como uma transformação linear no subespaço degenerado. Essas transformações podem não comutar, nesse caso, a partícula é dita um *anyon* não abeliano.

2.4.1 Mapeamento do modelo de Aubry-André no de Harper 2D

Partículas em uma rede bidimensional quadrada, na aproximação “*tight-binding*”, possuem as energias

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2t_x \cos(k_x a) - 2t_y \cos(k_y a), \quad (2.64)$$

onde a é a separação entre os sítios da rede.

Na presença de um campo magnético externo, podemos fazer a substituição canônica $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$. Como o campo magnético é perpendicular, usamos o calibre de Landau $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$. É possível, nesse caso, descrever o problema a partir do Hamiltoniano efetivo

$$H_{eff} = H_0 - 2t_x \cos\left(-ia \frac{\partial}{\partial x}\right) - 2t_y \cos\left(-ia \frac{\partial}{\partial y} + \frac{eHa}{\hbar c} x\right). \quad (2.65)$$

Podemos supor soluções da forma $\Psi(x, y) = e^{ik_y y} \psi(x) = e^{ik_y y} \psi_n$. As funções de onda satisfazem, então, a seguinte equação:

$$-t_x(\psi_{n-1} + \psi_{n+1}) - 2t_y \cos(2\pi n\varphi - k_y) \psi_n = E(k_y) \psi_n, \quad (2.66)$$

onde φ é proporcional ao fluxo magnético.

Se associarmos $(t_x \rightarrow t)$, $(-2t_y \rightarrow \Delta)$, $(\varphi \rightarrow \beta)$ e $(-k_y \rightarrow \phi)$, teremos uma equação de autovalores que provém do modelo de Aubry-André unidimensional com uma fase adicional:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \Delta \sum_i \cos(2\pi i\beta + \phi) a_i^\dagger a_i. \quad (2.67)$$

Isso estabelece a conexão entre os modelos, e explica as propriedades topológicas do modelo de Aubry-André.

Capítulo 3

Localização em $d = 1$ no Limite não Interagente

Neste capítulo, estudamos em detalhe propriedades do estado fundamental do modelo de Bose-Hubbard no limite não interagente, em função da amplitude de desordem. Isso é feito para redes de diferentes tamanhos, com ênfase na detecção da transição de fase quântica entre o estado superfluido e o isolante por localização de Anderson (ou vidro de Bose). Esse estudo é complementado por uma análise de escala dessa transição, sendo determinados os expoentes críticos relevantes. Os resultados deste capítulo foram em parte obtidos durante a realização do mestrado acadêmico [74], e publicados na Ref. [75], tendo continuidade já no doutorado e resultando em outra publicação [76].

3.1 Desordem do tipo Anderson

Nesta seção, mostramos resultados numéricos das propriedades do estado fundamental do modelo de Anderson não interagente como função da amplitude de desordem Δ , para diferentes tamanhos de rede L . Encontramos, então, valores característicos da amplitude de desordem Δ_L , a partir dos quais ocorrem efeitos de localização em redes finitas. Todos os resultados desta seção foram obtidos a partir da diagonalização exata do hamiltoniano de Bose-Hubbard, com um potencial aleatório obtido a partir de uma distribuição de probabilidade uniforme no intervalo $-\Delta/2 \leq \varepsilon_i \leq \Delta/2$, tomando a amplitude de tunelamento t como unidade de energia. As médias configuracionais sobre a desordem foram feitas tipicamente com amostras de 5000 configurações aleatórias.

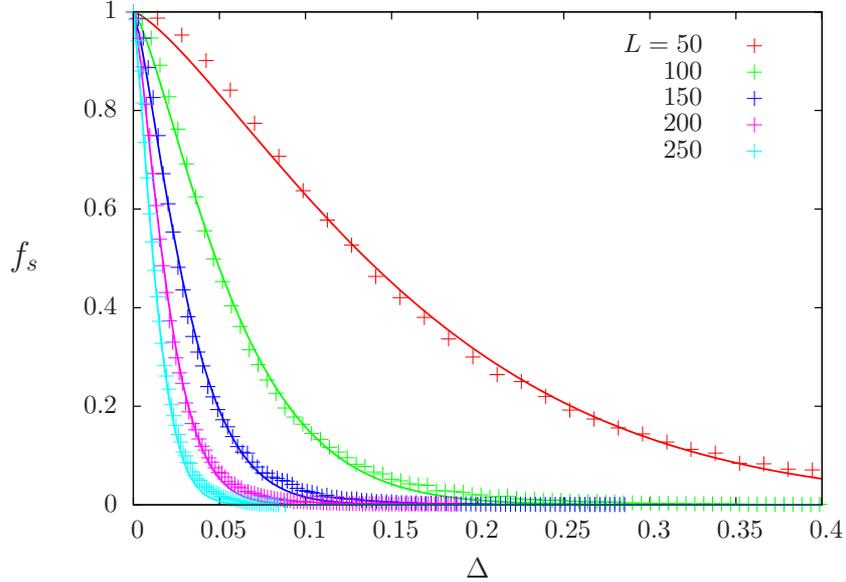


Figura 3.1: Fração de superfluido em função da amplitude da desordem aleatória para diferentes tamanhos de rede. As curvas contínuas são ajustes dos valores numéricos da fração de superfluido (símbolos) com a Eq. (3.1), tomando $\phi = 4/3$.

3.1.1 Fração de superfluido

Com base na discussão realizada na seção 2.1.1, utilizamos a Eq. (2.7) para calcular a fração de superfluido f_s . A figura 3.1 mostra o comportamento dessa quantidade 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, enquanto as linhas correspondem a um ajuste discutido abaixo. Em geral, utilizamos $\theta = 0.1$ nos cálculos numéricos, mas os resultados são independentes do valor de θ até frações significativas de π .

Quando $\Delta = 0$, obtemos $f_s = 1$, ou seja, o sistema é superfluido, para qualquer tamanho de rede. Mas para valores da amplitude de desordem Δ suficientemente grandes temos $f_s \rightarrow 0$, e o estado fundamental torna-se localizado. Podemos ver que a localização ocorre para valores cada vez menores de Δ a 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

$$f_s \simeq e^{(-\frac{\Delta}{\Delta_L})^\phi}. \quad (3.1)$$

Para todos os tamanhos de rede, o parâmetro de ajuste ϕ assume aproximadamente o

mesmo valor $\phi \simeq \frac{4}{3}$. Fixamos, então, $\phi = \frac{4}{3}$ e determinamos um Δ_L para cada tamanho de rede através da função acima. As curvas contínuas na Fig. 3.1 mostram os ajustes dos valores numéricos da fração de superfluido através da Eq. (3.1). Uma discussão mais detalhada desses ajustes e dos valores obtidos para Δ_L é apresentada ao final desta seção, onde é realizada uma análise de escala de tamanho finito.

3.1.2 Fidelidade

Utilizamos a fidelidade para comparar estados fundamentais de hamiltonianos com valores ligeiramente diferentes da amplitude da desordem Δ . Um mínimo da fidelidade em função do parâmetro que induz uma transição de fase quântica tende a indicar o valor crítico desse parâmetro, já que estados pertencentes a fases distintas são distinguíveis.

Nesta análise da localização de Anderson em potencial aleatório sem interações, utilizamos a definição

$$\mathcal{F}(\Delta) = |\langle \psi_0(\Delta - \delta\Delta) | \psi_0(\Delta + \delta\Delta) \rangle|. \quad (3.2)$$

Os autovetores do estado fundamental $|\psi_0\rangle$ são obtidos através da diagonalização exata do hamiltoniano (1.1) sem interação (com $U = 0$), utilizando condições de contorno periódicas. A média sobre configurações aleatórias é realizada em $\mathcal{F}(\Delta)$, o que significa que os estados fundamentais a serem comparados correspondem à mesma configuração do potencial,

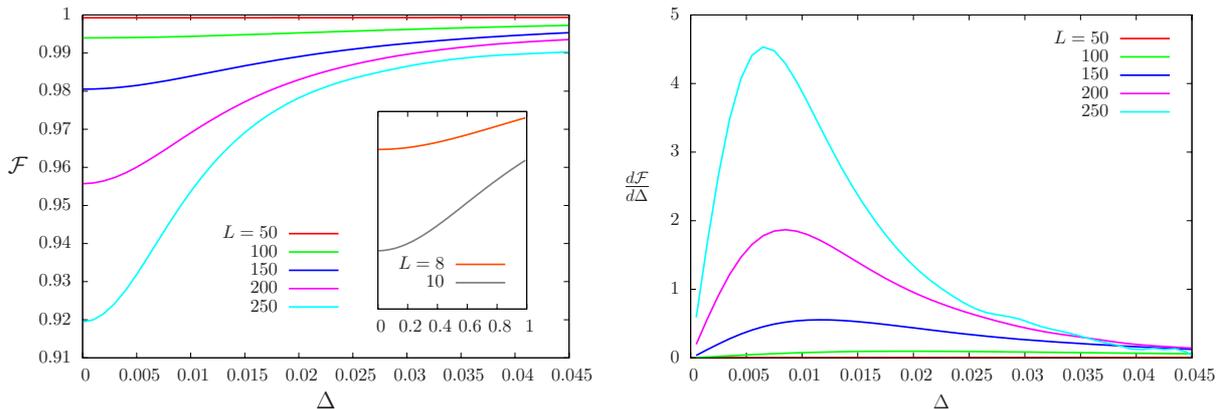


Figura 3.2: (a) Fidelidade em função da amplitude de desordem para diferentes tamanhos de rede. Conforme L cresce, o mínimo fica mais pronunciado. No detalhe, a fidelidade para redes menores. O comportamento qualitativo é o mesmo, com o mínimo em $\Delta = 0$. (b) Derivada da fidelidade em função da amplitude de desordem. O máximo da derivada se aproxima de $\Delta = 0$ a medida que L aumenta. Tomamos este máximo como a definição do Δ_L característico.

exceto pelo fator associado à amplitude da desordem. Utilizamos tipicamente $\delta\Delta \sim 10^{-2}$ nos cálculos numéricos.

A Fig. 3.2(a) 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 de Δ maiores, $\mathcal{F} \rightarrow 1$ 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 que 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 Fig. 3.2(b).

Definimos um valor característico Δ_L , indicativo de localização em redes de tamanho finito pela análise através da fidelidade, como sendo o valor de Δ para o qual a derivada $d\mathcal{F}/d\Delta$ é máxima. Voltaremos a nos referir aos valores de Δ_L assim obtidos ao final desta seção, em conexão com uma análise de escala de tamanho finito.

3.1.3 Entropia de emaranhamento

A entropia de Shannon, como uma medida de emaranhamento quântico, conforme visto na seção 2.1.2, pode ser usada para detectar a localização. Um estado completamente estendido tem emaranhamento máximo, enquanto localização em um único sítio resulta em emaranhamento nulo.

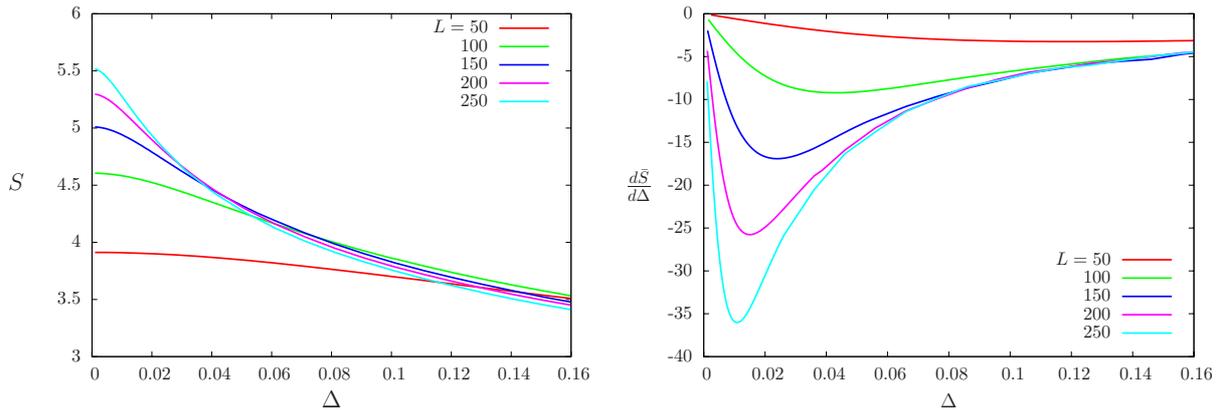


Figura 3.3: Esquerda: entropia de Shannon contra amplitude da desordem de Anderson, para diferentes tamanhos de rede. Direita: derivada da entropia de Shannon em função da amplitude de desordem. Para cada L , a posição do mínimo da derivada define Δ_L .

Para calcular a entropia de Shannon (2.18), o estado fundamental foi determinado via diagonalização exata do hamiltoniano (1.1) com condições de contorno periódicas.

A Fig. 3.3 mostra a entropia de Shannon e sua derivada, em função da amplitude de desordem, para vários tamanhos de rede L . Quando $\Delta = 0$ sempre temos o maior emaranhamento possível (ou seja, $S = \ln L$), e o estado fundamental é estendido. Para valores maiores de Δ , notamos que S diminui devido à localização.

Definimos, neste caso, o valor característico para tamanhos finitos Δ_L como sendo o ponto de inflexão na curva $S(\Delta)$. Este ponto pode ser melhor visualizado como o mínimo de $dS/d\Delta$. Uma análise quantitativa da evolução da amplitude característica de desordem é apresentada a seguir.

3.1.4 Análise de escala de tamanho finito

Embora as definições dos valores característicos Δ_L de amplitude de desordem em redes finitas para a fração de superfluido, para a entropia de Shannon e para a fidelidade sejam

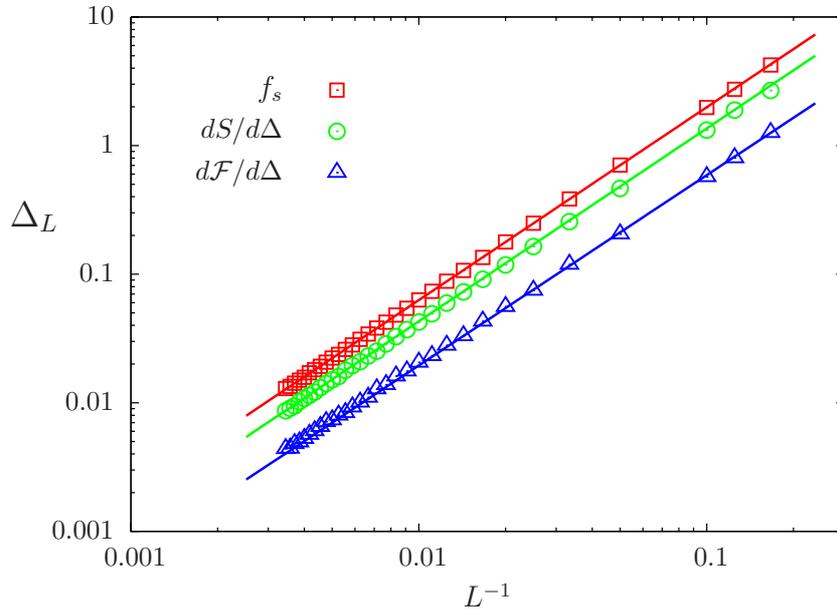


Figura 3.4: Gráfico logarítmico de Δ_L em função de L a partir das três quantidades estudadas. Os símbolos representam os valores obtidos das soluções numéricas e as retas correspondem à Eq. (3.3), com os parâmetros listados na tabela 3.1.

Tabela 3.1: Valores obtidos a partir do ajuste da lei de escala (3.3) pelo método dos mínimos quadrados. Os resultados indicam que o expoente $1/\nu \approx 1.5$ é o mesmo para as três quantidades.

	$1/\nu$	Δ_c	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

diferentes, nossos resultados indicam que todas obedecem à mesma lei de escala:

$$|\Delta_L - \Delta_c| = CL^{-1/\nu}, \quad (3.3)$$

onde C e ν são constantes positivas e Δ_c é o valor crítico da amplitude da desordem no limite termodinâmico.

A Fig. 3.4 apresenta graficamente esse ajuste, com os valores numéricos das três quantidades e as curvas ajustadas (retas na escala logarítmica do gráfico). Na tabela 3.1, apresentamos os valores dos parâmetros da lei de escala (3.3) obtidos a partir do ajuste dos resultados numéricos.

Embora os valores para o pré-fator C sejam diferentes para cada uma das quantidades, encontramos nos três casos essencialmente o mesmo expoente $1/\nu \approx 1.5$, e resultados consistentes com $\Delta_c = 0$.

É interessante observar na Fig. 3.4 que os pontos determinados pela solução numérica coincidem com a reta de ajuste à lei de escala (3.3), com boa precisão, até mesmo para tamanhos de rede tão pequenos quanto $L = 6$.

3.2 Modelo de Aubry-André

Nesta seção, estudamos a localização de Anderson em um condensado de Bose-Einstein unidimensional não interagente no potencial de Aubry-André (1.3). Para diferentes tamanhos de rede, calculamos numericamente a fração de superfluido e a fidelidade no estado fundamental do Hamiltoniano de Aubry-André (2.57), a fim de analisar a dependência destas quantidades com a amplitude do potencial Δ . Tomamos a amplitude de tunelamento t como unidade de energia.

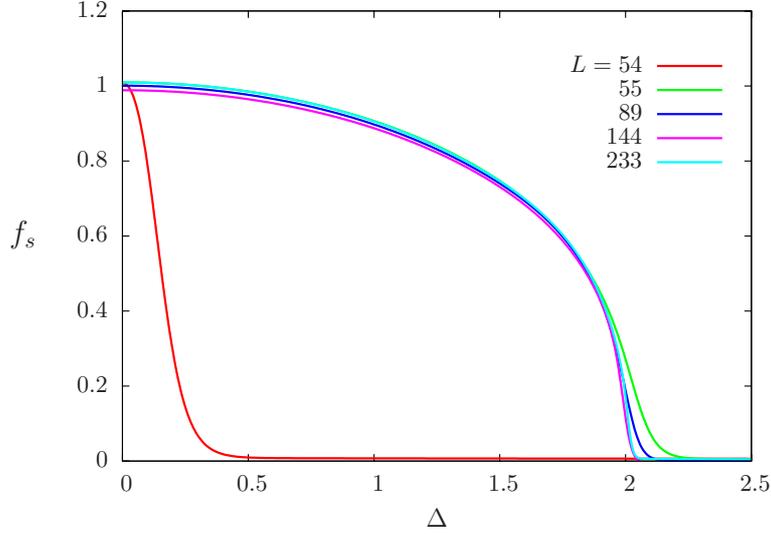


Figura 3.5: Fração de superfluido versus amplitude do potencial de Aubry-André. Existe uma suavização da curva para redes pequenas, porém o valor crítico $\Delta_c = 2$ é bem verificado para L grande e pertencente à série de Fibonacci. O comportamento muda drasticamente para tamanhos de rede que não são números de Fibonacci (por exemplo, $L = 54$).

3.2.1 Fração de superfluido

A Fig. 3.5 mostra a fração de superfluido (2.7), calculada com $\theta = 0.1$, em função da amplitude do potencial incomensurável para alguns tamanhos de rede L .

Quando Δ é pequeno, $f_s \approx 1$, e o sistema é superfluido. A partir de uma certa amplitude de desordem temos $f_s \approx 0$, ou seja, o estado fundamental é localizado. A medida que L aumenta, a curva cai a zero mais abruptamente, em um valor que se aproxima da amplitude crítica $\Delta_c = 2$. Como exemplo, mostramos também o resultado para uma rede com $L = 54$, que não é um número de Fibonacci. Neste caso, a relação de dualidade entre os hamiltonianos (2.57) e (2.60) não é válida. Isso ocorre pois a escolha de um tamanho de rede que não é de Fibonacci introduz frequências adicionais no potencial [66], quando se usa condições de contorno periódicas.

3.2.2 Fidelidade

Para comparar estados fundamentais de hamiltonianos de Aubry-André não interagentes com valores ligeiramente diferentes da amplitude do potencial incomensurável Δ , utilizamos

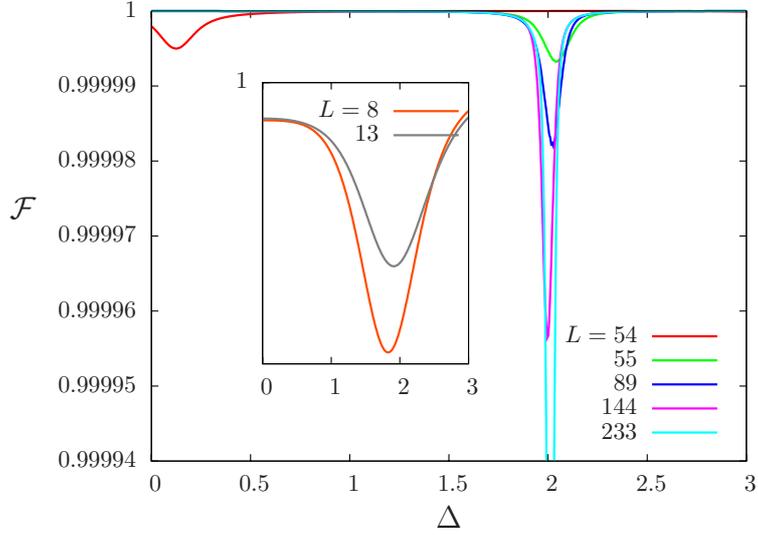


Figura 3.6: Fidelidade em função amplitude do potencial incomensurável, para diferentes tamanhos de rede. O mínimo ocorre próximo do valor crítico $\Delta_c = 2$ se L é um número de Fibonacci, e é mais pronunciado em redes maiores. O gráfico menor mostra mínimos da fidelidade próximos do valor crítico $\Delta_c = 2$ mesmo para redes pequenas. O mínimo da curva de $L = 54$ não se encontra perto deste valor.

a seguinte definição para a fidelidade:

$$\mathcal{F}(\Delta) = |\langle \psi_0(\Delta - \delta\Delta) | \psi_0(\Delta + \delta\Delta) \rangle|. \quad (3.4)$$

Em redes finitas, mínimos da fidelidade que são mais pronunciados quanto maior for o tamanho do sistema costumam indicar a presença de uma transição de fase quântica no limite termodinâmico.

Os autovetores do estado fundamental $|\psi_0\rangle$ foram obtidos através da diagonalização exata do hamiltoniano (2.57) utilizando condições de contorno periódicas. Verificamos que pequenas variações nos valores $\delta\Delta$ não alteram a localização do mínimo, mas apenas a sua amplitude.

A Fig. 3.6 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 ($\beta = 13/8$ e $\beta = 21/13$, respectivamente). Utilizamos condições de contorno periódicas. É interessante notar que, claramente, um mínimo ocorre próximo de $\Delta = 2$, mesmo para L pequeno. Podemos perceber que, quanto maior o tamanho da rede L , mais acentuado é o mínimo, o que indica a presença de uma transição de fase quântica

ao $L \rightarrow \infty$. Novamente, para comparação, mostramos a rede com $L = 54$ sítios. Neste caso, que não é um número de Fibonacci, o mínimo aparece em um valor diferente de Δ .

3.3 Expoentes críticos da transição de localização

Nesta seção, empregamos a função de escala para a fração de superfluido, Eq. (2.37), a fim de determinar o expoente do comprimento de correlação ν e o expoente dinâmico z para a transição de localização nos dois modelos de desordem.

3.3.1 Modelo de Anderson

A transição da localização de Anderson em um potencial aleatório só ocorre em $d \geq 3$, já que para dimensões menores qualquer amplitude do potencial resulta em localização. Mesmo assim, conseguimos associar expoentes críticos à localização de Anderson em um potencial aleatório em $d = 1$, como mostraremos abaixo.

Definindo $g \equiv \Delta - \Delta_c = \Delta$, a lei de escala para Δ_L (3.3) pode ser interpretada como uma versão de tamanho finito da relação de escala geral (2.28) para o comprimento de correlação $\xi \sim |g|^{-\nu}$. Ou seja, $\nu = 2/3$ é o expoente do comprimento de correlação da transição de localização de Anderson em $d = 1$.

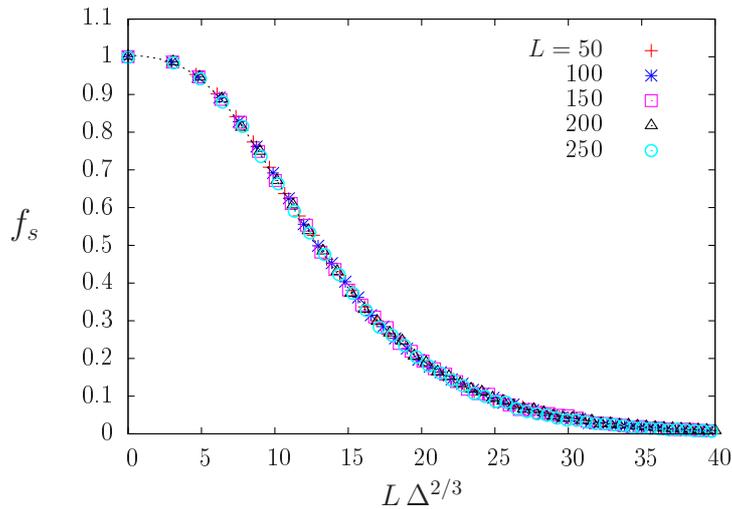


Figura 3.7: Análise de escala da fração de superfluido para a desordem de Anderson. A variável do eixo horizontal é $L|g|^\nu$, o que implica em $\nu = 2/3$. A variável do eixo vertical é $L^{z-2}f_s$, ou seja, $z = 2$.

A partir da relação de escala de tamanho finito para a fração de superfluido, Eq. (2.37), podemos determinar o expoente dinâmico z , notando que $L^{z-2}f_s$ deve ser uma função universal de $L\Delta^\nu$. A figura 3.7 mostra esta função, para diferentes tamanhos de rede L . O fato de que f_s aparece sozinho como função de escala no eixo vertical implica em um expoente dinâmico $z = 2$.

Para bósons interagentes em um potencial aleatório, conforme discutido na seção 2.2.2, a transição de fase vidro de Bose - superfluido é caracterizada pela relação $z = d$. Logo, bósons interagentes e não interagentes estão em classes de universalidade diferentes em relação à transição de localização. Deste modo, concluímos que a interação é relevante nas proximidades do ponto fixo não interagente.

3.3.2 Modelo de Aubry-André

O expoente do comprimento de correlação do modelo de Aubry-André já é conhecido [14], seu valor é $\nu = 1$. Este modelo é um caso particular do modelo de Harper [50] para elétrons em uma rede bidimensional com um campo magnético perpendicular aplicado, para o qual o potencial (1.3) é válido para qualquer valor de β . O modelo de Harper apresenta características diferentes do espectro para valores racionais ou irracionais de β , e efeitos de desordem são consequência da incomensurabilidade entre a rede e o potencial externo.

O expoente dinâmico da transição pode ser previsto a partir de uma análise do espectro de energias do modelo de Harper, que foi extensamente estudado no passado [77–81]. O espectro é multi-fractal em $\Delta = 2$, resultando na famosa borboleta de Hofstadter [82], reproduzida na Fig. 3.8. Destacamos o caso que estamos estudando, para o qual β é uma aproximação racional da razão áurea. Em particular, a figura mostra o resultado da diagonalização exata de um hamiltoniano com $L = 610$ sítios. Os dois painéis destacados, que correspondem à aproximação $\beta = 987/610$, ilustram a natureza fractal do espectro.

Com a aproximação de β pela razão de dois números de Fibonacci consecutivos $\beta_n = F_{n+1}/F_n$, o espectro é equivalente àquele com $\bar{\beta}_n = \beta_n - 1 = F_{n-1}/F_n$, que tem F_n bandas e F_{n-1} gaps. Como discutido em detalhe nas referências [79, 80], quando $F_n = L \rightarrow \infty$, a largura de cada banda do espectro se comporta de acordo com a relação de escala $\Delta E_L \sim L^{-\zeta}$ com valores diferentes de ζ associados à diferentes partes do espectro. Em particular, o valor máximo $\zeta^* = 2.374$ corresponde aos estados da *band-edge*.

Como a largura da banda é uma energia característica do sistema, ela deve ser proporcional à ξ^{-z} , onde ξ é um comprimento de correlação. Ou seja, se o sistema é crítico, devemos ter $\Delta E_L \sim L^{-z}$. Já que, à temperatura zero, o estado relevante para a transição superfluido-isolante é o fundo da banda de menor energia, devemos ter $z = \zeta^* = 2.374$ para o expoente dinâmico.

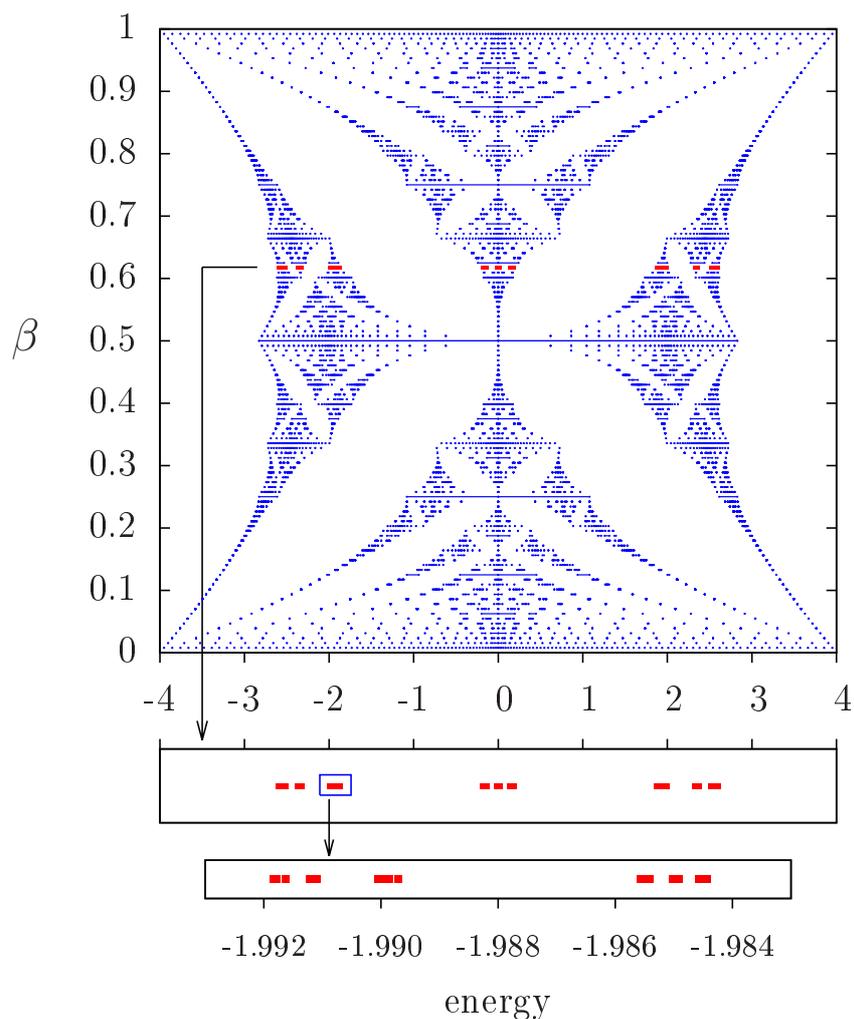


Figura 3.8: Espectro do modelo de Harper para $L = 610$ sítios, destacando o espectro do modelo AA, com a aproximação $\beta = 987/610$. A natureza fractal do espectro é ilustrada no painel inferior, que é uma expansão da caixa pequena do painel do meio.

Para confirmar nossa previsão para o expoente dinâmico, utilizamos novamente a relação de escala de tamanho finito para a fração de superfluido (2.37),

$$f_s \sim L^{2-z} F(L|g|^\nu). \quad (3.5)$$

A Fig. 3.9 mostra a variável de escala adequada, que é proporcional à $g \equiv \Delta - \Delta_c = \Delta - 2$. Os valores da fração de superfluido colapsam em duas curvas universais, uma para L par e outra para L ímpar. Embora as funções de escala sejam diferentes para os dois casos, os expoentes são os mesmos. A figura confirma a previsão $z = 2.374$.

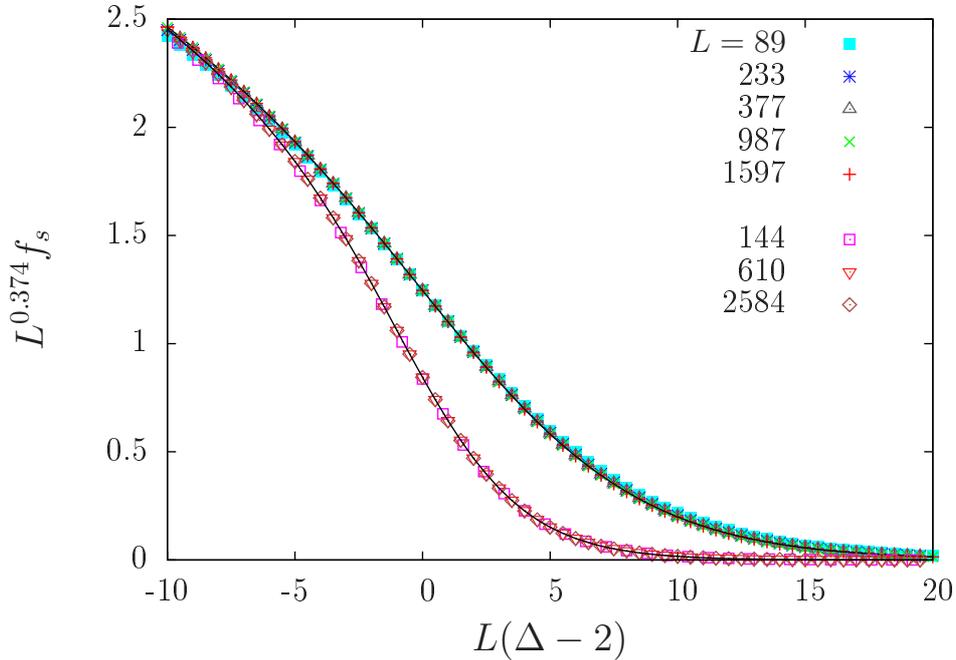


Figura 3.9: Análise de escala para a fração de superfluido no modelo de Aubry-André. As funções universais de escala são diferentes para redes com número par e ímpar de sítios. A variável do eixo horizontal é $L|g|^\nu$, com $\nu = 1$, e a do eixo vertical é $L^{z-2} f_s$, confirmando $z = 2.374$.

Capítulo 4

Modelo de Aubry-André com Interação

Neste capítulo, mostramos os resultados numéricos que obtivemos com o modelo de Aubry-André na presença de interações, na situação de densidade uniforme (uma partícula por sítio), quando existe a fase isolante de Mott. Também realizamos uma análise de escala em dois limites extremos: $U/t \ll 1$ e $U/t \gg 1$, para as transições de fase superfluido-vidro de Bose (SF-BG) e isolante de Mott-vidro de Bose (MI-BG), respectivamente. A análise de escala para interação fraca fez parte da nossa publicação identificada na Ref. [76]. O restante do conteúdo deste capítulo deverá gerar um novo artigo, atualmente em preparação.

4.1 Diagrama de fases do modelo de Aubry-André

Embora a restrição ao limite não interagente tenha permitido o uso de redes de grande tamanho e, assim, a realização de uma cuidadosa análise de escala de tamanhos finitos, um dos aspectos mais interessantes dos sistemas que estamos estudando é a inter-relação entre a desordem e os efeitos de interação entre as partículas.

A inclusão de interação torna os aspectos numéricos muito mais complexos, com impacto mais significativo no tamanho de rede que é viável utilizar. Para o modelo de Anderson, no qual a obtenção de quantidades físicas requer o cálculo de uma média sobre um grande número de configurações da desordem, o tempo necessário para os cálculos numéricos em redes com $N = L \approx 8$ são muito grandes, e uma análise numérica abrangente não seria factível neste trabalho.

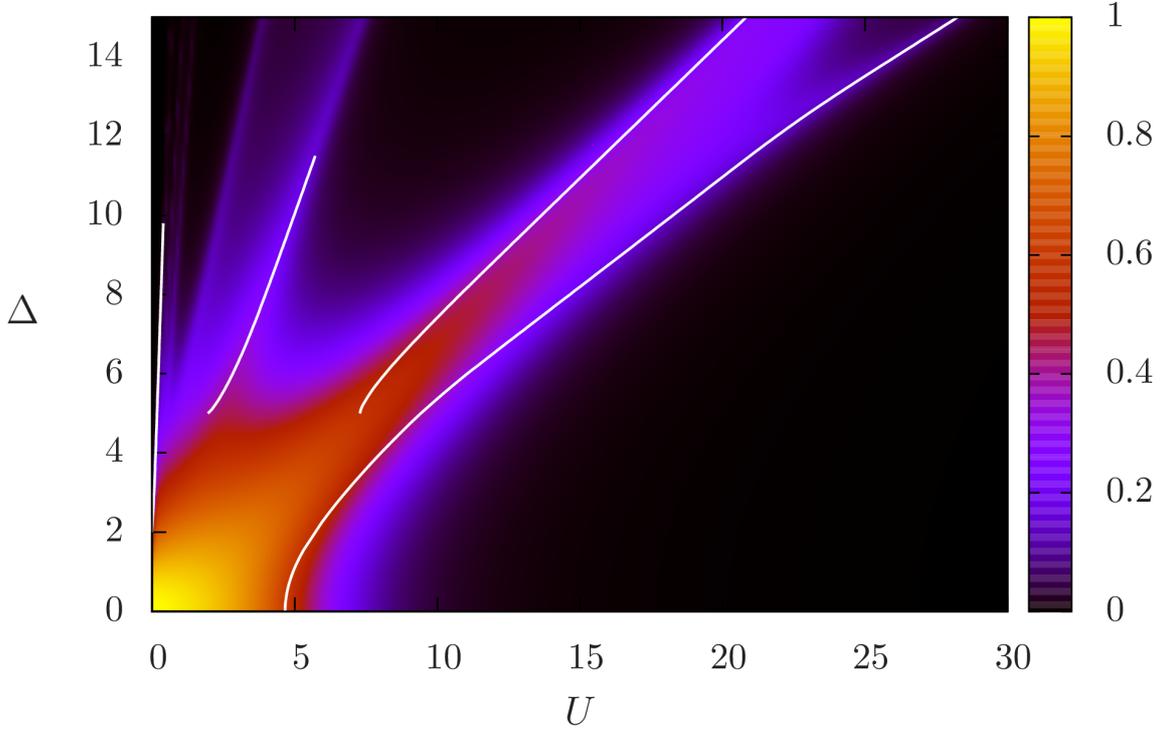


Figura 4.1: Fração de superfluido (escala de cores) e mínimos da fidelidade \mathcal{F}_U (linhas brancas), como função da amplitude do potencial Δ e da intensidade das interações repulsivas U , para o modelo de Aubry-André. A amplitude de hopping t foi tomada como unidade de energia.

No caso do Modelo de Aubry-André, calculamos a fração de superfluido (2.7) e a fidelidade \mathcal{F}_U em um sistema interagente, para diversos valores da amplitude de desordem Δ e da interação U , com $L = N = 8$ (oito sítios e oito partículas), que é o maior número de Fibonacci para o qual conseguimos implementar a diagonalização exata. Usamos a aproximação racional $\beta = 13/8$ para a razão áurea, o que possibilita utilizar condições de contorno periódicas.

Nossa análise numérica permite construir o diagrama de fases mostrado na Fig. 4.1, que apresenta a fração de superfluido (escala de cores) e linhas de mínimos da fidelidade. Como pode ser visto na escala de cores à direita do gráfico, as regiões pretas correspondem a $f_s = 0$ (isolante) e a amarela a $f_s = 1$ (superfluido). As linhas brancas mostram os mínimos locais da fidelidade \mathcal{F}_U .

Como visto na seção 2.1, mínimos da fidelidade costumam indicar a presença de uma transição de fase quântica no limite termodinâmico. Além disso, vimos que a fidelidade no modelo de Aubry-André é um bom indicativo de transições de fase, mesmo em redes pequenas.

É interessante comparar este resultado com o obtido da análise utilizando o método DMRG [43], Fig. 2.3 (lado direito). A existência de regiões da fase de superfluido (SF) que se estendem ao longo de certas direções dentro da região da região dominada pela fase de vidro de Bose (BG) é comum aos dois resultados. A estrutura revelada em nosso diagrama de fases é mais rica, o que pode ser entendido se observarmos o número reduzido de pontos efetivamente calculados do diagrama de fases de DMRG. Por outro lado, a Fig. 2.3 indica um valor crítico da interação U para a transição superfluido–isolante de Mott (SF-MI) em $\Delta = 0$ compatível com o valor $U_c/t \simeq 3.3$, reportado na Ref. [44]. Em nossos cálculos, notamos a presença de um mínimo da fidelidade um pouco acima desse ponto, em $U/t = 4.67$, como pode ser visto na Fig. 4.1. A diferença pode ser devida ao pequeno tamanho de rede, já que o mínimo da fidelidade, embora pronunciado, desloca-se quando o tamanho do sistema varia, como pode ser visto no capítulo 2. Um aspecto interessante é que a linha de mínimos da fidelidade que termina nesse ponto crítico de $\Delta = 0$ é a única linha desse tipo na região $\Delta \lesssim U$. Isto também está de acordo com a Fig. 2.3 no sentido de que a transição SF-MI no modelo de Aubry-André é direta, não existindo vidro de Bose para desordem fraca. Isso é diferente do que se observa para a desordem de Anderson, conforme o painel esquerdo da Fig. 2.3.

4.2 *Scaling* no limite de interação fraca

Nesta seção, analisamos como a adição de interação afeta a transição SF-BG, no limite $U/t \gg 1$.

Conforme discutido anteriormente, a interação pode ser tratada como um termo relevante próximo ao ponto crítico quântico (PCQ). O conhecimento dos expoentes críticos nos permite generalizar as relações de escala próximos ao PCQ para valores pequenos de U . Como a amplitude da interação é uma energia, temos $U \sim \xi^{-z}$. Então, a parte singular da energia livre obedece à relação

$$F_s \sim |g|^{\nu(d+z)} G\left(\frac{U}{|g|^{\nu z}}\right), \quad (4.1)$$

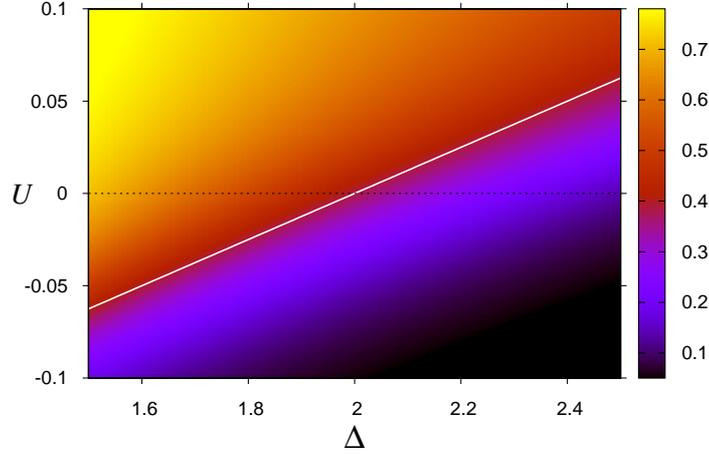


Figura 4.2: Diagrama de fases em $T = 0$ para o modelo de Aubry-André na presença de amplitude de interação pequena. A escala de cores indica o valor da fração de superfluido, para uma rede com $N = L = 8$. A linha de fração de superfluido constante que indica que $U_c(g)$ é essencialmente linear. A amplitude de hopping t foi tomada como unidade de energia.

onde G é uma função de escala. Concluimos, então, que a contribuição singular para a linha crítica que separa as fases superfluida e isolante é $U_c(g) \sim |g|^{\nu z}$, com os expoentes críticos associados ao PCQ sem interação.

Como o produto νz é grande ($\nu z = 4/3$ no modelo de Anderson e $\nu z = 2.374$ no de Aubry-André), precisamos levar em consideração as contribuições analíticas para a linha. De modo geral, podemos escrever

$$U_c(g) = f(g) + a_{\pm}|g|^{\nu z}, \quad (4.2)$$

com $f(g)$ analítica, e a_{\pm} constante, onde \pm se refere ao sinal de g . Próximo ao PCQ, quando $g \rightarrow 0$, contribuições analíticas dominam.

Para o modelo de Aubry-André, realizamos o cálculo numérico das quantidades físicas de interesse em um sistema interagente. A Fig. 4.2 mostra a fração de superfluido (2.7) calculada próximo ao ponto fixo não interagente em $\Delta = 2$, para interações atrativas ($U < 0$) e repulsivas ($U > 0$), obtida a partir da diagonalização exata de um sistema com $L = 8$ sítios e $N = 8$ bósons. Podemos ver que uma linha reta de f_s constante é uma boa aproximação à fronteira entre as regiões superfluida e localizada. Embora a transição seja suavizada pelo tamanho pequeno da rede, o valor assumido por f_s ao longo da reta é o mesmo daquele assumido no PCQ não interagente $U = 0$, $\Delta = 2$, mostrado na Fig. 3.9.

Note que o efeito “dois negativos fazem um positivo” também ocorre no modelo de Aubry-André: aumentar a intensidade das interações repulsivas restaura a superfluidez. Este fenômeno pode ser entendido qualitativamente notando que, conforme U aumenta, as ilhas do vidro de Bose “se expandem” até se superporem, quando o sistema recupera a coerência de fase de longo alcance.

4.3 *Scaling* no limite de interação forte

O limite oposto ao estudado na seção anterior corresponde a $U/t \gg 1$. Nesse regime, o *hopping* pode ser tratado perturbativamente a partir do limite local. Nesta seção, exploramos a transição MI-BG nesse regime.

Conforme discutido no capítulo 2, no limite de sítios desacoplados o Hamiltoniano de Bose-Hubbard (1.1) é diagonal, com autovalores

$$E(\{n_i\}) = \sum_i \left[\varepsilon_i n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \right], \quad (4.3)$$

sujeitos ao vínculo $\sum_i n_i = N$. No modelo de Aubry-André, as energias locais ε_i são dadas pela Eq. (1.3).

Embora todos os estados de partícula única sejam localizados quando $t = 0$, eles ficam distribuídos de forma densa em uma “banda” de energia de largura 2Δ . No limite termodinâmico, se $\Delta < U/2$ existe um *gap* para excitação de uma partícula, dado por

$$\Delta E = U - 2\Delta, \quad (4.4)$$

e podemos caracterizar o estado fundamental como isolante de Mott. Por outro lado, o *gap* de energia é nulo quando $\Delta > U/2$, e o estado fundamental do sistema pode ser identificado ao vidro de Bose.

Como o *gap* para excitações é uma energia característica do sistema, deve ser proporcional à ξ^{-z} , sendo ξ o comprimento de correlação. Ou seja, devemos ter

$$\Delta E \sim \xi^{-z} \sim |g|^{\nu z}. \quad (4.5)$$

Por comparação com a Eq. (4.4), deduz-se que, no limite local, temos $\nu z = 1$.

Nesse limite, realizamos o cálculo numérico do *gap de energia* e da *compressibilidade* para o modelo de Aubry-André, próximo ao ponto fixo $\Delta_c = U/2$. Os autoestados foram obtidos buscando os menores valores da energia $E(\{n_i\})$ (4.3), calculados explicitamente para diferentes tamanhos de rede e diferentes valores de Δ , com U fixo.

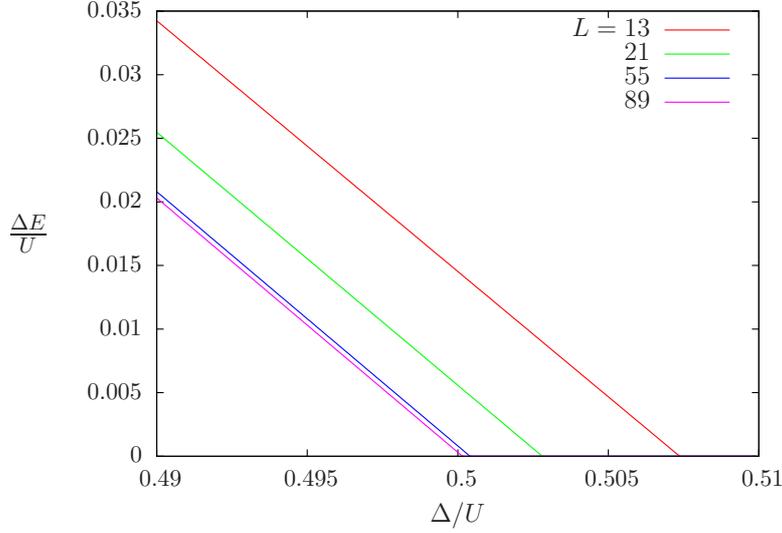


Figura 4.3: Gap de energia versus amplitude do potencial de Aubry-André para L ímpar pertencente à série de Fibonacci. Como se pode esperar, $\Delta E \sim \Delta$ mesmo em redes finitas. Para cada valor de L , o ponto onde o gap se anula define uma amplitude do potencial característica Δ_L , e a magnitude do gap em $\Delta = U/2$ define uma energia característica ΔE_L .

4.3.1 Gap de energia

A Fig. 4.3 mostra o gap de excitações de uma partícula em função da amplitude do potencial incommensurável para diferentes tamanhos de rede L . Percebemos que, mesmo para redes finitas, o gap fecha linearmente em Δ . Mostramos apenas valores ímpares de L , já que para L par e β_L racionalizado o gap de energia é nulo se $\Delta = U/2$, devido à uma simetria espúria no potencial $\varepsilon_i = \Delta \cos(2\pi i \beta_L)$.

Definimos, para cada L , a quantidade Δ_L como o valor da amplitude do potencial a partir do qual o gap é nulo, e $|g_L| = |\Delta_L - \frac{U}{2}|$. Definimos também ΔE_L como o valor do gap de energia em $\Delta = U/2$ para cada L . A partir das relações de escala discutidas na seção 2.2

$$|g| \sim \xi^{-1/\nu}, \quad \Delta E \sim \xi^{-z}, \quad (4.6)$$

podemos ver que essas quantidades obedecem à relações de escala de tamanho finito:

$$|g_L| \sim L^{-1/\nu}, \quad \Delta E_L \sim L^{-z}. \quad (4.7)$$

A Fig. 4.4 apresenta os valores numéricos de ΔE_L e $|g_L|$, assim como as curvas ajustadas das leis de escala (4.7). As retas praticamente paralelas (na escala logarítmica do gráfico)

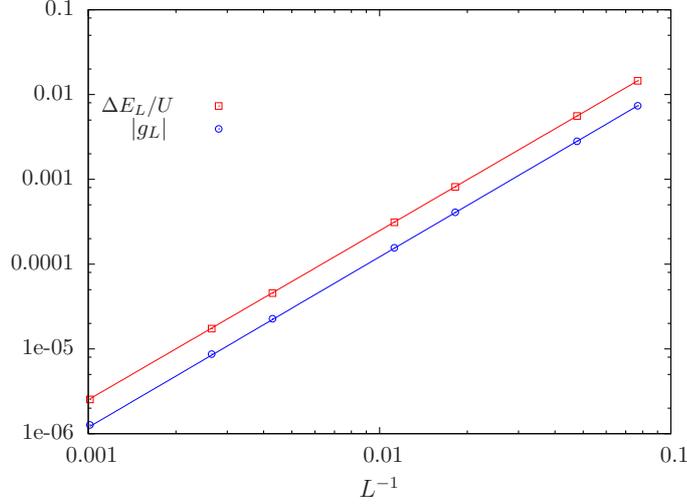


Figura 4.4: Gráfico logarítmico de ΔE_L e $|g_L|$ em função de L^{-1} . Os símbolos representam valores obtidos da solução numérica, e as retas são ajustes com as leis (4.7).

confirmam a previsão de que $z = 1/\nu$. Na tabela 4.1, apresentamos os valores obtidos para os expoentes a partir do ajuste dos resultados numéricos. Os resultados são consistentes com $z = 2$ e $\nu = 1/2$.

4.3.2 Compressibilidade

Conforme vimos na seção 2.2, a compressibilidade pode divergir em uma transição de fase contínua, de acordo com a lei (2.45). Se definirmos, para cada L , a quantidade κ_L como sendo a compressibilidade quando $\Delta = \Delta_c = U/2$, teremos uma lei de escala de tamanho finito dada por

$$\kappa_L \sim |g_L|^{\nu(d-z)} \sim L^{z-d}. \quad (4.8)$$

A Fig. 4.5(a) mostra valores da compressibilidade calculados numericamente, através da expressão

$$\kappa = \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial \rho^2} \right)^{-1}. \quad (4.9)$$

Podemos perceber que, ao aumentarmos L , a compressibilidade diverge próximo à Δ_c . Também é possível notar que $\kappa \rightarrow 0$ na fase isolante de Mott. Os valores de κ_L obtidos numericamente para diferentes tamanhos de rede L , são exibidos na Fig. 4.5(b), juntamente com uma curva de ajuste seguindo a lei (4.8). Novamente, os resultados são consistentes com $z = 2$.

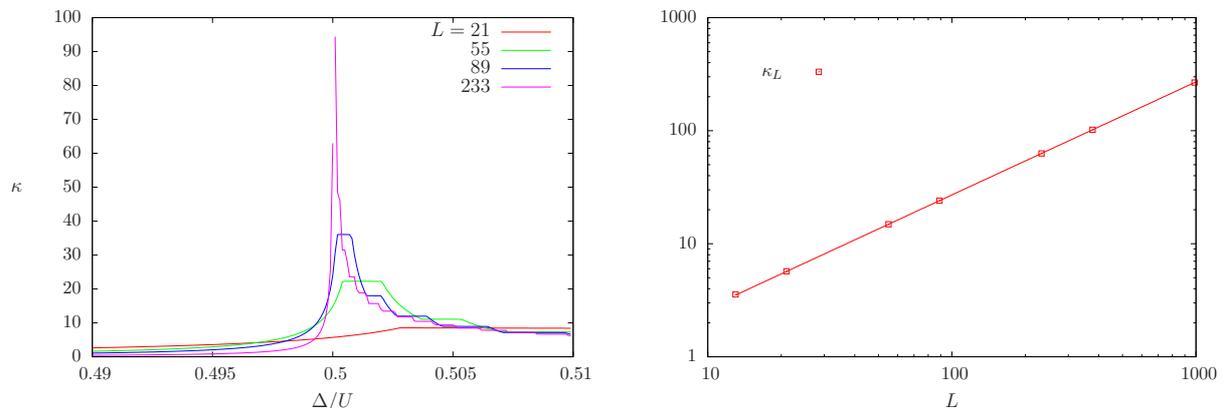


Figura 4.5: (a) Compressibilidade em função da amplitude do potencial. Conforme L aumenta, a compressibilidade diverge quando o gap se anula. (b) Gráfico logarítmico de κ_L em função de L , juntamente com um ajuste de acordo com a lei (4.8).

Observe nas Figs. 4.4 e 4.5(b) que os pontos determinados pela solução numérica coincidem com as retas de ajuste às leis de escala com boa precisão, até mesmo para $L = 13$. Podemos usar esse fato para explorar o diagrama de fases do modelo de Aubry-André na vizinhança do ponto crítico, no limite em que a amplitude de tunelamento é pequena ($t \ll U$).

Tabela 4.1: Valores obtidos a partir do ajuste das leis de escala (4.7) e (4.8) pelo método dos mínimos quadrados. Os resultados são consistentes com os expoentes $1/\nu = z = 2$.

Quantidade	Expoente	
$ g $	$1/\nu$	2.011 ± 0.001
ΔE	z	1.9944 ± 0.0006
κ	$z - d$	0.9999 ± 0.0002

4.3.3 Amplitude de *hopping* pequena

Para a análise da transição MI-BG com a adição de uma amplitude de tunelamento t pequena, na vizinhança da reta $\Delta = U/2$, calculamos numericamente o gap de energia em uma rede com $L = 13$ sítios e $N = 13$ partículas, reduzindo o espaço de Fock apenas aos estados mais relevantes.

Para este fim, consideramos um subespaço de estados de Fock que contenha:

1. os autoestados $|\{n_i\}\rangle$ de mais baixa energia de sistemas com *hopping* nulo e Δ próximo ao valor crítico $\Delta_c(t = 0)$;
2. estados $|\{n_j\}\rangle$ que estejam conectados com os estados desse conjunto inicial por um número qualquer de conexões consecutivas de *hopping* distintas, de modo que tenhamos

$$\langle \{n_j\} | \prod_{k=m}^{m+n} a_{k+1}^\dagger a_k | \{n_i\} \rangle \neq 0. \quad (4.10)$$

O produto na equação acima envolve um número qualquer de fatores $a_{k+1}^\dagger a_k$ consecutivos, levando em conta condições de contorno periódicas. Note que os estados adicionados na segunda etapa conectam os da primeira etapa entre si. Repetimos sucessivamente os cálculos numéricos, considerando um conjunto cada vez maior de estados selecionados na primeira etapa, até que os resultados se tornem estáveis frente à introdução de estados adicionais. Dessa forma, para $L = N = 13$ encontramos um subespaço de dimensão $d = 1747$ no qual os cálculos numéricos fornecem uma boa aproximação se $t/U \sim 10^{-3}$ e $\Delta \approx U/2$. Para comparação, a dimensão do espaço de Fock completo desse sistema é $d_{13} = 5\,200\,300$, o que torna proibitiva a diagonalização numérica do hamiltoniano.

Resultados do cálculo do gap de energia nas proximidades de $\Delta_c(t = 0)$ são mostrados na Fig. 4.6. Podemos perceber que, mesmo na presença de *hopping* fraco, o gap ainda se anula linearmente com a amplitude do potencial de Aubry-André.

A Fig. 4.7 mostra o gap de energia calculado próximo ao ponto fixo local $\Delta_c = U/2$, a partir da diagonalização exata de um subespaço do sistema com $L = 13$ sítios e $N = 13$ bósons. Os pontos cinzas denotam pontos onde o gap de energia se anula. Já os pontos brancos indicam uma curva de ΔE constante, de valor $\Delta E_{13}(t = 0)$, que corresponde à separação entre as fases isolante de Mott e vidro de Bose.

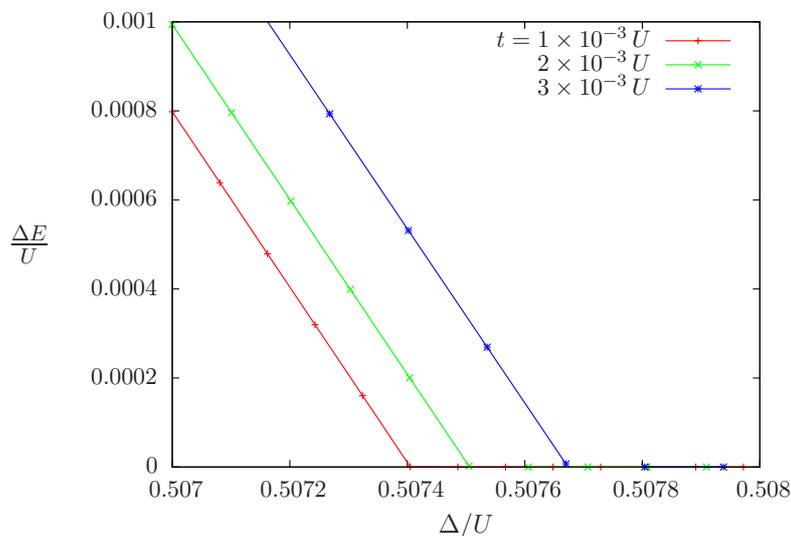


Figura 4.6: Gap de energia *vs.* amplitude do potencial de Aubry-André para $N = L = 13$ em um subespaço reduzido. Podemos perceber que $\Delta E \sim \Delta$ mesmo após adicionarmos tunelamento entre os sítios.

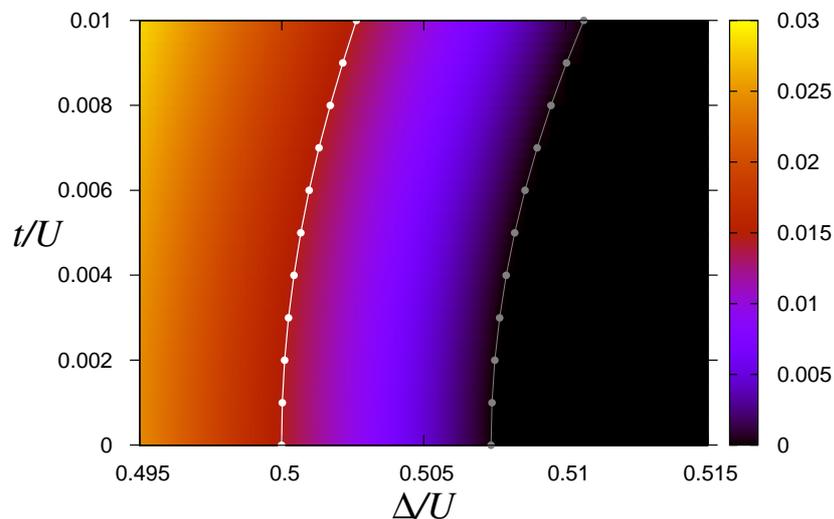


Figura 4.7: Diagrama de fases quânticas para o modelo de Aubry-André na presença de amplitude de tunelamento pequena. A escala de cores indica o valor do gap de energia, para uma rede com $N = L = 13$. A linha branca de gap constante indica $\Delta_c(t) = \frac{U}{2} \sim t^2/U$.

As figuras mostram que a adição do tunelamento com $\Delta > U/2$ abre o gap, e induz uma transição para a fase isolante de Mott. Tanto os pontos brancos quanto os cinzas são bem aproximados por curvas quadráticas $\Delta(t) - \Delta(0) \sim t^2/U$.

Escala de energia relevante

O conhecimento dos expoentes críticos nos permite, próximo ao PCQ local, generalizar as relações de escala, tratando a amplitude de tunelamento como um “campo” relevante.

Primeiramente, devemos notar que o sistema exibe simetria frente à troca $(t) \leftrightarrow (-t)$. Logo, a energia livre F não pode ser uma função de t , mas somente de t^2 . De fato, a escala de energia relevante próximo ao PCQ é t^2/U . Podemos explicar o comportamento da curva crítica notando que, próximo à transição, a parte singular da energia livre é dada por

$$F_s \sim |g|^{\nu(d+z)} G\left(\frac{t^2/U}{|g|^{\nu z}}\right). \quad (4.11)$$

Então, a contribuição singular para a linha crítica é $(t^2/U)_c \sim |g|^{\nu z} \sim \Delta - \frac{U}{2}$. Esse raciocínio explica o comportamento

$$\Delta_c(t) - \frac{U}{2} \sim t^2/U. \quad (4.12)$$

Capítulo 5

Fases Topológicas do Modelo de Aubry-André Generalizado

Neste capítulo, estudamos uma extensão do modelo de Aubry-André (AA) que leva em conta uma modulação periódica da amplitude de tunelamento. Na presença de condições de contorno abertas, e para algumas escolhas de parâmetros, esta classe de modelos exhibe autoestados de borda com energia zero, de caráter *topológico*. Analisamos em detalhe a adição de uma modulação incomensurável sobre esse sistema, o que também gera localização, como no caso da modulação diagonal (energias locais) descrita nos capítulos 3 e 4. Em particular, focalizamos a sobrevivência ou não dos estados topológicos no regime de localização de Anderson. Os resultados apresentados neste capítulo deram origem a um artigo em fase de submissão para publicação.

5.1 Hamiltoniano do modelo

Voltando ao modelo AA no limite não interagente, analisado no capítulo 3, que é caracterizado por um potencial diagonal incomensurável, adicionamos aqui modulações comensuráveis e incomensuráveis do *hopping* (não diagonais). O hamiltoniano desse modelo generalizado pode ser escrito na forma

$$H = \sum_i \left[-t(1 + \lambda_i + \delta_i)(a_{i+1}^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i+1}) + \varepsilon_i a_i^\dagger a_i \right]. \quad (5.1)$$

As modulações da amplitude de tunelamento comensurável e incomensurável são, respectivamente,

$$\lambda_i = \lambda \cos(2\pi b i + \varphi_\lambda) \quad (5.2)$$

e

$$\delta_i = \delta \cos(2\pi \beta i + \varphi_\delta), \quad (5.3)$$

enquanto o potencial local (modulação diagonal) ainda é dado por

$$\varepsilon_i = \Delta \cos(2\pi \beta i). \quad (5.4)$$

O parâmetro b é a razão entre dois números inteiros (em geral, utilizaremos $b = 1/2$), e mantemos $\beta = (1 + \sqrt{5})/2$, a razão áurea.

Como mostraremos a seguir, a perturbação incomensurável δ_i também leva à localização, como já tínhamos visto com o potencial diagonal.

5.1.1 Localização

Na seção 2.3, vimos que a localização de Anderson no modelo AA usual ($\lambda = \delta = 0$) ocorre para o valor crítico $\Delta_c = 2t$. No caso do modelo generalizado (5.1), também ocorre localização mesmo quando $\Delta = 0$. A parte superior da Fig. 5.1 mostra a fração de superfluido f_s como função da amplitude da modulação incomensurável do hopping δ , para $b = \frac{1}{2}$ e diferentes valores da amplitude da modulação comensurável λ . Se observa que a fração de superfluido se anula para valores suficientemente grandes de δ , evidenciando a passagem para um regime de estados localizados. A amplitude crítica δ_c para localização depende de λ e da “frequência” b .

Neste ponto, cabe observar que o nosso cálculo, ao envolver a fração de superfluido, supõe um sistema bosônico. Em geral, isolantes e supercondutores topológicos envolvem elétrons, isto é, sistemas fermiônicos. Porém, o espectro de energias de partícula única é o mesmo, e estamos trabalhando no limite não interagente. A diferença básica seria a relevância do nível de Fermi em vez do estado de mais baixa energia, mas a localização ocorre para todos os estados no caso unidimensional. Neste sentido, a fração de superfluido é apenas um indicador da presença de estados estendidos ou localizados.

A parte inferior da Fig. 5.1 apresenta a fidelidade entre dois estados equivalentes em sistemas diferindo por uma pequena variação da amplitude da modulação incomensurável δ . Pode-se ver claramente que a fidelidade apresenta mínimos acentuados exatamente

nos valores de δ para os quais a fração de superfluido se anula, consistente com a sua identificação como os valores críticos da transição de localização.

É interessante salientar que os resultados para a fração de superfluido na Fig. 5.1 foram obtidos com condições de contorno periódicas em redes de 144 sítios, com a razão áurea sendo aproximada para $\beta \simeq 233/144$, que é o quociente entre dois números de Fibonacci sucessivos, conforme comentado no capítulo 2. Por outro lado, a fidelidade mostrada na mesma figura foi calculada com condições de contorno abertas, em redes de 200 sítios. Mesmo assim, a coincidência dos valores de δ_c é marcante. Conforme pode ser verificado na Fig. 5.1, os valores críticos de δ para os quais a localização ocorre obedecem à relação linear $\delta_c(\lambda) = 1 - \lambda$.

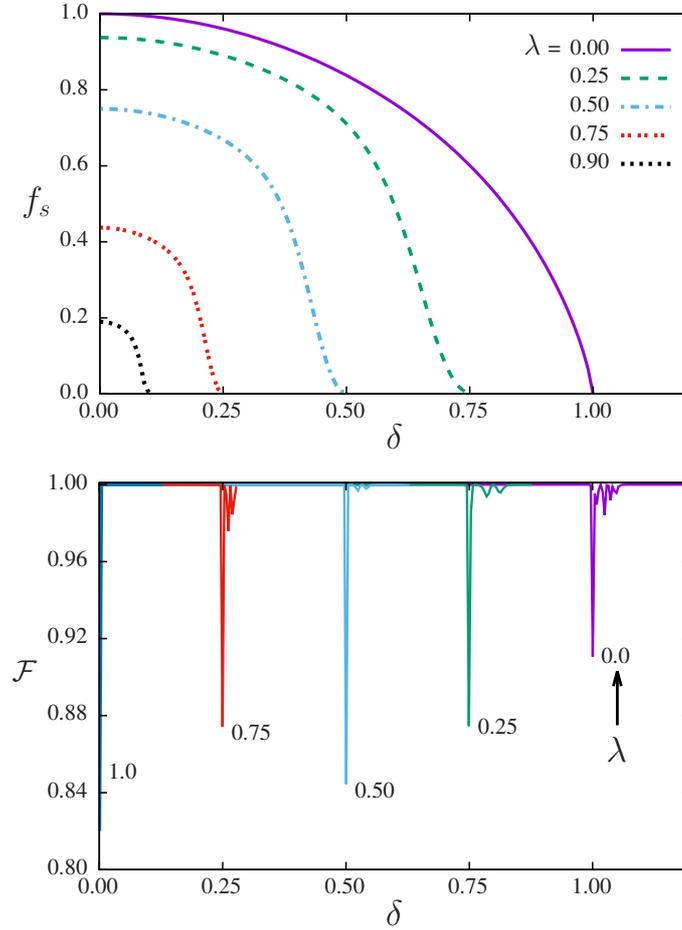


Figura 5.1: (a) Fração de superfluido e (b) fidelidade do estado fundamental em função de δ , para diferentes valores de λ . Os valores críticos de δ obedecem à relação linear $\delta_c(\lambda) = 1 - \lambda$.

Também é digno de nota o fato de que, além de δ_c , o valor máximo de f_s (em $\delta = 0$) é fortemente dependente da amplitude λ do termo comensurável. Em particular, as curvas $f_s(\delta)$ tendem a um único ponto ($f_s = 0, \delta = 0$) para $\lambda = 1$. A localização que ocorre para $\lambda = 1$, quando $\delta = 0$, pode ser entendida como o cancelamento do termo uniforme de tunelamento com o termo comensurável, já que $\cos(\pi i) = \pm 1$ para i par/ímpar, e, portanto, $t(1 + \lambda_i)$ alterna entre $2t$ e 0 . Desta forma, a rede unidimensional fica separada em dímeros isolados, e a localização é “trivial”.

5.2 Estados topológicos

Como vimos, o modelo AA generalizado comensurável exibe um par degenerado de estados topológicos de energia nula. Eles são *estados de borda* e, portanto, aparecem apenas para condições de contorno abertas.

Ao contrário do que ocorre no efeito Hall quântico (QHE) de um gás de elétrons bidimensional, esses estados de borda em 1D são localizados. Como vimos no capítulo 2, podemos olhar o modelo (5.1) como um modelo bidimensional, associando a fase φ_λ a uma variável dinâmica, como no modelo de Harper. Percebemos então que o gap no espectro (Fig. 2.4) se anula nos “pontos de Dirac” $\varphi_\lambda = \pm\pi/2$, onde a “relação de dispersão” é linear, o que mostra que esse modelo não é topologicamente equivalente ao QHE [67].

Já comentamos, no capítulo 2, que os estados topológicos de energia nula podem ser associados a operadores de Majorana. Tais operadores descrevem suas próprias antipartículas, isto é, os operadores de criação e aniquilação são iguais, podendo ser definidos como combinações lineares de um operador de criação e um de aniquilação de férmions reais, o que é possível na condição de simetria partícula-buraco.

Em um sistema fermiônico, os operadores de criação e aniquilação satisfazem relações de anti-comutação:

$$\{a_i, a_j\} = 0, \quad \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \quad \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}. \quad (5.5)$$

Um estado fermiônico pode ser escrito como a combinação de dois estados de Majorana. Seguindo a abordagem da Ref. [67], reescrevemos o modelo AA generalizado na base

$$a_{2n} = \gamma_{2n} + i\tau_{2n}, \quad a_{2n+1} = \tau_{2n+1} + i\gamma_{2n+1}, \quad (5.6)$$

com γ e τ duas espécies de férmions de Majorana.

Nessa base, o hamiltoniano assume a forma

$$H = \sum_n [(\Lambda_- \gamma_{2n} \gamma_{2n+1} + \Lambda_+ \gamma_{2n} \gamma_{2n+1}) + (\Lambda_- \tau_{2n} \tau_{2n+1} + \Lambda_+ \tau_{2n} \tau_{2n+1})], \quad (5.7)$$

onde $\Lambda_{\pm} = 2it(1 \pm \lambda \cos \varphi_{\lambda})$. Temos então duas cadeias de Majorana independentes.

Kitaev [83] utilizou esses operadores em um modelo simples de supercondutor unidimensional. A topologia do modelo de Kitaev é equivalente a de uma cadeia *tight-binding* com integrais de *hopping* t_1, t_2 alternadas. Essa é, também, a topologia do modelo AA com modulação $b = 1/2$, quando temos $t_1 = t(1 + \lambda \cos \varphi_{\lambda})$ e $t_2 = t(1 - \lambda \cos \varphi_{\lambda})$. O regime no qual $|\Lambda_+| < |\Lambda_-|$ é trivial, neste regime os estados de Majorana do mesmo sítio estão acoplados. Já o caso $|\Lambda_+| > |\Lambda_-|$ define uma cadeia na qual existe acoplamento entre estados de Majorana de sítios diferentes, restando dois férmions de Majorana não pareados nas extremidades.

Estritamente para o modelo AA generalizado (unidimensional), os estados topológicos de borda, por serem localizados, podem, em princípio, sobreviver mesmo após o sistema ter passado por uma transição de localização como a induzida por uma perturbação incomensurável. Neste sentido, no que segue vamos fixar $\Delta = 0$, pois verificamos que uma perturbação diagonal de qualquer amplitude levanta a degenerescência e desloca os estados topológicos da energia nula.

A Fig. 5.2 mostra os autovalores de energia como função de φ_{λ} , e também a evolução do espectro à medida que a amplitude da modulação incomensurável não diagonal δ_i varia a partir de $\delta = 0$. Para esta análise, fixamos $\varphi_{\delta} = 0$.

Na sequência de painéis da Fig. 5.2, podemos destacar:

- (i) a existência de estados topológicos de energia zero do caso comensurável;
- (ii) gaps de energia começando a abrir nas bandas devido à perturbação incomensurável;
- (iii) as bandas mudam de forma drasticamente conforme entramos no limite localizado;
- (iv) a partir do valor crítico $\delta = 1.5$ o gap central é substituído por uma “banda” de energia (distribuição densa de estados localizados), e os estados topológicos desaparecem.

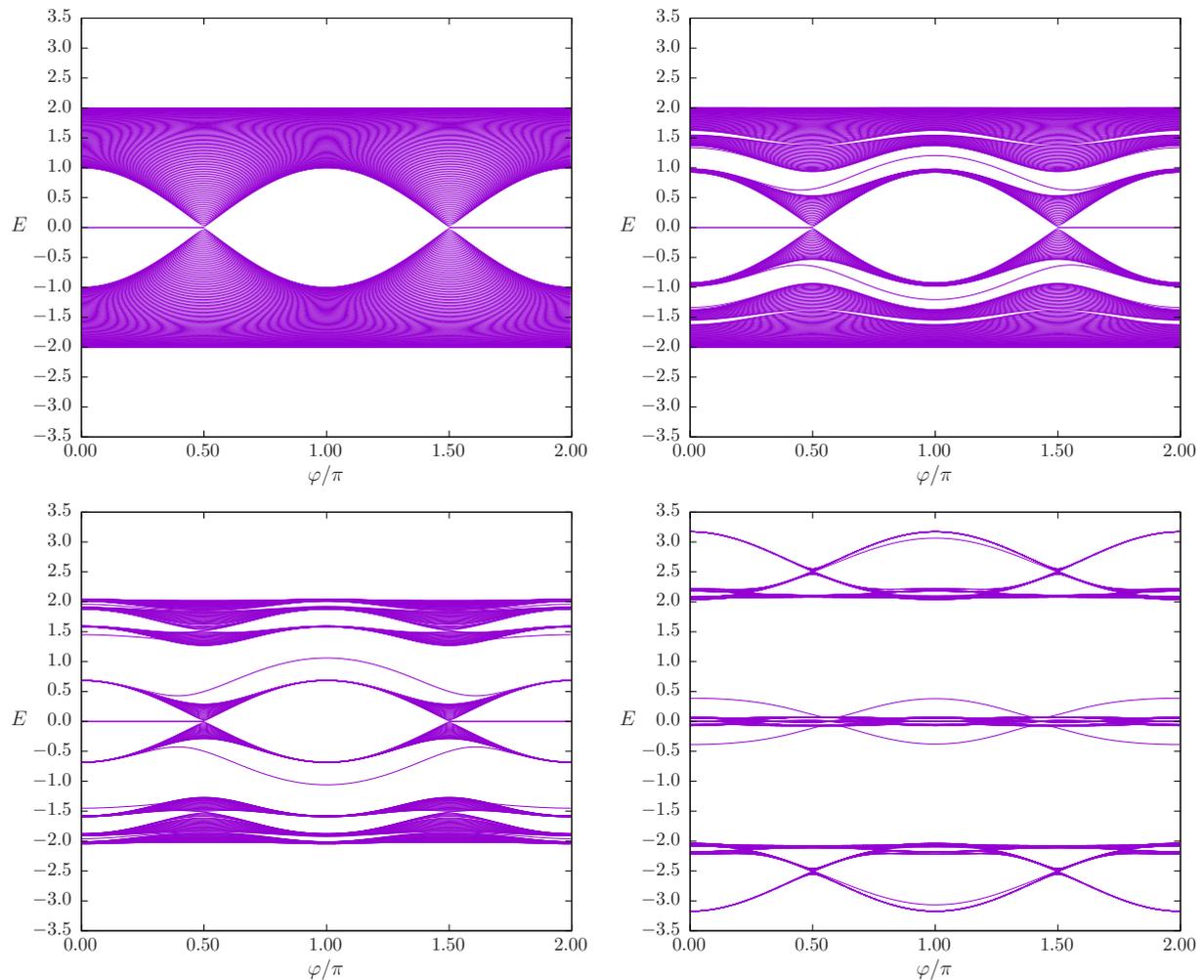


Figura 5.2: Espectro de energia como função de φ_λ , com modulação comensurável $\lambda = 0.5$ e $\varphi_\delta = 0$. Da esquerda para a direita e de cima para baixo, temos $\delta = 0$, $\delta = 0.2$, $\delta = 1.0$ e $\delta = 1.5$.

Assim, constatamos que os estados topológicos sobrevivem à transição de localização. O desaparecimento desses estados ocorre em um novo valor crítico $\bar{\delta}_c > \delta_c$. Isso pode ser melhor observado na Fig. 5.3, que destaca os estados com energias próximas de zero, mostrando os espectros para $\bar{\delta}_c$ e para um valor de δ ligeiramente menor, para o qual os estados topológicos ainda são claramente visíveis.

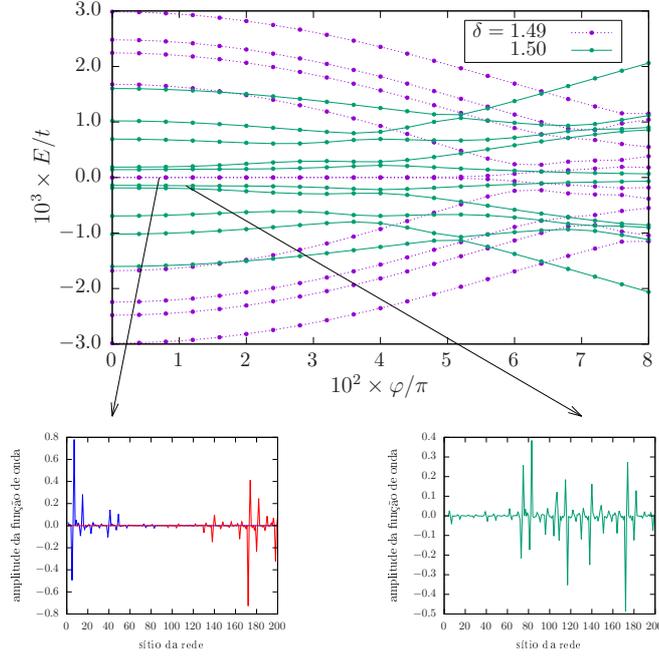


Figura 5.3: Ampliação do espectro para $\lambda = 0.5$ e dois valores de δ próximos à supressão dos estados topológicos, ausentes para $\delta = 1.5$. Nas figuras menores, são apresentadas as amplitudes das funções de onda para os autovalores indicados. Para $\delta = 1.5$ (direita) os estados já não têm o caráter de borda que ainda é notável para $\delta = 1.49$ (esquerda).

Assim como observamos para a transição de localização, o valor crítico $\bar{\delta}_c$ também varia com λ . Estudando sistematicamente essa variação, constatamos que ela também obedece uma relação linear simples, que neste caso é $\bar{\delta}_c = 1 + \lambda$. A partir disso, podemos construir um diagrama de fases do modelo generalizado (sem potencial incomensurável local), que é mostrado na Fig. 5.4. O diagrama apresenta três fases distintas: *condutor topológico* (TC, do inglês “topological conductor”), *isolante de Anderson topológico* (TAI, do inglês “topological Anderson insulator”) e *isolante de Anderson não topológico* (NTAI, do inglês “non-topological Anderson insulator”).

O diagrama de fases da Fig. 5.4 corresponde ao ponto de fase nula ($\varphi_\lambda = \varphi_\delta = 0$). A fase φ_λ é bastante relevante, mas o seu papel pode ser facilmente explicitado. Como estamos nos restringindo ao modelo com $b = 1/2$, o termo de amplitude λ no hamiltoniano é, de fato,

$$\lambda \cos(\pi i + \varphi_\lambda) = \lambda \cos(\varphi_\lambda) \cos(\pi i). \quad (5.8)$$

Portanto, os resultados para $\varphi_\lambda \neq 0$ podem ser obtidos substituindo λ por $\lambda_\varphi \equiv \lambda \cos(\varphi_\lambda)$.

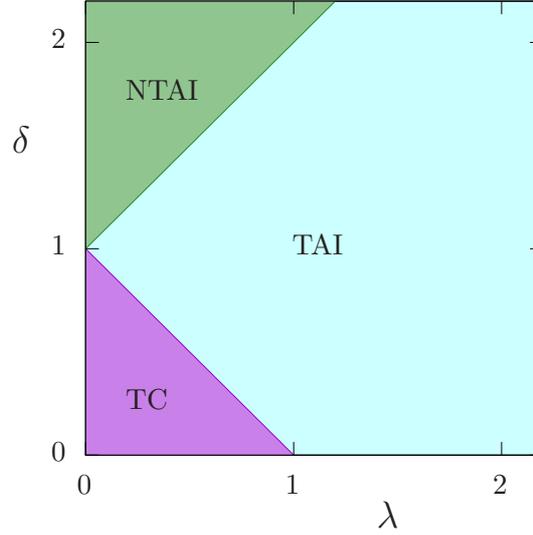


Figura 5.4: Diagrama de fases para o modelo (5.1) com $\Delta = 0$ [ver Eq. (5.4)]. As fases são identificadas como condutor topológico (TC), isolante de Anderson topológico (TAI) e isolante de Anderson não topológico (NTAI).

Isto significa que, para obter diagramas de fase para valores não nulos de φ_λ , devemos reescalonar o eixo horizontal por um fator $1/\cos(\varphi_\lambda)$. Dessa forma, o valor de λ para o qual δ_c se anula desloca-se para a direita, e o ângulo entre as duas linhas retas diminui. Quando $\varphi_\lambda \rightarrow \pi/2$, o ponto $\lambda_\varphi = 1$ corresponde a $\lambda \rightarrow \infty$, e as duas retas tornam-se paralelas, o que significa que a única transição é entre as fases TC e NTAI, com $\delta_c = 1$. Isso ocorre nos “pontos de Dirac” do espectro puramente comensurável (primeiro gráfico da Fig. 5.2), quando temos uma única banda contínua e não existem estados topológicos. Para qualquer λ finito, isto equivale a uma rede simples, sem qualquer modulação, para a qual a adição da modulação incomensurável leva à localização em $\delta = 1$.

Até agora, nos restringimos a analisar o efeito da perturbação incomensurável com uma fase fixa $\varphi_\delta = 0$. Entretanto, no que se refere às propriedades topológicas do sistema, existe uma situação não trivial, que corresponde ao acoplamento de fase das modulações comensurável e incomensurável, isto é, $\varphi_\delta = \varphi_\lambda$. A estrutura geral do espectro continua muito similar, porém com uma diferença importante: as bandas separadas por *gaps*, que aparecem com o aumento de δ (ver Fig. 5.2), passam a ser conectadas por um par de estados de borda que atravessam os *gaps*, como exemplificado na Fig. 5.5.

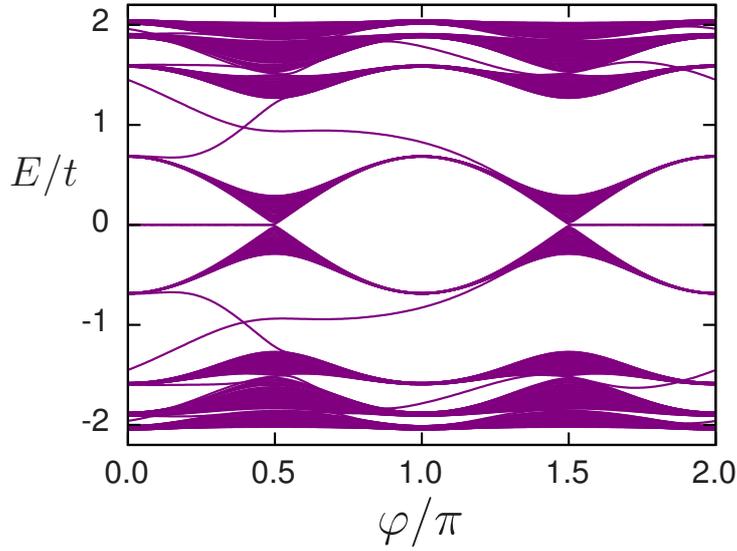


Figura 5.5: Espectro de energias do modelo AA generalizado no caso de modulações com fases acopladas $\varphi_\delta = \varphi_\lambda \equiv \varphi$. Temos $\lambda = \delta = 0.5$ neste exemplo. Note que pares de *edge states* conectam bandas vizinhas através de cada *gap*.

Esses novos estados são similares aos estados que aparecem no modelo com modulação incommensurável δ apenas, mostrados na Fig. 2.4 (painel esquerdo), similares aos estados que aparecem em isolantes topológicos. Porém, estados de energia zero, associados a Férmions de Majorana, também estão presentes.

Pela descrição acima, podemos concluir que os modelos de Aubry-André generalizados com fases acopladas ($\varphi_\lambda = \varphi_\delta$) e com $\varphi_\delta = 0$ pertencem a classes topológicas distintas, pois um espectro não pode ser “distorcido” continuamente até o outro, por variação de parâmetros do Hamiltoniano, sem fechamento (ou abertura) de *gaps*.

Para o modelo com fases acopladas, a região de baixa energia é muito similar à que apresentamos na Fig. 5.3, indicando que a sobrevivência e subsequente desaparecimento dos estados de energia zero não sofrem alterações significativas nessa região, que é próxima de $\varphi = 0$. Entretanto, há indícios de que estados de energia zero podem continuar existindo para outros valores maiores de fase. Estas interessantes observações merecem uma investigação mais aprofundada, mas isso ultrapassa o escopo do presente trabalho.

Capítulo 6

Conclusões

O tema central deste trabalho de doutorado foi o estudo das transições de fase quânticas que ocorrem em redes de átomos frios, incluindo efeitos de desordem e de interação entre os átomos.

Utilizamos o Hamiltoniano de Bose-Hubbard para descrever os condensados de Bose-Einstein unidimensionais, 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.

Para a detecção de transições de fase quânticas computamos, através do método de diagonalização exata, quantidades físicas indicadoras das transições: a fração de superfluido, a fidelidade, o emaranhamento, o gap de energia e a compressibilidade. A fração de superfluido, por estar relacionada ao parâmetro de ordem das transições superfluido-isolante, geralmente é muito empregada no estudo da localização de Anderson. Já o emaranhamento e a fidelidade são ferramentas provenientes da área da informação quântica que vêm sendo muito empregadas no estudo das transições de fase quânticas em geral.

Um dos nossos resultados foi obter relações de escala e expoentes críticos associados à transição de localização no limite não interagente. Embora não exista um valor crítico finito da amplitude de desordem em $d = 1$ (ou seja, $\Delta_c = 0$), mostramos, por meio de uma análise de escala de tamanho finito da fração de superfluido, que a localização de Anderson pode ser vista como uma transição de fase quântica de segunda ordem, com expoentes críticos associados. Além disso, obtivemos o expoente do comprimento de correlação ν e o expoente dinâmico z que caracterizam a transição de localização de Anderson. Para desordem aleatória, encontramos $\nu = 2/3$ e $z = 2$, enquanto que para um potencial incomensurável

os resultados são $\nu = 1$ e $z = 2.374$.

Incluindo a interação repulsiva local do modelo de Bose-Hubbard, obtivemos um diagrama de fases do modelo de Aubry-André para oito partículas em uma rede de oito sítios. O cenário revelado pelos valores da fração de superfluido foi corroborado pela presença de algumas linhas de mínimos da fidelidade. Esse diagrama mostra que, embora tanto Δ quanto U tendam a destruir a superfluidez separadamente, a adição de desordem no isolante de Mott ou de interação no vidro de Bose resultam na restauração da superfluidez em uma certa região de parâmetros.

Quanto ao comportamento crítico do modelo de Aubry-André no regime de interação fraca, nossos resultados mostram que a interação é um campo relevante próximo ao ponto crítico não interagente da transição de superfluido para vidro de Bose. Também discutimos o comportamento da linha crítica $\Delta_c(U)$ e mostramos que, para valores pequenos da amplitude de interação U , essa linha é uma reta, refletindo um comportamento dominante não singular.

Obtivemos, também através de uma análise de escala de tamanho finito, os expoentes críticos associados à transição vidro de Bose-isolante de Mott a partir do limite local, para a desordem incomensurável. Conseguimos mostrar que, na região de amplitude de tunelamento pequeno ($t \ll U$) próxima ao ponto da transição local ($\Delta \approx U/2$) a curva crítica que separa essas fases é da forma $\Delta_c(t) - \frac{U}{2} \sim t^2/U$.

Finalmente, investigamos uma extensão do modelo de Aubry-André unidimensional que exhibe estados topológicos localizados nas bordas do sistema. Uma modulação comensurável da amplitude de *hopping* dá origem a estados topológicos de energia zero, associados a férmions de Majorana, que também aparecem em modelos de supercondutores topológicos. Estudamos como a variação de uma modulação incomensurável adicional afeta o espectro de energia, induzindo a localização dos estados desse modelo, e verificamos que os estados topológicos de energia zero sobrevivem após a localização até um segundo valor crítico da amplitude do termo incomensurável.

Verificamos que o acoplamento de fase entre as modulações comensurável e incomensurável altera as propriedades topológicas do modelo, introduzindo novos estados de borda, de natureza similar aos existentes no efeito Hall quântico. Isso mostra que é necessário um estudo mais aprofundado das propriedades topológicas dessa classe de modelos. Soma-se a isso a perspectiva de investigar efeitos de interação associados a esses aspectos topológicos, também em conjunto com a localização de Anderson.

É ainda relevante o fato de que sistemas físicos reais, que vão de nanoestruturas de estado sólido a redes de átomos frios com confinamento óptico e propagação de luz em arranjos de guias de ondas, podem ser de alguma forma descritos por esse tipo de modelos. Tudo isso evidencia que a classe de modelos aqui analisados, embora de baixa dimensionalidade e conceitualmente simples, apresenta uma grande riqueza de comportamentos físicos, cujo estudo detalhado exige o emprego de uma ampla gama de conceitos e técnicas.

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:

$$H = \sum_{i=1}^L \left[\varepsilon_i n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \right] - t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j. \quad (\text{A.1})$$

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 i , e ε_i 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,

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

Primeiramente, analisamos como os operadores de criação, aniquilação e número de átomos agem nos vetores da base:

$$\begin{aligned}
a_i^\dagger |k_1, \dots, k_i, \dots, k_L\rangle &= \sqrt{k_i + 1} |k_1, \dots, k_i + 1, \dots, k_L\rangle, \\
a_i |k_1, \dots, k_i, \dots, k_L\rangle &= \sqrt{k_i} |k_1, \dots, k_i - 1, \dots, k_L\rangle, \\
n_i |k_1, \dots, k_i, \dots, k_L\rangle &= k_i |k_1, \dots, k_i, \dots, k_L\rangle.
\end{aligned} \tag{A.4}$$

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

$$\begin{aligned}
\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_L | H | n_1, n_2, \dots, n_L \rangle &= \sum_{i=1}^L \left[\varepsilon_i n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) \right] \prod_{i=1}^L \delta_{n_i, n'_i} \\
&\quad - t \sum_{\langle ij \rangle} \left(\sqrt{n_j} \sqrt{n_i + 1} \delta_{n_i+1, n'_i} \delta_{n_j-1, n'_j} \right) \prod_{k \neq i, j} \delta_{n_k, n'_k}.
\end{aligned} \tag{A.5}$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} |2, 0, 0\rangle \\ |1, 1, 0\rangle \\ |1, 0, 1\rangle \\ |0, 2, 0\rangle \\ |0, 1, 1\rangle \\ |0, 0, 2\rangle \end{array} \right\}. \tag{A.6}$$

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

$$H|_{L=3, N=2} = \begin{pmatrix} 2\varepsilon_1 + U & -\sqrt{2}t & -\sqrt{2}t & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2}t & \varepsilon_1 + \varepsilon_2 & -t & -\sqrt{2}t & -t & 0 \\ -\sqrt{2}t & -t & \varepsilon_1 + \varepsilon_3 & 0 & -t & -\sqrt{2}t \\ 0 & -\sqrt{2}t & 0 & 2\varepsilon_2 + U & -\sqrt{2}t & 0 \\ 0 & -t & -t & -\sqrt{2}t & \varepsilon_2 + \varepsilon_3 & -\sqrt{2}t \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}t & 0 & -\sqrt{2}t & 2\varepsilon_3 + U \end{pmatrix}. \tag{A.7}$$

No caso particular 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 $U = 0$ (tomando $N = 1$) a matriz que representa o Hamiltoniano é tridiagonal, exceto pelos termos de tunelamento H_{1L} e H_{L1} , que conectam o primeiro e o L -ésimo sítios. Essa matriz tem a forma

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

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”, *Zeitschrift für Physik 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”, *Physical Review Letters*, **75**, 3969 (1995).
- [5] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin, “Observation of Resonance Condensation of Fermionic Atom Pairs”, *Physical Review Letters*, **92**, 040403 (2004).
- [6] 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”, *Physical Review Letters*, **99**, 010403 (2007).
- [7] A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge, and R. G. Hulet, “Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms”, *Physical Review Letters*, **291**, 2570 (2001).
- [8] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, and T. Esslinger, “Fermionic Atoms in a Three Dimensional Optical Lattice: Observing Fermi Surfaces, Dynamics, and Interactions”, *Physical Review Letters*, **94**, 080403 (2005).

- [9] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, “Superfluidity in dilute trapped Bose gases”, *Physical Review B*, **66**, 134529 (2002).
- [10] 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).
- [11] 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).
- [12] P. W. Anderson, “Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”, *Physical Review*, **109**, 1492 (1958).
- [13] P. Lugan, D. Clément, P. Bouyer, A. Aspect, M. Lewenstein, and L. Sanchez-Palencia, “Ultracold Bose Gases in 1D Disorder: From Lifshits Glass to Bose-Einstein Condensate”, *Physical Review Letters*, **98**, 170403 (2007).
- [14] S. Aubry and G. André, “Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices”, *Annals of the Israel Physical Society*, **3**, 133 (1980).
- [15] M. P. V. Albada and A. Lagendijk, “Observation of Weak Localization of Light in a Random Medium”, *Physical Review Letters*, **55**, 2692 (1985).
- [16] 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”, *Physical Review Letters*, **81**, 5540 (1998).
- [17] T. Schwartz, G. Bartal, S. Fishman, and M. Segev, “Transport and Anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices”, *Nature*, **446**, 52 (2006).
- [18] 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”, *Physical Review Letters*, **100**, 013906 (2008).
- [19] J. E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D. S. Wiersma, C. Fort, and M. Inguscio, “Bose-Einstein Condensate in a Random Potential”, *Physical Review Letters*, **95**, 070401 (2005).

- [20] 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”, *Physical Review Letters*, **95**, 170409 (2005).
- [21] 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”, *Physical Review Letters*, **95**, 170410 (2005).
- [22] 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”, *Physical Review Letters*, **95**, 170411 (2005).
- [23] U. Gavish and Y. Castin, “Matter-Wave Localization in Disordered Cold Atom Lattices”, *Physical Review Letters*, **95**, 020401 (2005).
- [24] 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).
- [25] 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).
- [26] M. Albert and P. Leboeuf, “Localization by bichromatic potentials versus Anderson localization”, *Physical Review A*, **81**, 013614 (2010).
- [27] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 1999.
- [28] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands”, *Proceedings of the Royal Society A*, **273**, 238 (1963).
- [29] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, “Boson localization and the superfluid-insulator transition”, *Physical Review B*, **40**, 546 (1989).

- [30] P. Buonsante, V. Penna, A. Vezzani, and P. B. Blakie, “Mean-field phase diagram of cold lattice bosons in disordered potentials”, *Physical Review A*, **76**, 011602 (2007).
- [31] B. Damski, J. Zakrzewski, L. Santos, P. Zoller, and M. Lewenstein, “Atomic Bose and Anderson Glasses in Optical Lattices”, *Physical Review Letters*, **91**, 080403 (2003).
- [32] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T. V. Ramakrishnan, “Percolation-Enhanced Localization in the Disordered Bosonic Hubbard Model”, *Physical Review Letters*, **75**, 4075 (1995).
- [33] M. Larcher, F. Dalfovo, and M. Modugno, “Effects of interaction on the diffusion of atomic matter waves in one-dimensional quasiperiodic potentials”, *Physical Review A*, **80**, 053606 (2009).
- [34] G. Orso, A. Iucci, M. A. Cazalilla, and T. Giamarchi, “Lattice modulation spectroscopy of strongly interacting bosons in disordered and quasiperiodic optical lattices”, *Physical Review A*, **80**, 033625 (2009).
- [35] Y. Cheng and S. K. Adhikari, “Matter-wave localization in a random potential”, *Physical Review A*, **82**, 013631 (2010).
- [36] P. Sengupta, A. Raghavan, and S. Haas, “Disorder-enhanced phase coherence in trapped bosons on optical lattices”, *New Journal of Physics*, **9**, 103 (2007).
- [37] R. T. Scalettar, G. G. Batrouni, and G. T. Zimanyi, “Localization in interacting, disordered, Bose systems”, *Physical Review Letters*, **66**, 3144 (1991).
- [38] R. Roth and K. Burnett, “Phase diagram of bosonic atoms in two-color superlattices”, *Physical Review A*, **68**, 023604 (2003).
- [39] R. Roth and K. Burnett, “Superfluidity and interference pattern of ultracold bosons in optical lattices”, *Physical Review A*, **67**, 031602 (2003).
- [40] D.-S. Lühmann, K. Bongs, K. Sengstock, and D. Pfannkuche, “Localization and delocalization of ultracold bosonic atoms in finite optical lattices”, *Physical Review A*, **77**, 023620 (2008).
- [41] P. Louis and M. Tsubota, “Bosons in Disordered Optical Potentials”, *Physical Review A*, **148**, 351 (2007).

- [42] K. Singh and D. Rokhsar, “Real-space renormalization study of disordered interacting bosons”, *Physical Review A*, **46**, 3002 (1992).
- [43] S. Rapsch, U. Scholhoöck, and W. Zwerger, “Density matrix renormalization group for disordered bosons in one dimension”, *Europhysics Letters*, **46**, 559 (1999).
- [44] 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”, *Physical Review A*, **78**, 023628 (2008).
- [45] N. N. Bogolyubov, “On the theory of superfluidity”, *J. Phys. (USSR)*, **11**, 23 (1947).
- [46] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, “Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential”, *Physical Review Letters*, **49**, 405 (1982).
- [47] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, “New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance”, *Physical Review Letters*, **45**, 494 (1980).
- [48] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “Colloquium: Topological insulators”, *Reviews of Modern Physics*, **82**, 3045 (2010).
- [49] L.-J. Lang, X. Cai, and S. Chen, “Edge States and Topological Phases in One-Dimensional Optical Superlattices”, *Physical Review Letters*, **108**, 220401 (2012).
- [50] P. G. Harper, “Single Band Motion of Conduction Electrons in a Uniform Magnetic Field”, *Proceeding of the Physical Society A*, **68**, 874 (1955).
- [51] Y. E. Kraus, Y. Lahini, Z. Ringel, M. Verbin, and O. Zilberberg, “Topological States and Adiabatic Pumping in Quasicrystals”, *Physical Review Letters*, **109**, 106402 (2012).
- [52] Y. E. Kraus and O. Zilberberg, “Topological Equivalence between the Fibonacci Quasicrystal and the Harper Model”, *Physical Review Letters*, **109**, 116404 (2012).
- [53] A. P. Hines, R. H. McKenzie, and G. J. Milburn, “Entanglement of two-mode Bose-Einstein condensates”, *Physical Review A*, **67**, 013609 (2003).

- [54] P. Buonsante and A. Vezzani, “Ground-State Fidelity and Bipartite Entanglement in the Bose-Hubbard Model”, *Physical Review Letters*, **98**, 110601 (2007).
- [55] A. Kitaev and J. Preskill, “Topological Entanglement Entropy”, *Physical Review Letters*, **96**, 110404 (2006).
- [56] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- [57] B. D. Josephson, “Possible new effects in superconductive tunnelling”, *Physics Letters*, **1**, 251 (1962).
- [58] 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”, *Nuclear Physics B*, **767**, 227 (2007).
- [59] G. Santos, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, and S. R. Dahmen, “Quantum phase transitions in an interacting atom-molecule boson model”, *Physical Review A*, **81**, 063621 (2010).
- [60] P. Zanardi and N. Paunković, “Ground state overlap and quantum phase transitions”, *Physical Review E*, **74**, 031123 (2006).
- [61] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2002.
- [62] N. Nagaosa, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Springer, 1999.
- [63] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*. World Scientific, 2001.
- [64] L. Pollet, N. V. Prokof’ev, B. V. Svistunov, and M. Troyer, “Absence of a direct superfluid to Mott insulator transition in disordered Bose systems”, *Physical Review Letters*, **103**, 140402 (2009).
- [65] F. Krüger, S. Hong, and P. Phillips, “Two distinct Mott-insulator to Bose-glass transitions and breakdown of self-averaging in the disordered Bose-Hubbard model”, *Physical Review B*, **84**, 115118 (2011).

- [66] G.-L. Ingold, A. Wobst, C. Aulbach, and P. Hanggi, “Delocalization and Heisenberg’s uncertainty relation”, *The European Physical Journal B*, **30**, 175 (2002).
- [67] S. Ganeshan, K. Sun, and S. D. Sarma, “Topological Zero-Energy Modes in Gapless Commensurate Aubry-André-Harper Models”, *Physical Review Letters*, **110**, 180403 (2013).
- [68] M. Leijnse and K. Flensberg, “Introduction to topological superconductivity and Majorana fermions”, *Semiconductor Science and Technology*, **27**, 124003 (2012).
- [69] L. D. Landau and L. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Pergamon Press, 1977.
- [70] A. Tzalenchuk, S. Lara-Avila, A. Kalaboukhov, S. Paolillo, M. Syväjärvi, R. Yakimova, O. Kazakova, T. J. B. M. Janssen, V. Fal’ko, and S. Kubatkin, “Towards a Quantum Resistance Standard Based on Epitaxial Graphene”, *Nature Nanotechnology*, **5**, 186 (2010).
- [71] R. L. Willett, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, “Alternation and Interchange of $e/4$ and $e/2$ Period Interference Oscillations Consistent with Filling Factor $5/2$ non-Abelian quasiparticles”, *Physical Review B*, **82**, 205301 (2010).
- [72] R. L. Willett, C. Nayak, K. Shtengel, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, “Magnetic-Field-Tuned Aharonov-Bohm Oscillations and Evidence for non-Abelian Anyons at $\nu = 5/2$ ”, *Physical Review Letters*, **111**, 186401 (2013).
- [73] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. D. Sarma, “Non-Abelian Anyons and Topological Quantum Computation”, *Reviews of Modern Physics*, **80**, 1083 (2008).
- [74] J. C. C. Cestari, *Localização de Anderson em Condensados de Bose-Einstein*. Dissertação de Mestrado - UFRGS, 2011.
- [75] J. C. C. Cestari, A. Foerster, and M. A. Gusmão, “Finite-size effects in Anderson localization of one-dimensional Bose-Einstein condensates”, *Physical Review A*, **82**, 063634 (2010).

- [76] J. C. C. Cestari, A. Foerster, M. A. Gusmão, and M. Continentino, “Critical exponents of the disorder-driven superfluid-insulator transition in one-dimensional Bose-Einstein condensates”, *Physical Review A*, **84**, 055601 (2011).
- [77] M. Kohmoto, “Metal-Insulator Transition and Scaling for Incommensurate Systems”, *Physical Review Letters*, **51**, 1198 (1983).
- [78] J. B. Sokoloff, “Unusual band structure, wave functions and electrical conductance in crystals with incommensurate periodic potentials”, *Physics Reports*, **126**, 189 (1985).
- [79] C. Tang and M. Kohmoto, “Global scaling properties of the spectrum for a quasiperiodic Schrödinger equation”, *Physical Review B*, **34**, 2041 (1986).
- [80] H. Hiramoto and M. Kohmoto, “Scaling analysis of quasiperiodic systems: Generalized Harper model”, *Physical Review B*, **40**, 8225 (1989).
- [81] H. Hiramoto and M. Kohmoto, “Electronic spectral and wavefunction properties of one-dimensional quasiperiodic systems: a scaling approach”, *International Journal of Modern Physics B*, **6**, 281 (1992).
- [82] D. R. Hofstadter, “Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields”, *Physical Review B*, **14**, 2239 (1976).
- [83] A. Y. Kitaev, “Unpaired Majorana fermions in quantum wires”, *Physics-Uspekhi*, **44**, 131 (2001).