

**Um Modelo Esquemático e um Modelo
Realístico para Tunelamento Coerente no Poço
Duplo.**

Gabriela Barreto Lemos

Julho de 2006

**Um Modelo Esquemático e um Modelo Realístico para
Tunelamento Coerente no Poço Duplo.**

Gabriela Barreto Lemos

Orientadora: Profa. Maria Carolina Nemes

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE
FEDERAL DE MINAS GERAIS, como requisito
parcial para a obtenção do grau de MESTRE EM
FÍSICA.

Julho de 2006

Em memória do Kiko.

“Podia escolher muitas vidas.
Optei por esta. Com isto, perdi contato com as outras.
De vez em quando me pego vagando pelos arredores baldios
como se lá encontrasse minhas outras vidas não escolhidas.
Com um pouco de magia, e alguma ciência, transmutação de lado
e troco a vida escolhida pela vida desconhecida.
Mas a troca é imperfeita.
Nem a física clássica, nem a quântica, nem a mistura das duas dá
conta.
Deixo um pouco de mim nos espaços trocados
Construo fragmentos, partículas, corpos, em diferentes
momentos.
Em silêncio, recolho passagens e trajetórias,
desconstruo sonhos, remexo imagens, ultrapasso limites, desfaço
a matéria
e me encontro no caos.
Descubro enfim, aliviada, que foi esta a vida que primeiro escolhi.”
(Sandhi Maria Barreto)

Agradecimentos

Em primeiríssimo lugar agradeço à Carolina que propôs esse belo trabalho e que me acompanhou ao longo dos últimos anos não só como orientadora mas como mãe e amiga. Eu sempre serei sua filhinha, mesmo mudando para longe! Sou muito grata àqueles que essencialmente me introduziram aos sistemas quânticos abertos: ao Marcelinho pelo energia e enorme dedicação; ao Marcelão pela didática e as piadas; ao Zé pela tranquilidade. Não posso deixar de agradecer aos professores e funcionários do departamento de física que tornam o dia-a-dia não somente possível como agradável. Agradeço à CAPES pelo apoio financeiro.

Obrigada Dut, essencial para a realização do último trabalho. Valeu pelas discussões e gráficos lindíssimos! À toi, Erlonzinho, qui m'a aidé tellement. Tu es très chère à moi! Devo agradecer aos meus colegas da física que sempre me distraem quando eu deveria estar trabalhando! Em especial à Deborah, sempre presente e leve e que não me deixa esquecer que a felicidade é uma escolha. Clacla, no meio dessa nossa maluquice toda você me ensina tanto sobre o carinho e a amizade! Nadja, amiga!! Minha parceira inseparável de estudos, fofocas e neuroses!! Clarinha, com quem vivo a arte mesmo os corredores gelados e feios da física! Pablitos!! O mentiroso que eu mais adoro no mundo!

Agradeço aos meus amigos “extra-curriculares”: Tati, Tiago, Tiago, Paulo, Marília, Ale, Glaucitos, meninas de Dunas, galera da música,... Às minhas duas avós, exemplo de inteligência e lucidez. Às minhas tias Rosa, Irá, Virgínia, Celina, Cândida e Fatinha e também aos meus tios, em especial Tio Benito e Rêmulô.

Ao kicolândia pela companhia e o amor. À minha irmã, Carolina, que quando quer, é a melhor das amigas. Agradeço profundamente ao Rafa, impecável na assistência pré-natal! Presente mesmo quando ausente - espero um dia poder e saber te retribuir com o impossível carinho. Ao papai que sempre acreditou na minha competência e esteve ao meu lado em absoluta-

mente todas as minhas decisões. Last, but not least, Mamae. Obrigada por me mostrar sua força, sua sensibilidade, sua feminilidade e exemplo profissional. Acima de tudo, obrigada por me lembrar sempre que sou apenas humana!

“O cientista não estuda a natureza porque ela é útil; estuda-a porque se delicia com ela, e se delicia com ela porque ela é bela. Se a natureza não fosse bela, não valeria a pena conhecê-la e, se não valesse a pena conhecer a natureza, não valeria a pena viver.”

Jules Henri Poincaré

Resumo

Apresentamos dois exemplos de tunelamento em poços de potencial duplos. O primeiro é um estudo da localização num sistema dissipativo de um corpo realizado a partir de uma analogia com um sistema de spin-1/2 num campo magnético uniforme. O segundo exemplo é uma investigação do processo de tunelamento de um condensado de Bose-Einstein num poço de potencial duplo a partir de uma hamiltoniana de muitos corpos. Apesar do modelo de dois modos não ser suficientemente realístico para um grande número de partículas ($N \geq 200$), ele aponta uma explicação para a não observação de tunelamento para certas condições iniciais completamente diferente daquela dada em *Michael Albiez et al, Phys. Rev. Lett.* **95**, 010402 (2005). Observamos uma “transição de fase” relacionada às propriedades espectrais da hamiltoniana de muitos corpos e às condições iniciais que, para um desbalanceamento de populações suficientemente grande, apresenta probabilidades de ocupação concentrada em dubletos.

Abstract

We present two examples of tunneling in double well potentials. The first is a study of the localization in a dissipative one-particle system by means of an analogy with a spin-1/2 system in a uniform magnetic field. The second example is an investigation of the tunneling process of a Bose-Einstein Condensate in a double well potential from the point of view of a many body Hamiltonian. Although the two-mode model for the process is not realistic for large enough number of particles ($N \geq 200$), for certain initial conditions, it points out a completely different explanation for the non-observation of tunneling from that given in *Michael Albiez et al, Phys. Rev. Lett.* **95**, 010402 (2005). We observe a “phase transition” related to spectral properties of the Hamiltonian and the initial conditions which, for large enough initial population imbalance, presents occupation probabilities concentrated in doublets.

CONTEÚDO

Agradecimentos	iii
Resumo	v
Abstract	vi
1 Introdução	3
2 Conceitos Fundamentais	6
2.1 O Espaço de Fock e Segunda Quantização	6
2.2 A Distribuição de Bose-Einstein	10
2.3 A Esfera de Bloch	11
2.4 Decoerência e a Forma de Lindblad	13
3 Um Modelo Simples para Tunelamento	15
3.1 O Poço Duplo	15
3.2 Um Modelo Esquemático	20
3.3 Conclusão	28
4 Condensados de Bose-Einstein	29

4.1	O que é um BEC?	29
4.2	Fótons e Átomos: Porque Fótons Não Formam Condensados .	31
4.3	Gás Ideal de Bósons numa Armadilha	33
4.3.1	Armadilhas harmônicas “Quase Unidimensionais” . . .	37
4.4	Parâmetros Relevantes e Ordens de Grandeza	38
4.5	Gás Bosônico Não Ideal Diluído	39
4.5.1	Interação efetiva simples	40
4.6	Resfriamento dos Átomos	42
4.7	Alguns Experimentos Pioneiros	44
5	Tunelamento de um Condensado de Bose-Einstein num Poço Simétrico	48
5.1	O Experimento	49
5.1.1	Montagem do poço de potencial duplo	49
5.1.2	Determinação das variáveis dinâmicas	49
5.1.3	Preparação do desbalanceamento inicial de populações	50
5.1.4	Observação de oscilações de Josephson e autoarmadilhamento	50
5.2	Descrição de Campo Médio para BECs: a Equação de Gross-Pitaevskii	53
5.3	Modelo Solúvel de Muitos Corpos para um BEC de Dois Modos	54
5.3.1	Resultados para um sistema formado por dois poços . .	57
5.3.2	Uma análise numérica.	59
5.4	Autoaprisionamento ou Longos Períodos de Tunelamento? . .	64
6	Considerações Finais	67

Introdução

*“No meio do caminho tinha uma pedra
tinha uma pedra no meio do caminho
tinha uma pedra
no meio do caminho tinha uma pedra”.*
(Carlos Drummond de Andrade)

Tunelamento de partículas massivas é uma manifestação da natureza ondulatória da matéria. No eletromagnetismo clássico, ao jogar luz num prisma de forma a obter reflexão total observa-se também uma onda evanescente. Se colocarmos outro prisma a uma pequena distância do primeiro prisma numa região onde existe a onda evanescente, essa onda é transmitida através do segundo prisma [2]. Esse fenômeno pode ser entendido como um tunelamento de ondas eletromagnéticas clássicas. A descoberta de materiais radioativos por Marie Curie no final do século *XIX* foi o embrião da teoria de tunelamento quântico. Esses materiais possuem taxas características de decaimento, ou “meia-vida” e, além disso, emissões radioativas possuem energias características. Em 1928, George Gamow [3] e, de forma independente, Ronald Gurney e Edward Condon [4, 5] compreenderam a desintegração alfa em termos da “perfuração” quântica da barreira de potencial coulombiano pela função de onda da partícula alfa de dentro do núcleo para o exterior. Gamow resolveu o potencial modelo para o núcleo e disso derivou a relação entre a meia-vida da partícula e a energia de emissão de radiação. Logo depois, esses dois grupos já começaram a se perguntar se seria possível a partícula tunelar também para dentro do núcleo. Na verdade, um ano antes dos trabalhos de Gamow com decaimento alfa, em 1927, um físico alemão chamado Friedrich Hund [6] já havia notado a possibilidade do

que ele chamava de “penetração de barreira” no cálculo do desdobramento da energia fundamental num poço de potencial duplo. Esse fenômeno aparece, por exemplo, nas transições de “inversão” da molécula de amônia (veja por exemplo ref.[7]). Nesse mesmo ano, Lothar Nordheim [8] usou a equação de Schrödinger no cálculo do coeficiente de reflexão de um elétron incidindo sobre vários tipos de interface e notou que, mesmo que tenha energia insuficiente para vencer a barreira classicamente, ele ainda poderia atravessá-la. Nordheim estendeu, ainda, o caso de tunelamento entre estados ligados para o caso de tunelamento entre estados contínuos. J. Robert Oppenheimer [9] subsequentemente calculou a taxa de ionização do hidrogênio num campo externo.

A transição de “inversão” da molécula de amônia e decaimento alfa, fenômenos estudados por Hund e por Gamow, respectivamente, são formas distintas de tunelamento. A distinção essencial entre esses dois fenômenos é que neste, a relação de fase entre as amplitudes, por estar em lados diferentes da barreira podem ser negligenciados, já que uma vez atravessada a barreira, os sistema não volta e “interfere consigo mesmo”; e naquele é crucial levar as relações de fase em conta, já que o sistema oscila coerentemente entre os dois lados da barreira. Por isso mesmo, muitos físicos chamam o tipo de tunelamento estudado por Hund de *coerência* quântica e esse será o escopo desta dissertação.

Em 1962, Brian Josephson previu o chamado “efeito Josephson” [10]. Esse fenômeno é o tunelamento coerente numa escala macroscópica num sistema descrito por duas funções de onda macroscópicas fracamente ligadas com coerência global de fase. A primeira evidência experimental desse efeito ocorreu em 1963 [11], numa “junção de Josephson” que é formada por dois supercondutores acoplados separados por uma fina barreira isolante, A descoberta do efeito Josephson abriu novos horizontes para uma larga gama de aplicações[12]. Hoje em dia junções são usadas, por exemplo, em SQUIDS (*Superconducting Quantum Interference Devices*), que permitem a medição de campos magnéticos extremamente fracos com uma resolução da ordem de 10^{-14} T. Apesar de ter sido desenvolvida no contexto de supercondutores, a teoria do efeito Josephson pode ser aplicada a todo sistema físico descrito por funções de onda macroscópicas fracamente acopladas, em particular Condensados de Bose-Einstein.

Nesta dissertação estudamos dois exemplos de tunelamento coerente em estados ligados de um poço de potencial duplo. O primeiro é um modelo esquemático onde o poço duplo é caracterizado por um spin-1/2 e um reservatório dissipativo é também levado em conta. O outro é um modelo realístico para o tunelamento num sistema de muitos corpos, baseado em observações experimentais. Em ambos os casos, enfatizamos a evolução temporal da dinâmica de tunelamento, focando nos efeitos de decoerência no primeiro caso e, no segundo caso, na importância tanto da condição inicial quanto de propriedades espectrais do sistema. Calculamos períodos de oscilações de Josephson em dois condensados de Bose-Einstein fracamente acoplados e discutiremos a aparente localização do sistema para determinadas condições iniciais.

O capítulo 2 desta dissertação é um sobrevôo por alguns conceitos fundamentais que serão usados ao longo do trabalho. No capítulo 3 nós desenvolvemos um modelo esquemático para o estudo de decoerência e localização de uma partícula num poço de potencial duplo. O capítulo 4 é dedicado aos condensados de Bose-Einstein, incluindo uma introdução histórica, uma abordagem teórica e um resumo dos principais resultados experimentais com BECs. O capítulo 5 é o estudo da dinâmica de tunelamento de um condensado de Bose-Einstein colocado num poço potencial duplo, cuja realização experimental foi feita em 2005 [1].

Conceitos Fundamentais

Neste capítulo revisaremos algumas ferramentas necessárias para a compreensão desta dissertação. As referências se encontram ao longo do texto.

2.1 O Espaço de Fock e Segunda Quantização

O espaço de Fock é um sistema algébrico usado na mecânica quântica para descrever estados quânticos com um número de partículas variável ou não conhecido. Um exemplo de um estado do espaço de Fock é

$$|\Psi\rangle = |\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n\rangle \quad (2.1)$$

descrevendo n partículas, cada uma tendo a função de onda ϕ_i . Cada ϕ_i é uma função de onda qualquer do espaço de Hilbert H para uma partícula. Quando falamos de uma partícula no estado ϕ_i é importante ter em mente que na mecânica quântica partículas idênticas são indistinguíveis, e num mesmo espaço de Fock todas as partículas são idênticas (para descrever várias espécies de partículas é só fazer o produto tensorial de espaços de Fock diferentes). Uma das características mais importantes desse formalismo é que estados são intrinsicamente simetrizados de forma que, por exemplo, se o estado acima $|\Psi\rangle$ é fermiônico, ele será zero se dois ou mais dos ϕ_i forem iguais por causa do Princípio de exclusão de Pauli. Também é importante pontuar que os estados são normalizados por construção. Uma base útil e conveniente para esse espaço é a base de número de ocupação. Se $|\Psi\rangle_i$ for uma base de H então podemos denotar o estado com n_0 partículas no estado $|\Psi\rangle_0$, n_1 partículas

no estado $|\Psi\rangle_{1,\dots, n_k}$ partículas no estado $|\Psi\rangle_k$ como

$$|n_0, n_1, \dots, n_k\rangle, \quad (2.2)$$

com cada n_i assumindo o valor 0 ou 1 para partículas fermiônicas e 0, 1, 2, ... para bósons. Tal estado é chamado estado de Fock e descreve um conjunto de partículas não interagentes em números bem definidos. O estado puro mais geral é a superposição linear de estados de Fock.

Operadores importantes nesse formalismo são os operadores $\psi_m(\vec{r})$ que são lineares mas não hermitianos e agem sobre vetores do espaço de Fock. Temos as relações de comutação

$$\begin{aligned} [\psi_m(\vec{r}), \psi_{m'}^\dagger(\vec{r}')] &= \delta_{mm'} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ [\psi_m(\vec{r}), \psi_{m'}(\vec{r}')] &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

no caso de bósons, e anticomutação no caso de férmions

$$\begin{aligned} \{\psi_m(\vec{r}), \psi_{m'}^\dagger(\vec{r}')\} &= \delta_{mm'} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ \{\psi_m(\vec{r}), \psi_{m'}(\vec{r}')\} &= 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Onde $[A, B] = AB - BA$ e $\{A, B\} = AB + BA$ e o índice m (m') identifica as diferentes partículas. É conveniente expandir a dependência de \vec{r} dos operadores de campo $\psi_m(\vec{r})$ em termos de um conjunto ortonormal e completo de funções $\phi_k(\vec{r})$, escrevendo-os sob a forma

$$\psi_m(\vec{r}) = \sum_k \phi_k(\vec{r}) a_{km}. \quad (2.5)$$

Usando as propriedades de ortonormalização das funções ϕ_k , podemos expressar os operadores a_{km} como

$$a_{km} = \int d^3r \phi_k^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}), \quad (2.6)$$

que satisfazem as relações de comutação

$$\begin{aligned} [a_{km}, a_{k'm'}^\dagger] &= \delta_{kk'} \delta_{mm'} \\ [a_{km}, a_{k'm'}] &= 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

no caso de bósons idênticos, e anticomutação no caso de férmions

$$\begin{aligned}\{a_{km}, a_{k'm'}^\dagger\} &= \delta_{kk'}\delta_{mm'} \\ \{a_{km}, a_{k'm'}\} &= 0.\end{aligned}\tag{2.8}$$

Nos dois casos, uma classe de operadores que podemos construir é a dos chamados operadores de número. A partir dos operadores de campo $\psi_m(\vec{r})$ obtemos os operadores

$$N_m = \int d^3\vec{r} \psi_m^\dagger(\vec{r})\psi_m(\vec{r}) \quad e \quad N = \sum_m N_m,$$

ou, usando (2.5) e as propriedades de ortonormalização e ϕ_k , obtemos:

$$N_{km} = a_{km}^\dagger a_{km}, \quad N_m = \sum_k a_{km}^\dagger a_{km}, \quad e \quad N = \sum_m N_m.$$

A razão desses operadores serem chamados *operadores de número* é esclarecida ao observar as relações de comutação abaixo (que valem tanto para bósons quanto para férmions)

$$\begin{aligned}[N_m, \psi_{m'}(\vec{r})] &= -\delta_{mm'}\psi_{m'}(\vec{r}), \\ [N, \psi_{m'}(\vec{r})] &= -\psi_{m'}(\vec{r}), \\ [N_m, \psi_{m'}^\dagger(\vec{r})] &= \delta_{mm'}\psi_{m'}^\dagger(\vec{r}), \\ [N, \psi_{m'}^\dagger(\vec{r})] &= \psi_{m'}^\dagger(\vec{r})\end{aligned}$$

e ainda

$$\begin{aligned}[N_{km}, a_{k'm'}] &= -\delta_{kk'}\delta_{mm'}a_{k'm'}, \\ [N_m, a_{km'}] &= -\delta_{mm'}a_{km'}, \\ [N, a_{km'}] &= -a_{km'}, \\ [N_{km}, a_{k'm'}^\dagger] &= \delta_{kk'}\delta_{mm'}a_{k'm'}^\dagger, \\ [N_m, a_{k'm'}^\dagger] &= \delta_{mm'}a_{k'm'}^\dagger, \\ [N, a_{k'm'}^\dagger] &= a_{k'm'}^\dagger.\end{aligned}$$

É importante observar que

$$N_{km}^\dagger = N_{km} \quad e \quad [N_{km}, N_{k'm'}] = 0\tag{2.9}$$

(bósons ou férmions), isso significa que tanto N_m como N são escritos como uma soma de operadores hermitianos que comutam entre si e que portanto podem ser todos diagonalizados simultaneamente. Assim, os autovalores desses operadores poderão sempre ser escritos como somas de autovalores dos N_{km} . Supondo que $|n_{km}\rangle$ seja um autovetor de N_{km} com autovalor n_{km} , segue que, se $a_{km}^\dagger |n_{km}\rangle \neq 0$,

$$\begin{aligned} N_{km} a_{km}^\dagger |n_{km}\rangle &= a_{km}^\dagger N_{km} |n_{km}\rangle + [N_{km}, a_{km}^\dagger] |n_{km}\rangle \\ &= (n_{km} + 1) a_{km}^\dagger |n_{km}\rangle \end{aligned}$$

e, se $a_{km} |n_{km}\rangle \neq 0$,

$$\begin{aligned} N_{km} a_{km} |n_{km}\rangle &= a_{km} N_{km} |n_{km}\rangle + [N_{km}, a_{km}] |n_{km}\rangle \\ &= (n_{km} - 1) a_{km} |n_{km}\rangle. \end{aligned}$$

Agora,

$$n_{km} = \langle n_{km} | N_{km} | n_{km} \rangle = \langle n_{km} | a_{km}^\dagger a_{km} | n_{km} \rangle = \|a_{km} | n_{km} \rangle\|^2 \geq 0, \quad (2.10)$$

Dessas relações decorre que os autovalores n_{km} devem ser números inteiros não-negativos, e que

$$a_{km} |n_{km} = 0\rangle = 0. \quad (2.11)$$

Esses resultados servem tanto para bósons quanto para férmions, no entanto, no caso de férmions, segue das relações de anticomutação (2.8) que $a_{km}^{\dagger 2} \equiv 0$, de modo que,

$$a_{km}^{\dagger 2} |n_{km} = 0\rangle = a_{km}^\dagger |n_{km} = 1\rangle = 0 \quad (2.12)$$

e os autovalores de N_{km} são apenas 0 e 1 no caso de férmions. Esse mesmo resultado pode ser obtido notando que, no caso de férmions, os operadores N_{km} são na realidade operadores de projeção ($N_{km}^2 = N_{km}$).

Como consequência desses fatos e da definição de N_m e de N como soma dos N_{km} , os espectros de N_m e de N consistem dos inteiros 0, 1, 2, ... Esses operadores são interpretados como associados respectivamente ao número de partículas no estado de spin m e ao total de partículas. Isso na realidade torna essa quantidade uma variável dinâmica associada a um operador no espaço de Fock, como mencionado inicialmente. O autovetor de N com autovalor zero, $|0\rangle$, corresponde ao “vácuo”. Os operadores a_{km}^\dagger e a_{km} , por sua vez, funcionam

como operadores de criação e de aniquilação de partículas. Autovetores de N_m e de N com autovalores $\nu_m > 0$, $\nu > 0$ são obtidos atuando sobre $|0\rangle$ com ν operadores de criação. No caso de férmions, esses operadores devem ser todos diferentes, já que o produto de dois operadores iguais é nulo devido à propriedade de anticomutatividade dos operadores de campo.

2.2 A Distribuição de Bose-Einstein

A estatística quântica para bósons indistinguíveis foi introduzida pelo cientista indiano Satyendra Bose [27] em 1924. Para calcular as diferentes e distinguíveis formas em que um sistema pode ser arranjado para produzir uma dada partição, primeiramente avaliamos o número de arranjos distinguíveis de n_i partículas dentre os g_i estados degenerados com energia E_i que resultam em funções de onda simétricas. Esse número de arranjos é igual ao número de maneiras nas quais n_i objetos idênticos podem ser distribuídos dentro de g_i caixas, sem definição de um limite para o número de partículas em cada caixa. O número de arranjos possíveis de partículas e divisões entre uma caixa e outra é igual ao número de permutações de $n_i + g_i - 1$ objetos, dividido por $n_i!$ (já que as partículas são indistinguíveis) e por $(g_i - 1)!$ (as divisões entre as caixas também são idênticas). Com isso, o número total de arranjos das n_i partículas dentre os g_i estados é

$$\frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}. \quad (2.13)$$

Obtemos o número total de maneiras distinguíveis de formar a partição n_1, n_2, n_3, \dots dentre os níveis de energia E_1, E_2, E_3, \dots multiplicando todas as expressões do tipo (2.13) para cada nível de energia.

$$P = \frac{(n_1 + g_1 - 1)!}{n_1!(g_1 - 1)!} \cdot \frac{(n_2 + g_2 - 1)!}{n_2!(g_2 - 1)!} \cdot \frac{(n_3 + g_3 - 1)!}{n_3!(g_3 - 1)!} = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}. \quad (2.14)$$

A partição mais provável é encontrada calculando o valor máximo de $\ln P$ já que esta tem o mesmo máximo de P e se $N \gg 1$, $\ln P! \cong P \ln P$. Ela corresponde aos números

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta E_i} - 1}. \quad (2.15)$$

Essa é a distribuição de Bose-Einstein. Aqui $1/\beta = kT$ e α é um número positivo determinado pela exigência que $\sum_i n_i = N$.

2.3 A Esfera de Bloch

Para descrever estados quaisquer no espaço de Hilbert usamos a matriz densidade ρ positiva definida por $\rho = \rho^\dagger$, $Tr(\rho) = 1$. Para estados puros $\rho^2 = \rho \Rightarrow Tr(\rho^2) = 1$ e para estados mistos $Tr(\rho^2) < 1$. No espaço de Hilbert para spins-1/2 temos os estados vetores puros descritos por

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Os observáveis possíveis são (com $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &\equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_y &\equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_z &\equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Tanto os estados mistos quanto os estados puros podem ser descritos pela matriz densidade na parametrização de Bloch ρ_1 ($\rho_1 = \rho_1^\dagger$, $Tr\rho_1 = 1$):

$$\rho_1 \equiv \begin{pmatrix} S_z & S_x + iS_y \\ S_x - iS_y & 1 - S_z \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Com $\langle \hat{S}_x \rangle = Tr(\rho \hat{S}_x) = S_x$, $\langle \hat{S}_y \rangle = Tr(\rho \hat{S}_y) = S_y$, $\langle \hat{S}_z \rangle = Tr(\rho \hat{S}_z) = S_z$. Para todo estado podemos construir um vetor $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$. O conjunto desses vetores de módulo um, que representam estados puros, formam uma esfera unitária chamada de *esfera de Bloch*. Os estados mistos, para os quais $\|\vec{S}\| < 1$ estão no interior dessa esfera.

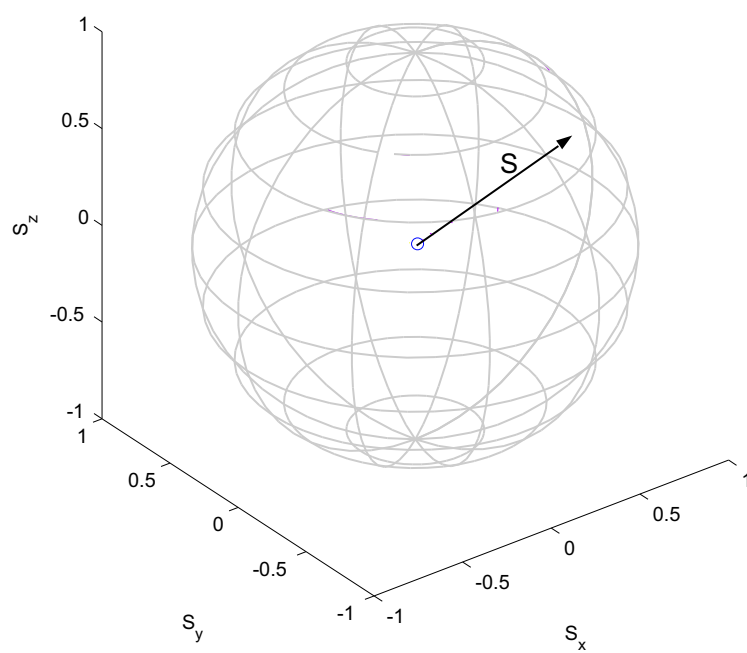


Figura 2.1: A esfera de Bloch e um vetor de Bloch \vec{S} .

2.4 Decoerência e a Forma de Lindblad

Na tentativa de compreender a fronteira da mecânica quântica com a mecânica clássica surgiram varias teorias das quais uma das mais bem sucedidas é a decoerência. Essencialmente essa teoria trata da destruição, pelo “ambiente”, da coerência entre os estados de um sistema quântico.

O princípio de superposição garante que qualquer superposição coerente de estados quânticos é também um estado quântico. Mas nem sempre isso é verdade ao se tratar de sistemas quânticos abertos nos quais a dinâmica pode evoluir de superposições para misturas estatísticas. O conjunto de todos os estados no espaço de Hilbert é enorme se comparado ao conjunto de estados em que são encontrados sistemas clássicos. Surge então a necessidade de explicar a origem desse fenômeno que impede a existência da maioria dos estados no espaço de Hilbert de alguns sistemas físicos. Daí a teoria de decoerência, e sua principal consequência: a superseleção induzida pelo ambiente.

A idéia é separar o sistema quântico global em um subsistema, constituído pelos graus de liberdade considerados relevantes, e um ambiente, constituído pelos graus de liberdade considerados irrelevantes. O ambiente emaranha com o subsistema (que de agora em diante chamaremos de o “sistema”), levando à destruição incessante de correlações de fase.

A equação diferencial que descreve a evolução temporal do operador densidade ρ , $\rho = \rho^\dagger$, $Tr(\rho) = 1$ que representa um determinado estado no espaço de Hilbert é chamada *equação mestra*. Se for uma equação independente do tempo terá a forma

$$\frac{d}{dt}\rho = \mathcal{L}(\rho). \quad (2.18)$$

\mathcal{L} é chamado de *superoperador Liouviliano*, que atua sobre ρ . A solução formal desta equação é dada por

$$\rho(t) = \exp\{\mathcal{L}t\}\rho(0). \quad (2.19)$$

Um caminho matemático para obter a equação mestra para um certo sistema quântico, é estabelecer as condições que \mathcal{L} deve satisfazer para garantir que a solução (2.19) seja de fato um operador densidade (ρ positivo, hermitiano e $Tr(\rho) = 1$). Nesse sentido há um teorema devido a Lindblad [21] em que o

autor estabelece a forma que \mathcal{L} deve ter:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{H}, \bullet] + \sum_j \{2\mathbf{L}_j \bullet \mathbf{L}_j^\dagger - \mathbf{L}_j^\dagger \mathbf{L}_j \bullet - \bullet \mathbf{L}_j^\dagger \mathbf{L}_j\}, \quad (2.20)$$

onde \mathbf{L} e \mathbf{H} são operadores quaisquer e \bullet é utilizado para indicar onde entra o operador sobre o qual \mathbf{L} está agindo, *e.g.*: $[\mathbf{H}, \bullet]\rho = [\mathbf{H}, \rho]$. Repare que, para um sistema isolado, a equação de Schrödinger para o operador densidade se escreve

$$\frac{d}{dt}\rho = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{H}, \rho], \quad (2.21)$$

ou seja, a equação (2.18), com \mathcal{L} na forma (2.20), onde todos os \mathbf{L}_j são nulos e \mathbf{H} é a Hamiltoniana livre hermitiana. Percebe-se, assim, que os operadores de Lindblad \mathbf{L}_j descrevem os efeitos do não isolamento do sistema, sendo responsáveis pelo desvio da evolução temporal daquela que seria uma evolução unitária.

A forma de Lindblad garante $Tr(\rho(t)) = 1$ e hermiticidade ao longo do tempo, mas esse teorema é essencialmente matemático e pode contemplar situações não físicas [19]. Portanto do ponto de vista físico, uma derivação do Liouvilliano em termos de aproximações que levam a essa física é sempre desejável.

No capítulo seguinte estudaremos um exemplo de aplicação da forma de Lindblad a um sistema de dois níveis acoplado a diferentes reservatórios e mostramos que os termos fora da diagonal da matriz densidade ρ se anulam para tempos longos. O sistema evolui então necessariamente para uma mistura estatística.

Um Modelo Simples para Tunelamento

De acordo com a mecânica clássica, se uma partícula for inicialmente localizada de um lado de um poço de potencial duplo, e se a sua energia for menor do que aquela da barreira central, a partícula resta eternamente daquele lado do poço. No entanto, a mecânica quântica prevê que se a barreira é finita então existe uma probabilidade não-nula da partícula passar para o outro lado da barreira, i.e. tunelar. Na verdade, se o sistema é isolado e a partícula está num nível de energia baixo então a dinâmica da partícula apresentará oscilações entre os estados localizados do lado esquerdo e direito da barreira central e em geral a partícula estará deslocalizada nos dois lados do poço.

Em contrapartida, sabemos que a coerência dos graus de liberdade que tunelam pode ser destruída quando a partícula interage e seu estado emaranha com outros (muitos) graus de liberdade, os chamados reservatórios, num efeito quântico conhecido como decoerência. Aqui apresentamos um estudo esquemático do efeito da decoerência num poço potencial duplo no qual está localizada um partícula.¹

3.1 O Poço Duplo

Considere uma partícula num potencial composto por dois poços infinitos de largura a , centrados em $x = \pm b$. A partícula tem probabilidade nula de atravessar a barreira infinita e passar de um poço para outro. Por essa razão,

¹Esse trabalho foi submetido à revista *Physica Scripta* em Julho 2006.

as energias possíveis para essa partícula não diferem daquelas possíveis para uma partícula situada num potencial que consiste num único poço:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (3.1)$$

com

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (3.2)$$

Surge uma degenerescência dos níveis de energia devido à presença de dois poços. Observe que a mesma energia E_n pode ser associada a qualquer das duas funções de onda abaixo:

$$\phi_1^n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[k_n(b + \frac{a}{2} - x)] & \text{se } b - \frac{a}{2} \leq x \leq b + \frac{a}{2} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\phi_2^n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[k_n(b + \frac{a}{2} + x)] & \text{se } b - \frac{a}{2} \leq -x \leq b + \frac{a}{2} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.4)$$

Por razões que se tornarão claras mais adiante, é conveniente passar para a representação numa outra base, formada pelos autoestados da Hamiltoniana que são funções pares ou ímpares da posição. Nesse caso nossas autofunções são as combinações lineares simétrica e antisimétrica:

$$\phi_s^n(x) = \sqrt{\frac{1}{2}}[\phi_1^n(x) + \phi_2^n(x)],$$

$$\phi_a^n(x) = \sqrt{\frac{1}{2}}[\phi_1^n(x) - \phi_2^n(x)].$$

Nos estados $|\phi_a^n\rangle$ e $|\phi_s^n\rangle$, a partícula pode ser encontrada em um ou outro poço. No que segue, nós nos limitaremos ao estado fundamental.

Imagine que a barreira separando os dois poços é abaixada até uma altura finita V_0 . Vamos procurar a forma das funções de onda da partícula nos seus primeiros níveis de energia ($E < V_0$).

Dentro dos dois poços quadrados o potencial é nulo ($V(x) = 0$). A função

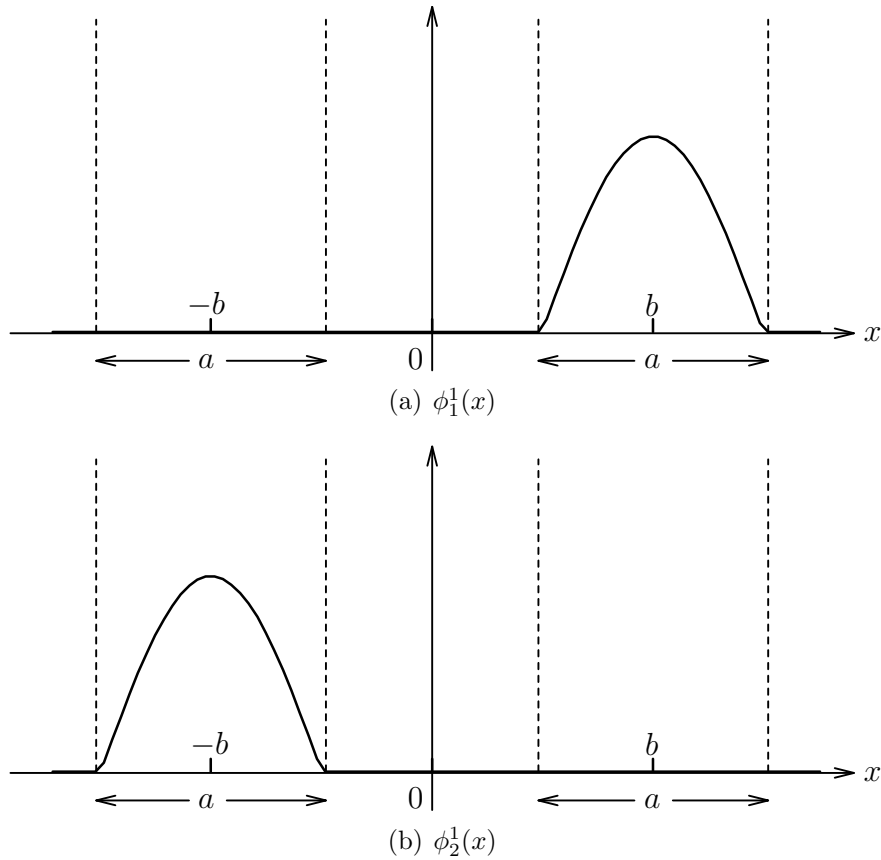


Figura 3.1: Os estados $\phi_1^1(x)$ e $\phi_2^1(x)$ são estados estacionários com a mesma energia $E_1 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$, respectivamente localizados no poço da direita e da esquerda.

de onda tem portanto a forma

$$\chi(x) = \begin{cases} A \sin[k(b + \frac{a}{2} - x)] & \text{se } b - \frac{a}{2} \leq x \leq b + \frac{a}{2} \\ A' \sin[k(b + \frac{a}{2} + x)] & \text{se } b - \frac{a}{2} \leq -x \leq b + \frac{a}{2}. \end{cases}$$

onde k está relacionada à energia E daquele nível pela relação:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.5)$$

$\chi(x)$ sempre se anula em $x = \pm(b + a/2)$ porque $V(x)$ é infinita nesses pontos. Por outro lado, já que V_0 é finito, $\chi(x)$ não é zero nos pontos $x =$

$\pm(b - a/2)$.

Mais uma vez, já que $V(x)$ é par, podemos procurar as autofunções pares, $\chi_s(x)$, e ímpares, $\chi_a(x)$, do Hamiltoniano (fig. 3.2). Aqui é fácil perceber que $A'_s = A_s$ e $A'_a = -A_a$. Os autovalores associados a χ_s e χ_a serão denotados por E_s e E_a .

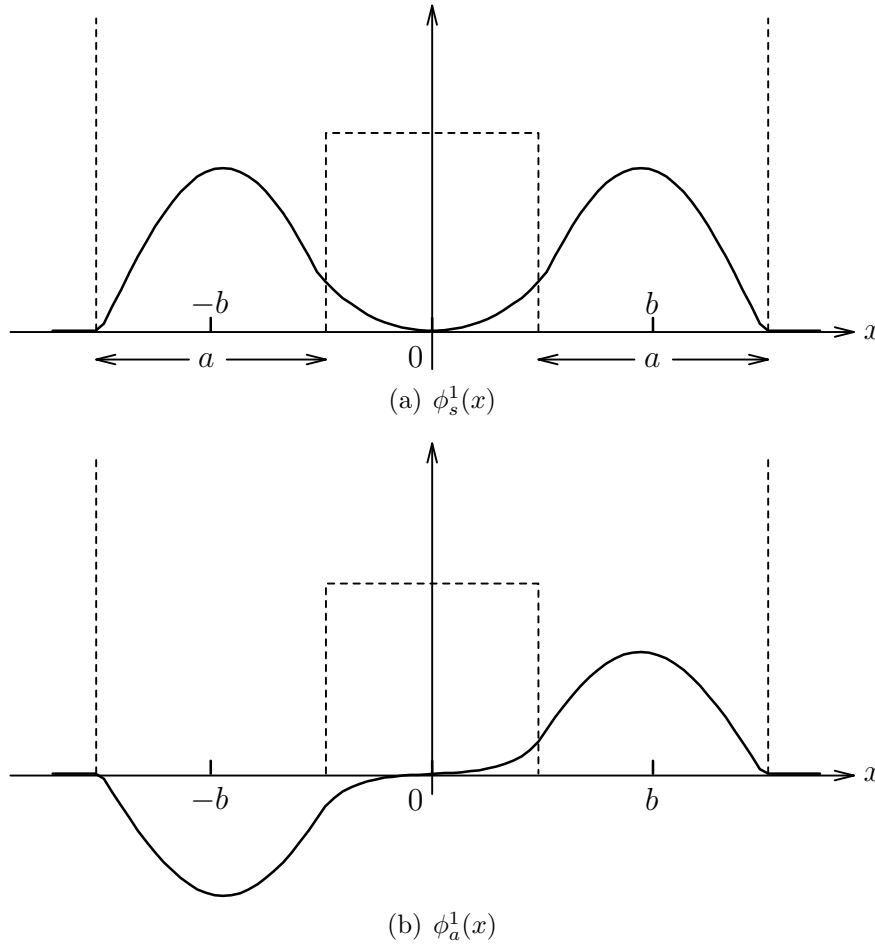


Figura 3.2: As autofunções simétrica χ_s e antissimétrica χ_a para o poço duplo com barreira central finita. Observe que as funções de onda não desaparecem no intervalo $-(b - a/2) \leq x \leq (b - a/2)$ o que implica que há uma probabilidade não-nula da partícula inicialmente localizada de um lado do poço, tunelar através da barreira.

No intervalo $-(b - a/2) \leq x \leq (b - a/2)$, a função de onda não é nula (fig.3.2), como era o caso em que a barreira central era infinita, isso ilustra que há uma probabilidade não-nula da partícula atravessar a barreira. Esse é

o fenômeno quântico chamado tunelamento. Do ponto de vista da mecânica clássica a partícula não atravessaria a barreira enquanto V_0 fosse maior que a energia da partícula. No intervalo $-(b - a/2) \leq x \leq (b - a/2)$ a função de onda é uma combinação linear das exponenciais $e^{q_{s,a}x}$ e $e^{-q_{s,a}x}$ e portanto, nesse intervalo, as funções χ_s e χ_a podem ser escritas como

$$\begin{aligned}\chi_s(x) &= B_s \cosh q_s x \\ \chi_a(x) &= B_a \sinh q_a x.\end{aligned}\tag{3.6}$$

Onde q_s e q_a são definidas em termos de $E_{s,a}$ e V_0 por

$$q_{s,a} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E_{s,a})} = \sqrt{\alpha^2 - k_{s,a}^2}\tag{3.7}$$

onde $V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$. Usando as condições de contorno em $x = \pm(b - a/2)$ encontramos

$$\begin{aligned}\tan(k_s a) &= -\frac{k_s}{q_s} \coth[q_s(b - \frac{a}{2})] \\ &= -\frac{k_s}{\sqrt{\alpha^2 - k_s^2}} \coth[\sqrt{\alpha^2 - k_s^2}(b - \frac{a}{2})]\end{aligned}\tag{3.8}$$

$$\begin{aligned}\tan(k_a a) &= -\frac{k_a}{q_a} \tanh[q_a(b - \frac{a}{2})] \\ &= -\frac{k_a}{\sqrt{\alpha^2 - k_a^2}} \tanh[\sqrt{\alpha^2 - k_a^2}(b - \frac{a}{2})]\end{aligned}\tag{3.9}$$

Essas equações podem ser resolvidas graficamente. Um dado número de raízes são encontradas: $k_s^1, k_s^2, \dots, k_a^1, k_a^2, \dots$. A raiz k_s^1 é diferente de k_a^1 já que as duas equações transcendentais são distintas: as energias E_s^n e E_a^n são portanto diferentes. Se deixarmos $\alpha \rightarrow \infty$ em (3.8) e (3.9), somos levados a $\tan(k_{s,a} a) = 0$ e $k_{s,a}^n \rightarrow n\pi/a$ que é o valor encontrado em (3.2). Isso significa que quando V_0 se torna muito grande, E_s^n e E_a^n ambas aproximam das energias possíveis no poço de potencial infinito. Note que quanto mais V_0 excede E_n , mas perto ficam as duas energias E_s^n e E_a^n .

Note então que o fato de termos obtido duas equações transcendentais diferentes para as energias E_a e E_s mostra que a possibilidade de tunelamento remove a degenerescência dos primeiros níveis de energia do poço du-

plo, dando origem a dubletos (E_s^1, E_a^1) , (E_s^2, E_a^2) . Já que o dubleto (E_s^1, E_a^1) tem menor energia, $|E_s^1 - E_a^1| < |E_s^2 - E_a^2|$. Então, se a barreira V_0 é alta ($E_s^n, E_a^n \ll V_0$ para n pequeno) então a separação entre dubletos vizinhos ($|E_s^{n+1} - E_s^n|$) é muito maior que a separação de energia entre os dois níveis de cada dubleto. Isso nos permite tratar separadamente cada dubleto como um sistema de dois níveis. Aqui trataremos o primeiro dubleto como um sistema de dois níveis e desconsideraremos os outros níveis de energia do poço duplo.

Repare que, se o sistema é isolado, a dinâmica da partícula armadilhada apresenta oscilações entre os estados localizados do lado esquerdo e direito da barreira central e em geral a partícula ficará deslocalizada dos dois lados da barreira. Aqui estudaremos esquematicamente o que acontece se o sistema não é isolado, i.e. que efeito tem o acoplamento do sistema com um ambiente na dinâmica de uma partícula num poço potencial duplo.

3.2 Um Modelo Esquemático

Retornemos ao poço duplo. De agora em diante, consideraremos somente o primeiro dubleto do espectro do poço e faremos uma analogia desse sistema de dois níveis com uma partícula de spin-1/2 precessando em torno de um campo magnético [7]. Existem infinitas maneiras de construir essa analogia. Escolheremos associar a cada lado do poço os autoestados $| - x \rangle$ (lado esquerdo do poço) e $| + x \rangle$ (lado direito do poço) da componente S_x do spin. Nesse caso, os estados estacionários simétrico e antisimétrico, dados respectivamente por $|s\rangle = | + x \rangle + | - x \rangle / \sqrt{2}$ e $|a\rangle = | + x \rangle - | - x \rangle / \sqrt{2}$, serão associados aos autoestados de S_z ($\sigma_z = |s\rangle\langle s| - |a\rangle\langle a|$). O movimento oscilatório da partícula através da barreira central, o que é nada mais que uma sucessão de interferências construtivas e destrutivas das funções de onda simétrica e antissimétrica, pode ser associada à precessão desse spin-1/2 fictício em torno de um campo magnético uniforme paralelo ao eixo O_z , com frequência $\omega = \frac{|E_{0s} - E_{0a}|}{\hbar}$. A dinâmica desse sistema isolado é então descrita pela Hamiltoniana $H = -\frac{\omega}{2}\sigma_z$.

Considerado como um sistema quântico aberto, a evolução da partícula de spin-1/2 pode ser descrita por uma equação mestra de Lindblad (Eq.2.20):

$$\dot{\rho} = -i\frac{\omega}{2}[\sigma_z, \rho] - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \{ \Gamma_k^\dagger \Gamma_k \rho + \rho \Gamma_k^\dagger \Gamma_k - 2\Gamma_k \rho \Gamma_k^\dagger \}, \quad (3.10)$$

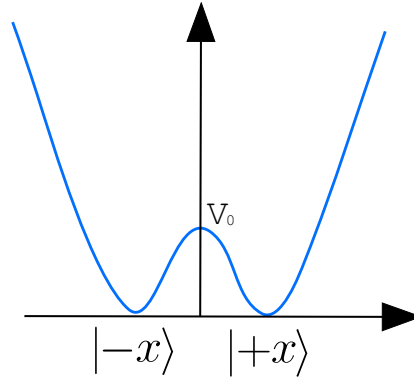


Figura 3.3: O poço duplo simétrico. Nós associamos cada lado da barreira de potencial pela qual a partícula pode tunelar com os autoestados da componente de spin S_x .

Podemos associar flutuações aleatórias na altura ou largura da barreira, com preservação de simetria, a um reservatório de fase, o sistema de spin representado por $\Gamma_1 = \sqrt{k_1}\sigma_z$, lembrando que σ_z é a matriz de Pauli

$$\sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Justificamos essa associação com o seguinte argumento: pequenas flutuações na dimensão da barreira não mudam os autoestados do sistema. Elas resultam unicamente em variações na frequência ω , causando defasagem entre os estados simétrico e antissimétrico, o que caracteriza um reservatório de fase. Na analogia com o campo magnético, essas flutuações na barreira correspondem a flutuações no campo B_z , mantendo fixos $B_x = 0$ e $B_y = 0$.

Outra fonte de decoerência pode ser associada a flutuações na posição da barreira dentro do poço. Um ligeiro deslocamento na posição da barreira resulta em novos autoestados para o sistema. Estes podem ser obtidos através de combinações lineares dos autoestados do poço duplo simétrico. Na analogia com o campo magnético, o processo inteiro pode ser descrito como uma pequena flutuação B_x , por exemplo. Podemos associar esse fenômeno com um reservatório tipo *spin-flip* descrito por $\Gamma_2 = \sqrt{k_2}\sigma_x$, onde σ_x é a matriz de Pauli

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Primeiro vamos considerar apenas o reservatório de fase Γ_1 , i.e. as flutuações simétricas nas dimensões da barreira central. A equação mestra descrevendo a evolução do sistema é:

$$\dot{\rho} = -i\frac{\omega}{2}[\sigma_z, \rho] - k_1(\rho - \sigma_z \rho \sigma_z), \quad (3.11)$$

já que $\sigma_z = \sigma_z^\dagger$ e $\sigma_z^2 = 1$. Para resolver a equação mestra acima nós consideramos a parametrização de Bloch

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + S_z(t) & S_x(t) + iS_y(t) \\ S_x(t) - iS_y(t) & 1 - S_z(t) \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

com a condição inicial de um estado puro qualquer (spin numa direção arbitrária).

$$\rho(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Inserindo (3.12) em (3.11) obtemos as equações de movimento para S_x , S_y e S_z :

$$\begin{aligned} \dot{S}_x &= -2k_1 S_x + \omega S_y, \\ \dot{S}_y &= -\omega S_x - 2k_1 S_y, \\ \dot{S}_z &= 0. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Como poderíamos esperar, o reservatório de fase preserva a componente S_z do spin, o que significa que os autoestados de S_z são soluções estacionárias da equação (3.11). A solução para a equação mestra (3.11) é dada por

$$\begin{aligned} S_x(t) &= e^{-2k_1 t}(A \cos \omega t + B \sin \omega t), \\ S_y(t) &= -e^{-2k_1 t}(A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)), \\ S_z(t) &= C, \end{aligned} \quad (3.15)$$

com as constantes A , B e C determinadas pelo estado inicial. A matriz densidade dependente do tempo é dada por

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta e^{-2(k_1+i\omega)t} \\ e^{i\phi} \sin \theta e^{-2(k_1-i\omega)t} & 1 - \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Por exemplo, vamos considerar o estado inicial $|+x\rangle$, i.e. $\theta = \pi/2$ e $\phi = 0$, o que corresponde a uma superposição dos autoestados simétrico e anti-simétrico do poço. Nesse caso, a partícula está inicialmente localizada do lado esquerdo da barreira. Note, no entanto, que a localização da partícula deve ser vista como uma interferência construtiva das soluções simétrica e antisimétrica do potencial. Note ainda que uma vez que o sistema evolui no tempo, a partícula tunela através da barreira e a probabilidade de encontrá-la do lado esquerdo do poço será dada por:

$$\begin{aligned} P_l(t) &= \text{Tr}\{\rho(t)|+x\rangle\langle+x|\} \\ P_l(t) &= \frac{1}{2} [1 + e^{-2k_1 t} \cos(\omega t)]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

No processo de decoerência o sistema de interesse emaranha com o reservatório, estabelecendo correlações quânticas com o mesmo e perdendo suas coerências internas. Uma medida desse emaranhamento do sistema com o reservatório e sua subsequente perda de coerência é a pureza do sistema ζ , que aqui evolui no tempo de acordo com a equação:

$$\zeta = 2\text{Tr}\rho^2(t) - 1 = e^{-4k_1 t}. \quad (3.18)$$

A probabilidade acima mostra que a partícula oscila entre os dois poços, mas tende assintoticamente a se localizar, agora no sentido clássico do termo, com igual probabilidade de estar à direita ou à esquerda da barreira central.

$$P_l(\infty) = P_r(\infty) = 1/2. \quad (3.19)$$

Por localização clássica nós entendemos que o estado inicial puro é convertido numa mistura estatística, i.e. não é mais possível observar interferência no sistema.

Note que para um ângulo arbitrário θ , a matriz densidade em $t \gg k_1^{-1}$ tende novamente para uma mistura estatística dos estados $|+z\rangle$ e $|-z\rangle$, mas agora com populações diferentes:

$$\rho(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & 0 \\ 0 & 1 - \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Esse resultado era esperado dado que o reservatório de fase afeta somente a

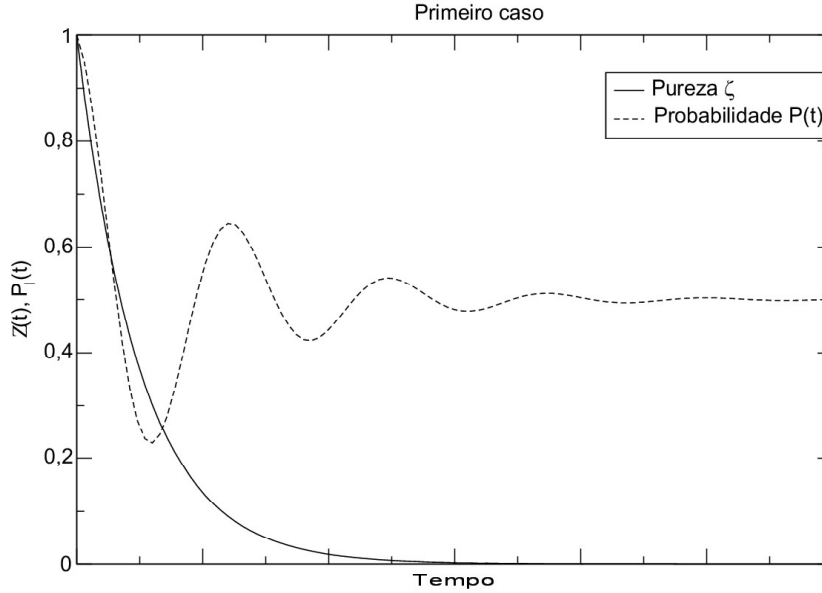


Figura 3.4: O sistema acoplado a um reservatório σ_z : A perda de pureza do sistema e a probabilidade ($P_l(t) = \frac{1}{2} [1 + e^{-2k_1 t} \cos(\omega)]$) da partícula ser encontrada do lado esquerdo do poço, dado que esta seja também a condição inicial ($\theta = \frac{\pi}{2}$ e $\phi = 0$). Dados $k_1 = 1$ e $\omega = 10$. Note que a pureza ($\zeta = 2\text{Tr}\rho^2(t) - 1 = e^{-4k_1 t}$) do sistema tende a zero, indicando perda de coerência, que a probabilidade tende a $1/2$, indicando localização.

coerência do estado quântico, i.e., preserva as populações originais do estado quântico na base σ_z .

A esfera de Bloch ajuda a ter uma maior compreensão visual desses efeitos (veja a figura (3.5)). Primeiro, devemos nos lembrar que o vetor de Bloch representa um operador densidade e portanto pode ser visto como uma média de ensemble em realizações com estados puros. O sistema isolado, i.e. sem dissipação, implicaria em trajetórias circulares com componente z constante e velocidade de evolução constante. O reservatório de fase induz flutuações na velocidade de evolução do vetor e então as componentes x e y do vetor de Bloch decaem exponencialmente. Para tempos longos (comparado a

k_1^{-1}) o vetor estará muito próximo da projeção do estado inicial no eixo O_z .

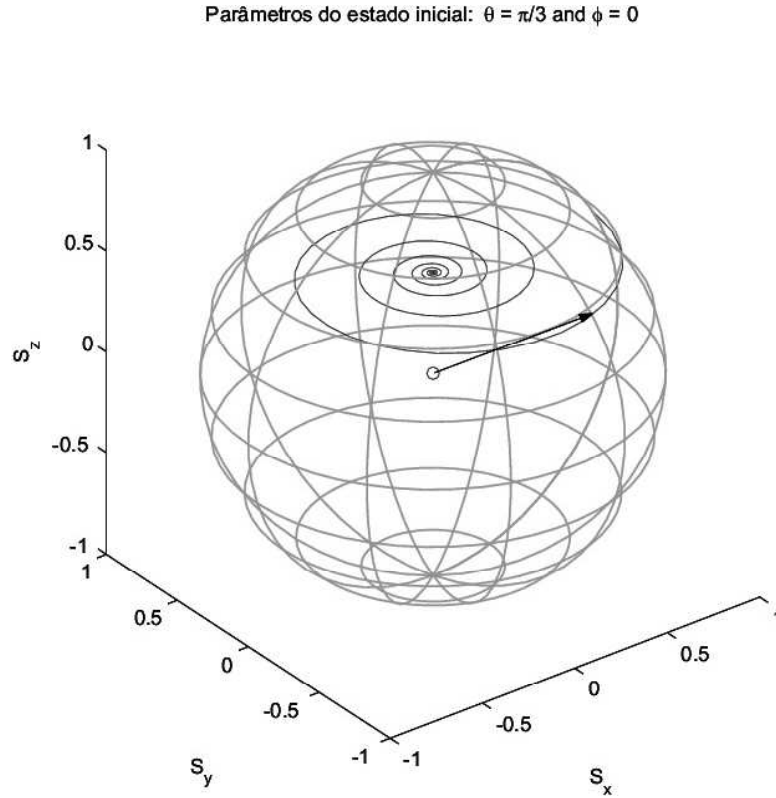


Figura 3.5: Um diagrama esquemático de um vetor de Bloch evoluindo dentro de uma esfera de Bloch para uma condição inicial definida pelos ângulos θ e ϕ . Somente as componentes x e y do vetor de Bloch são afetadas pelo reservatório. A componente z é preservada e, no limite assintótico, o vetor de Bloch tende à projeção do estado inicial no eixo O_z .

É interessante observar que existem dois estados que não são afetados pelo reservatório. Os estados $|+z\rangle$ e $|-z\rangle$ são estados que não perdem pureza.

Em seguida vamos considerar o sistema acoplado a um reservatório tipo *spin-flip*, o que corresponde, nessa analogia, a variações aleatórias na posição da barreira dentro do poço (i.e. uma perturbação que não conserva simetria). A equação mestra correspondente é dada por:

$$\dot{\rho} = -i\frac{\omega}{2}[\sigma_z, \rho] - k_2\{\rho - \sigma_x\rho\sigma_x\}, \quad (3.21)$$

já que $\sigma_x = \sigma_x^\dagger$ e $\sigma_x^2 = 1$. Nesse caso, as equações de movimento para S_x , S_y e S_z são:

$$\begin{aligned}\dot{S}_x &= \omega S_y, \\ \dot{S}_y &= -2k_2 S_y - \omega S_x, \\ \dot{S}_z &= -2k_2 S_z.\end{aligned}\tag{3.22}$$

A solução para a equação (3.21) é:

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + e^{-2k_2 t} \cos \theta & c^*(t) \\ c(t) & 1 - e^{-2k_2 t} \cos \theta \end{pmatrix},\tag{3.23}$$

com

$$c(t) = \text{sen}(\theta) e^{-k_2 t} \left[e^{-i\phi} \cos(\epsilon t) + \frac{\text{sen}(\epsilon t)}{\epsilon} (k_2 e^{i\phi} - i\omega e^{-i\phi}) \right],$$

onde $\epsilon = k_2^2 - \omega^2$. Novamente a interação com o reservatório destrói a coerência quântica do estado inicial, e o estado final ($k_2 t \gg 1$) é uma mistura estatística. Como antes, o estado assintótico é localizado no sentido clássico (estatístico) da palavra.

Se o sistema é inicialmente preparado no estado $|+x\rangle$ ($\theta = \pi/2, \phi = 0$), uma vez que ele evolui no tempo, a partícula atravessa a barreira e a probabilidade de encontrá-la do lado esquerdo do poço será dada por

$$P_l(t) = \frac{1}{2} (1 + e^{-k_2 t}) \left(\cos \epsilon t + \frac{k_2}{\epsilon} \sin \epsilon t \right),\tag{3.24}$$

e a pureza ζ do sistema evolui no tempo de acordo com

$$\zeta = 2\text{Tr}\rho^2(t) - 1 = |c(t)|^2 - 1.\tag{3.25}$$

Ao observar a evolução temporal da pureza do estado (figure 3.6) percebemos claramente duas dinâmicas distintas. Nas redondezas de períodos inteiros e semi-inteiros (indicados por linhas verticais na figura (3.6)), quando a partícula tem grande probabilidade de ser encontrada em um lado do poço, a curva da pureza do estado apresenta *plateaux*, indicando que a perda de pureza é mais lenta nesses momentos. sendo maior a perda nos momentos em que a partícula estaria “atravessando” a barreira.

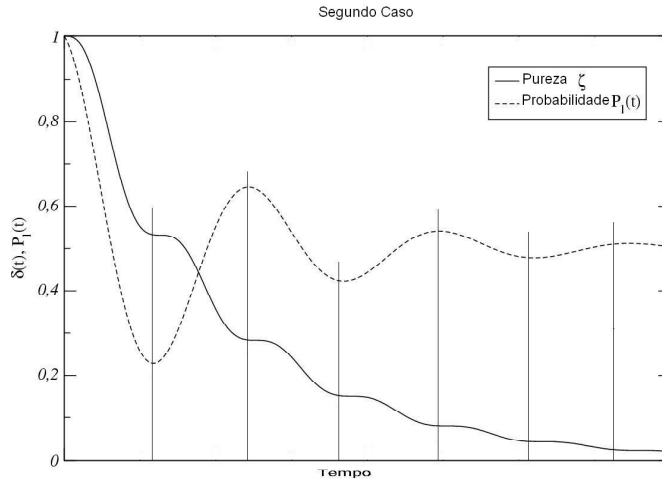


Figura 3.6: O sistema acoplado ao reservatório σ_x : a pureza ζ do sistema e a probabilidade de encontrar a partícula do lado esquerdo do poço ($P_l(t) = \frac{1}{2} (1 + e^{-k_2 t}) (\cos \epsilon t + \frac{k_2}{\epsilon} \sin \epsilon t)$) dado o estado inicial $\theta = \frac{\pi}{2}$ and $\phi = 0$. Aqui usamos $k_2 = 1$ e $\omega = 10$. Percebemos duas dinâmicas distintas na curva $\zeta = e^{-2k_2 t} [(\cos \epsilon t + \frac{k_2}{\epsilon} \sin \epsilon t)^2 + \frac{\omega^2}{\epsilon^2} \sin^2 \epsilon t]$. O *plateau* ocorre em momentos em que o sistema tem grande probabilidade de ser encontrado em um dos lados do poço, indicados pelas linhas verticais na figura (esse são tempos próximos a um número inteiro ou semi-inteiro de períodos de tunelamento).

Note que novamente o acoplamento faz variar o eixo de rotação do vetor de Bloch dentro da esfera de Bloch (figura 3.7). No limite assintótico ($k_2 t \gg 1$) todos os pontos são igualmente prováveis e o vetor de Bloch tende ao centro da esfera.

Para $\omega \gg k_2$, os estados $|\pm z\rangle$ são os mais robustos, mas nesse caso não há vetor que seja rigorosamente preservado na evolução temporal. As flutuações na posição da barreira induzem rotações aleatórias em torno do eixo O_x de modo que quando a partícula está localizada de um lado do poço (o vetor de Bloch está alinhado com o eixo O_x) ela fica *momentaneamente* imune ao reservatório. Isso significa que o reservatório tipo *spin-flip* tenderia a manter os estados $|\pm x\rangle$ constantes, mas a evolução unitária os “tira” do eixo O_x , e eles passam então a ser afetados pelo reservatório, sofrendo decoerência

(figura 3.7).

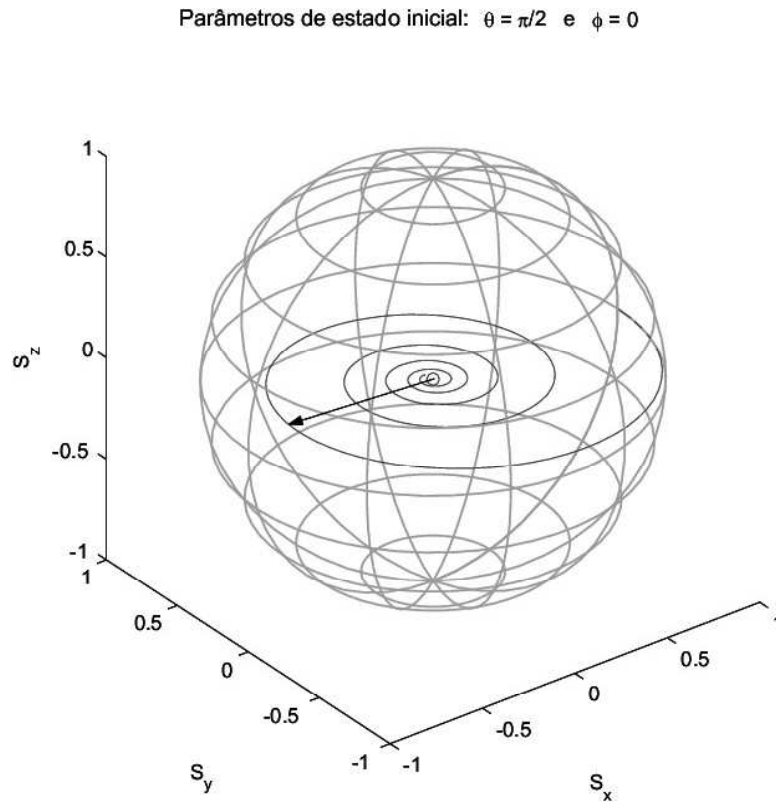


Figura 3.7: Quando o sistema é acoplado a um reservatório tipo spin-flip, não há qualquer vetor de Bloch que permaneça fixo. Aqui mostramos um dos estados ponteiro, alinhado com o eixo O_x . Mesmo esse estado não é completamente preservado porque ele é arrancado do seu eixo original pela evolução unitária o tornando vulnerável ao reservatório.

3.3 Conclusão

Neste capítulo desenvolvemos um modelo esquemático para analisar decoerência num sistema de dois níveis num potencial externo tipo poço duplo. Através da analogia com um spin-1/2 precessando num campo magnético, encontramos a dinâmica da matriz densidade acoplada a dois reservatórios difusivos diferentes. Em ambos os casos a decoerência localiza o sistema e não apresenta mais dinâmica oscilatória entre os dois lado do poço de potencial duplo.

Condensados de Bose-Einstein

4.1 O que é um BEC?

O trabalho que deu origem aos condensados de Bose-Einstein (BEC) foi escrito por Satyendra Bose [27] em 1924, com tradução para o alemão por Albert Einstein. Havia uma nota do tradutor que dizia que em sua opinião tratava-se de “uma contribuição de peso, que fornece também uma teoria quântica dos gases ideais”. O título do trabalho de Bose “A fórmula de Planck e a hipótese dos quanta de luz” já indica que o assunto tratado é a radiação de corpo negro. Bose usa as ideias da mecânica estatística aplicadas diretamente aos quanta de luz. O que Einstein fez em seguida foi estender o tratamento a um sistema de partículas livres. O fenômeno de condensação de Bose-Einstein é consequência da estatística quântica que nasce da indistinguibilidade de partículas idênticas e da conservação do número de partículas.

Do ponto de vista clássico podemos pensar num gás ideal de partículas livres a uma temperatura alta como sendo formado por partículas que são como bolas de gude. Elas se deslocam entre as paredes do frasco e ocasionalmente colidem-se. Por outro lado, se usamos a hipótese de de Broglie na qual partículas são ondas de matéria, então temos que pensar nas partículas em termos de pequenos *pacotes de onda*, cujo tamanho é dado aproximadamente pelo comprimento de onda de de Broglie, λ_{dB} . Esse comprimento de onda é relacionado à velocidade térmica das partículas por $\lambda_{dB} = \hbar/mv$, onde m é a massa das partículas e \hbar é a constante de Planck. Enquanto a temperatura é alta, os pacotes de onda são muito pequenos, e o conceito de indistinguibilidade é irrelevante porque ainda podemos seguir a trajetória individual de cada pacote de onda e usar conceitos clássicos. No entanto, quanto mais frio

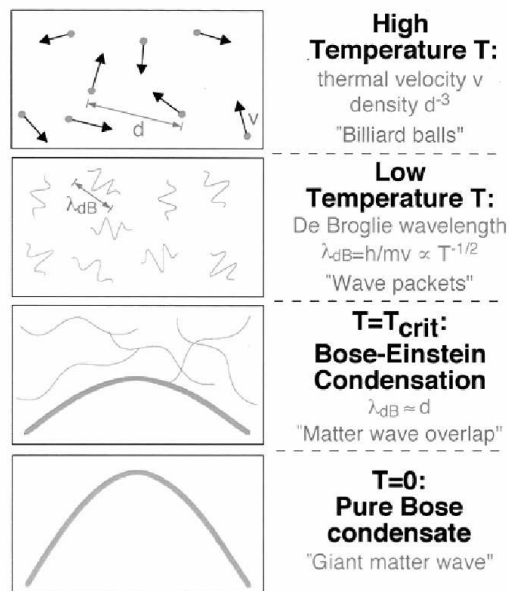


Figura 4.1: Condensados de Bose-Einstein ocorrem quando o comprimento de onda de de Broglie dos átomos se torna maior que seu espaçamento médio. *Figura extraída de <http://online.itp.ucsb.edu/online/lecture/ketterle/>.*

o gás menor a velocidade das partículas que o compõem e, portanto, maior o comprimento de onda de de Broglie associado a elas. Quando pacotes de onda individuais se sobrepõem fica impossível seguir trajetórias individuais até o ponto em que é formada uma única grande onda de matéria (veja figura 4.1).

É esse o raciocínio básico por trás dos trabalhos escritos por Einstein a partir do trabalho do Bose de 1924. Além disso, a grande diferença entre o gás de fótons, estudado por Bose, e o gás de partículas, estudado por Einstein, é que esse último conserva o número de partículas, o que obrigou Einstein a modificar a dedução de Bose para introduzir essa condição, responsável, em última análise, pela condensação. Einstein desenvolveu três artigos [28, 29, 30] e previu que quando o comprimento de onda de de Broglie é comparável ao espaçamento entre partículas, há uma transição de fase. As partículas

se juntam num único estado quântico e se comportam como uma grande onda de matéria. A indistinguibilidade quântica de partículas idênticas é a chave desse raciocínio. A transição de fase prevista por Einstein acontece em sistemas formados por bósons. No caso de férmions o princípio de exclusão de Pauli garante que as partículas jamais ocuparão o mesmo estado quântico, o que faz com que o gás de férmions tenha um comportamento completamente distinto daquele do gás bosônico.

Para obter um BEC é necessário que o gás de bósons seja resfriado a densidade constante. Mas por muito tempo os físicos acreditaram que seria impossível formar um BEC porque o sistema iria congelar antes da formação do condensado gasoso. Num diagrama de fases geralmente não há lugar para BEC entre as fases gasosa, líquida e sólida da substância. Por muito tempo os cientistas acreditaram que sua única manifestação poderia ser no hélio líquido. Entretanto, o fato de lidar com um líquido, e não um gás, exigiu grandes modificações dos conceitos simples introduzidos por Einstein. A solução que os físicos encontraram para esse impasse foi abrir mão da completa estabilidade térmica. Se pegarmos uma substância bastante diluída, ao resfriar o sistema, os átomos demoram para se agrupar e formarem um sólido. Por um certo tempo tem-se um gás atômico frio metaestável que dura cerca de dez segundos ou até minutos. Depois disso o condensado dá lugar a um sólido. Usando então gases bastante diluídos de átomos alcalinos foi possível observar pela primeira vez a condensação de Bose-Einstein em 1995 com um grupo em Boulder e o outro no MIT [31, 32]. Essas primeiras observações abriram enorme espaço para atividades experimentais e teóricas com sistemas de muitos corpos a baixas temperaturas.

4.2 Fótons e Átomos: Porque Fótons Não Formam Condensados

“Cierro los ojos y veo una bandada de pájaros. La visión dura un segundo o acaso menos; no sé cuántos pájaros vi. ¿Era definido o indefinido su número? El problema involucra el de la existencia de Dios. Si Dios existe, el número es definido, porque Dios sabe cuantos pájaros vi. Si Dios no existe, el número es indefinido, porque nadie pudo llevar la cuenta. En tal caso, vi menos de diez pájaros (digamos) y más de uno, pero no vi nueve, ocho,

ciete, ceis, cinco, quatro, tres o dos pájaros. Vi un número entre diez y uno que no es nueve, ocho, siete, seis, cinco, etcétera. Ese número entero es inconcebible; ergo, Dios existe.” (J. L. Borges, *Argumentum Ornithologicum*).

A distribuição de Bose-Einstein encontrada na sessão 2.2,

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta E_i} - 1} \quad (4.1)$$

relativa a partículas indistinguíveis é bastante parecida com a fórmula de Planck do espectro de corpo negro para radiação eletromagnética.

$$P(\varepsilon) \propto \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (4.2)$$

onde a energia do fóton $\varepsilon = h\nu$ é expressa pela frequência ν da radiação e a constante de Planck h . (Foi omitido o número de modos por intervalo de energia, nos deixando simplesmente com a população de um estado quântico). Na equação (4.1), $1/\beta = kT$ e $\alpha = -\mu/kT$ é um número positivo determinado pela exigência que $\sum_i n_i = N$, constante. A quantidade μ (que tem dimensões de energia) corresponde ao que se chama *potencial químico*, um parâmetro que garante a conservação do número total de partículas.

A diferença entre a fórmula de Planck e a estatística de Bose-Einstein é exatamente no valor de μ que na primeira é zero. Isso expressa, que diferentemente do caso de partículas massivas, não há conservação do número de fótons. Bose, no seu trabalho de 1924 [27], deduziu o espectro de corpo negro de Planck combinando as naturezas ondulatória e corpuscular da luz. Em seguida, Einstein usou a hipótese de de Broglie para generalizar o tratamento de Bose para partículas massivas [28], colocando a exigência de conservação do número de partículas através da introdução do parâmetro adicional μ . A ocupação média das células do espaço de fases $\langle n_i \rangle$ pode ser escrita em termos do potencial químico como

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} - 1}. \quad (4.3)$$

Observe que a expressão (4.3) revela uma limitação importante sobre μ : como $\langle n_i \rangle$ não pode ser negativo, é preciso que $(E_i - \mu)/kT > 0$, ou seja,

$E_i > \mu$ para todos os E_i . Em outras palavras, o potencial químico μ deve ser menor que a menor energia possível do sistema. Quanto mais μ tiver que se aproximar do menor E_i , mais a ocupação média das células correspondentes será favorecida com relação às demais. O mecanismo numérico por trás da condensação de Bose-Einstein é, a partir desse ponto de vista, o favorecimento extraordinário da ocupação média das células de menor energia quando, para acomodar o número prescrito N de bósons, é preciso que μ se aproxime drasticamente desse limite superior. Se N não for definido, como é o caso de fótons, esse argumento falha e não há transição de fase.

4.3 Gás Ideal de Bósons numa Armadilha

No que segue, um gás tridimensional de átomos bosônicos, que por enquanto são assumidos não-interagentes, é descrito no formalismo do ensemble grande canônico. Os átomos são armadilhados num potencial externo $V(\vec{r})$ e ocupam os estados de uma partícula da armadilha com energias E_i . A ocupação desses estados é dada pela função distribuição de Bose (4.3). O número total de átomos nos estados excitados pode ser escrito como

$$N - N_0 = \int \frac{\rho(E_i)dE_i}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} - 1} \quad (4.4)$$

onde $\rho(E)$ é a densidade de estados do gás atômico armadilhado no potencial externo $V(\vec{r})$.

Agora, a hamiltoniana segundo-quantizada para bósons não-interagentes num potencial externo $V(\vec{r})$ pode ser escrita como

$$H = \sum_n E_n a_n^\dagger a_n. \quad (4.5)$$

Onde os operadores a_n^\dagger , a_n são os operadores de criação e aniquilação associados a $\phi_n(\vec{r})$ (veja sessão 2.1). As energias E_n são os autovalores associados às autofunções $\phi_n(\vec{r})$ normalizadas e estacionárias de uma partícula na armadilha

$$-\frac{\hbar^2 \Delta^2 \phi_n(\vec{r})}{2M} + V(\vec{r})\phi_n(\vec{r}) = E_n \phi_n(\vec{r}) \quad (4.6)$$

Repare que o grau de liberdade de spin foi ignorado nessa formulação,

o que é uma aproximação razoável não somente para bósons sem spin, mas também para bósons com spin porém restritos a um subestado magnético definido, como é o caso de armadilhas magnéticas.

O operador número nesse arranjo é dado por

$$N = \sum_n a_n^\dagger a_n \quad (4.7)$$

e o operador densidade grande-canônico tem a forma

$$\rho = \prod_n \frac{e^{-\frac{1}{k_B T}(E_n - \mu)a_n^\dagger a_n}}{\left(1 - e^{-\frac{E_n - \mu}{k_B T}}\right)^{-1}}. \quad (4.8)$$

Novamente repare que a convergência da série impõe que $E_n - \mu > 0$ para todo n , o que implica que o limite superior E_0 para o potencial químico μ . A temperaturas altas o potencial químico é grande e negativo. Quando o gás atômico é resfriado, μ aproxima a energia do estado fundamental E_0 até que, a uma temperatura crítica T_c , μ se torna igual a E_0 . Nesse caso, o número máximo de átomos nos estados excitados se torna limitado e a ocupação do estado fundamental N_0 se torna uma fração macroscópica do número total de átomos N . No limite $T \rightarrow 0$ todos os átomos estão no estado fundamental do potencial externo e ocorre a condensação de Bose-Einstein. No que segue, definimos a escala de energia $E_0 \equiv 0$, de forma que devemos ter $-\infty < \mu < 0$.

Como foi mencionado na sessão anterior o valor de μ é determinado pelo número total fixo de partículas. Para esse efeito temos que avaliar

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \sum_n \langle N_n \rangle, \\ \langle N_n \rangle &= \frac{e^{-\beta(E_n - \mu)}}{1 - e^{-\beta(E_n - \mu)}} \equiv \frac{ze^{-\beta E_n}}{1 - ze^{-\beta E_n}}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde a *fugacidade* foi introduzida ($z = e^{\beta\mu}$). Pelos limites inferior e superior para o potencial químico μ , segue que, na escala de energia escolhida, $0 < z < 1$. Para uma dada temperatura T , o valor da fugacidade deve ser determinado usando a condição subsidiária que fixa o número total de partículas, já que ele determina o potencial químico naquela temperatura. A ocupação média do menor estado de uma partícula da armadilha pode ser escrito em termos

da fugacidade como

$$N_0 = \frac{z}{1-z}. \quad (4.10)$$

A determinação do potencial químico μ ou da fugacidade z envolve o espectro de uma partícula E_n e portanto requer a especificação do potencial armadilhador $V(\vec{r})$. Uma escolha simples, mas certamente “realística” é aquela de um potencial harmônico anisotrópico

$$V(\vec{r}) \approx \frac{M}{2}(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \quad (4.11)$$

que leva ao espectro

$$\begin{aligned} E_n \approx e_{n_1 n_2 n_3} &= \hbar\omega_1 n_1 + \hbar\omega_2 n_2 + \hbar\omega_3 n_3, \\ n_i &= 0, 1, 2, \dots \quad i = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Por razões numéricas é conveniente escrever $\langle N_n \rangle$ usando a fórmula para a soma de uma série geométrica

$$\langle N_n \rangle = \frac{ze^{-\beta E_n}}{1 - ze^{-\beta E_n}} = ze^{-\beta E_n} \sum_{\nu=0}^{\infty} z^\nu e^{-\beta \nu E_n} = \sum_{\nu=1}^{\infty} z^\nu e^{-\beta \nu E_n} \quad (4.13)$$

de forma que nossa escolha do potencial armadilhador possui

$$\langle N_{n_1 n_2 n_3} \rangle = \sum_{\nu=1}^{\infty} z^\nu \exp\left(-\nu n_1 \frac{\hbar\omega_1}{kT} - \nu n_2 \frac{\hbar\omega_2}{kT} - \nu n_3 \frac{\hbar\omega_3}{kT}\right). \quad (4.14)$$

O número total médio de partículas é então [34]

$$\langle N \rangle = \sum_{n_1, n_2, n_3=0}^{\infty} \langle N_{n_1 n_2 n_3} \rangle = \sum_{\nu=1}^{\infty} z^\nu \prod_3^{i=1} \frac{1}{1 - e^{-\nu \frac{\hbar\omega_i}{kT}}}. \quad (4.15)$$

A partir da equação (4.15) pode-se determinar a fugacidade z numericamente como função da temperatura. Isso completa a determinação do operador densidade térmico ρ para bósons ideais numa armadilha harmônica. No caso

de uma armadilha isotrópica, ($\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$), ficamos com

$$\langle N \rangle = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{z^{\nu}}{\left(1 - e^{-\nu \frac{\hbar\omega}{kT}}\right)^3} \quad (4.16)$$

Retornando à equação (4.4), lembramos que o número total de partículas nos estados excitados pode ser escrito como

$$\langle N' \rangle = \langle N \rangle - \langle N_0 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{1}{kT}(E_n - \mu)} - 1} < \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{E_n}{kT}} - 1} \equiv \langle N'_{max} \rangle. \quad (4.17)$$

Essa desigualdade segue do fato que $z < 1$. Logo, se $\langle N \rangle > \langle N'_{max} \rangle$, pelo menos $\langle N \rangle - \langle N'_{max} \rangle$ partículas devem ocupar o menor estado de uma partícula, E_0 . O número $\langle N'_{max} \rangle$ é chamado *número de saturação*. No caso de uma armadilha harmônica isotrópica, esse número é aproximadamente

$$\langle N'_{max} \rangle \simeq 1,202 \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3. \quad (4.18)$$

Essa fórmula é bastante útil para determinar a escala de temperatura para um gás ideal armadilhado. A temperatura crítica T_c^{harm} na qual a estimativa de $\langle N'_{max} \rangle$ se torna igual ao número total de partículas $\langle N \rangle$,

$$T_c^{harm} = \frac{\hbar\omega}{k} \left(\frac{\langle N \rangle}{1,202\dots} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.19)$$

é a temperatura abaixo da qual bósons começam a acumular no estado de menor energia E_0 , como foi mencionado anteriormente.

Resultados obtidos resolvendo numericamente equação (4.16) para a fugacidade e usando a equação (4.10) para avaliar a ocupação do estado de menor energia E_0 como função da temperatura são mostrados para uma armadilha harmônica isotrópica na figura 4.2. Colocando os valores das constantes envolvidas na equação (4.19), obtemos

$$T_c^{harm} = 4,5 N^{1/3} \nu(Hz) \times 10^{-11} K \quad (4.20)$$

onde $\nu = \omega/2\pi$ é a frequência da armadilha (em Hertz) e a temperatura crítica é dada em graus Kelvin. Com um valor típico usado nos experimentos

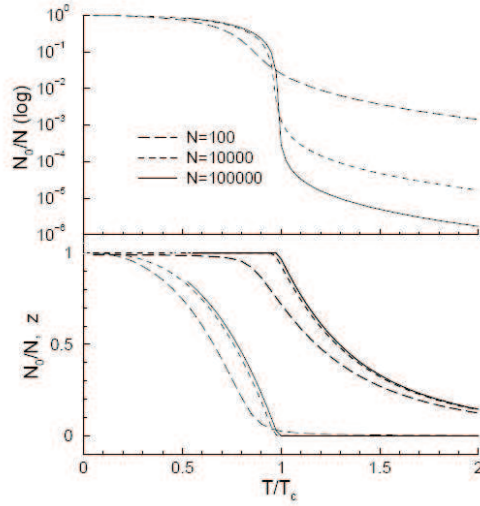


Figura 4.2: Ocupação do estado de menor energia, N_0/N , e fugacidade, z , (gráfico de baixo, linhas contínuas) como função de T/T_c , para os valores indicados do número total de partículas da armadilha harmônica. O gráfico de cima é o logaritmo de N_0/N . *Figura extraída do Braz. J. Phys.* **34** nº **3B**, 1102 (2004).

$\nu = 200 \text{ Hz}$, vemos que T_c^{harm} está por volta de 40, 200 e 400 nano-Kelvin para $\langle N \rangle$ igual a 100, 10.000 e 100.000, respectivamente.

4.3.1 Armadilhas harmônicas “Quase Unidimensionais”

Armadilhas anisotrópicas podem ser estudadas a partir da equação (4.15). Aqui consideramos o caso de uma armadilha “quase unidimensional”[34], em que $\omega_1 \simeq \omega_2 \gg \omega_3 = \omega$, com $\omega/2\pi$ na região de 200 Hz. Para estimar o número de saturação nesse caso, ignoramos a contribuição das excitações transversais na equação (4.17), e obtemos

$$\langle N'_{\text{max}} \rangle \simeq \frac{kT}{\hbar\omega} \ln \left(\frac{2kT}{\hbar\omega} \right). \quad (4.21)$$

Logo a temperatura crítica T_c^{qod} para esse caso é determinada pela equação

$$\langle N \rangle = \frac{kT_c^{\text{qod}}}{\hbar\omega} \ln \left(\frac{2kT_c^{\text{qod}}}{\hbar\omega} \right). \quad (4.22)$$

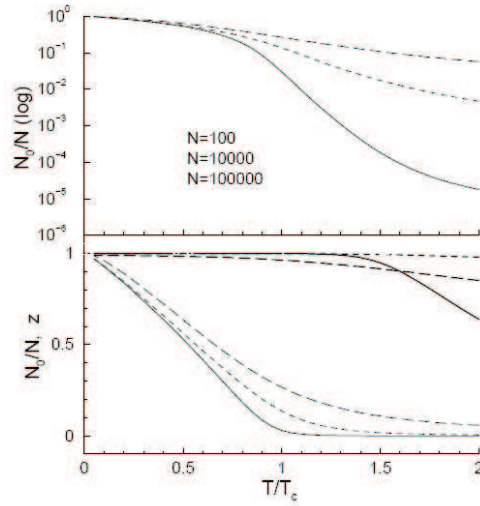


Figura 4.3: Semelhante à figura 4.2 para um gás ideal de bósons armadilhado numa armadilha quase unidimensional. A temperatura crítica T_c é dada agora pela equação (4.22), para os valores indicados para o número total de partículas na armadilha com $\omega_1/\omega_3 = \omega_2/\omega_3 = 10^4$. *Figura extraída do Braz. J. Phys. 34 nº 3B, 1102 (2004).*

Abaixo estão gráficos semelhantes aos gráficos na figura 4.2 para uma armadilha harmônica quase unidimensional.

4.4 Parâmetros Relevantes e Ordens de Grandeza

A condensação de um sistema homogêneo de bósons ideais de massa M pode ser caracterizada em termos de dois parâmetros de comprimento. Um deles está relacionado ao espaçamento médio entre partículas, e pode ser tomado como $\rho_P^{-1/3} \equiv L/\langle N_{L^3} \rangle^{1/3}$, onde ρ_P é a densidade de partículas. O segundo parâmetro pode ser tomado como o comprimento de onda térmico $\lambda_T \equiv \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2MkT}}$ associado à temperatura crítica T_c , λ_{T_c} como

$$\rho_P \lambda_{T_c}^3 = 2,612... \times \pi^{3/2}. \quad (4.23)$$

ou, em termos do comprimento de onda de de Broglie, $\lambda_{dB} = \lambda_T/\sqrt{\pi}$, escrevemos

$$\rho_P \lambda_{dB}^3 = 2,612..., T = T_c. \quad (4.24)$$

Essa é a chamada densidade de espaço de fase para um gás homogêneo. É interessante observar que a densidade de espaço de fase se torna maior quando a densidade de partículas aumenta e a temperatura é diminuída, de forma que o valor crítico representa o valor mínimo a ser alcançado para se obter o condensado. Essa é a raiz da interpretação dos BECs como um efeito quântico coletivo no qual o grau de localização permitido para diferentes partículas, representado por λ_{dB} , se torna menor que a distância entre partículas (representada por $\rho_P^{-1/3}$).

É interessante expressar o comprimento de onda de de Broglie em centímetros:

$$\lambda_{dB} = \frac{1,747}{\sqrt{M(amu)T(\mu K)}} \times 10^{-4} cm \quad (4.25)$$

onde $M(amu)$ é a massa dos átomos em unidades de massa atômica, $\nu(Hz)$ é a frequência da armadilha harmônica em hertz e $T(\mu K)$ é a temperatura em micro-Kelvin.

Nos experimentos tratados no capítulo 5 desta dissertação, com frequência típica da armadilha $\bar{\omega} = 2\pi \times 80Hz$ e número de átomos na ordem de $N = 1000$, a equação leva à temperatura crítica $T_C \approx 40nK$.

4.5 Gás Bosônico Não Ideal Diluído

Interações entre átomos têm um papel essencial na formação de BECs. Um importante processo para obter um BEC é o resfriamento por evaporação (veja seção 4.6). Nesse processo, a armadilha é montada de forma a deixar que os átomos mais energéticos escapem, levando à redução da temperatura através do reestabelecimento do equilíbrio térmico. Esse reestabelecimento do equilíbrio térmico depende de interações tipo átomo-átomo. Logo, para produzir um condensado “ideal”, a interação entre átomos é primeiro ajustada para um valor conveniente para o resfriamento do gás (esse ajuste é feito modificando o comprimento de espalhamento, que será visto ainda nesta sessão). Então um condensado (não-ideal) é gerado, e a partir dele obtém-se um condensado “ideal” ajustando a zero a força de interação [33].

Geralmente interações entre átomos são extremamente complexas e devem conter efeitos atrativos o suficiente para explicar a formação de moléculas ou das fases sólida e líquida. No entanto, a temperaturas muito baixas as

complexidades das interações átomo-átomo não são muito percebíveis na fase gasosa, já que tratamos de um gás diluído. Considerando uma colisão átomo-átomo com valores de momento relativo correspondentes a energias cinéticas kT com T na região de sub-micro Kelvin, processos de espalhamento são efetivamente restritos ao espalhamento elástico de onda-s, e são completamente caracterizados pelo deslocamento de fase correspondente. Isso restringe a capacidade de correlação imediata das forças interatômicas à nuclear, ou até abaixo, desde que permaneçamos numa fase gasosa e fria.

Como foi mencionado na sessão (4.1), a característica atrativa das forças interatômicas, responsável pela existência de moléculas e das fases líquida e sólida a baixas temperaturas, sinaliza que os sistemas gasosos não ideais de muitos corpos que sofrem condensação de Bose-Einstein não são estáveis. Na sua formação, eles não caminham para seu estado fundamental, mas sim para um estado excitado, metaestável. Qualitativamente, o tempo de vida dessa fase metaestável é aumentada se o gás frio é diluído. Isso porque colisões de três corpos, que são a única forma eficiente de perder energia, têm menor probabilidade de ocorrência comparado a colisões elásticas de dois corpos, responsáveis por estabelecer e manter o equilíbrio térmico.

4.5.1 Interação efetiva simples

Consideremos duas partículas com energia relativa $\hbar^2 k^2 / 2m$, \vec{k} sendo o momento relativo e m a massa reduzida, de forma que somente ondas-s são afetadas pelo potencial entre partículas. A seção de choque para o espalhamento dessas duas partículas pode ser expressa em termos do deslocamento de fase da onda-s $\delta_0(k)$ como

$$\frac{d\psi}{d\Omega} = \frac{\text{sen}^2(\delta_0(k))}{k^2} \longrightarrow a^2 \quad (4.26)$$

onde a tem dimensões de comprimento. Não há dependência da seção de choque no ângulo de espalhamento do centro de massa. Isso significa que espalhamento a energias muito baixas é insensível à natureza detalhada do potencial entre partículas, já que seus efeitos relativos podem ser caracterizados por um único parâmetro. Significa também que $\delta_0(k)$ não é muito adequado para esse propósito haja visto o denominador k^2 , que requer o desaparecimento de $\text{sen}(\delta_0(k))$ quando $k \rightarrow 0$ para *qualquer* valor finito do comprimento de espalhamento.

Por esse motivo introduz-se o *comprimento de espalhamento* a , definido como

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k}{\text{sen}(\delta_0(k))} \equiv -\frac{1}{a}, \quad (4.27)$$

o que coincide com o parâmetro de comprimento introduzido em (4.26).

Ao se tratar de gases atômicos frios e diluídos, uma abordagem usual é considerar somente interações efetivas de dois corpos de alcance zero. Essas podem ser representadas por

$$v_{eff}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (4.28)$$

A hamiltoniana efetiva de muitos corpos para um sistema de N bósons idênticos numa armadilha externa representada pelo potencial de um corpo $V(\vec{r})$ é escrita como

$$H_{eff} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2M} + V(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \lambda \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right) \quad \text{com} \quad \lambda \equiv \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \quad (4.29)$$

ou alternativamente, em termos de operadores de campo,

$$\begin{aligned} H_{eff} &= \int d^3r \mathcal{H}(\vec{r}), \\ \mathcal{H}(\vec{r}) &= \psi^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) + \frac{\lambda}{2} \psi^\dagger(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde \mathcal{H} é a densidade de hamiltoniana. Observe que os graus de liberdade de spin foram ignorados, o que é válido não só para bósons idênticos com spin nulo, mas também para bósons de spin não-nulo quando esses são restritos a apenas um subestado magnético, como é o caso de armadilhas magnéticas. O termo de interação de dois corpos incluído na hamiltoniana efetiva (4.29), tem caráter atrativo ou repulsivo dependendo no sinal do comprimento de espalhamento a . Sabe-se que para um potencial puramente repulsivo a é sempre positivo, mas para um potencial que não é puramente repulsivo, ou que seja até puramente atrativo, o comprimento de espalhamento a pode ter qualquer sinal. Logo, pelo fato do comprimento de espalhamento ser positivo, só podemos concluir que o potencial é repulsivo.

A inclusão da interação efetiva de dois corpos v_{eff} também introduz um

novo parâmetro de comprimento no sistema de muitos corpos associado ao alcance efetivo da interação e que pode ser identificado com o comprimento de espalhamento a . A relação desse parâmetro com a distância média entre partículas $\rho_P^{1/3}$, ρ_P sendo a densidade de partículas, permite uma caracterização quantitativa para a diluição do sistema em termos da quantidade adimensional $\rho_P a^3$. A quantidade a^3 representa o volume de interação, de forma que $\rho_P a^3$ corresponde ao número médio de partículas no volume de interação.

Densidades típicas de condensados obtidos recentemente estão na ordem de $\rho_P \sim 10^{15} \text{cm}^{-3}$. Usando um valor típico $a \simeq 100 r_B$ (r_B é o raio de Bohr), obtemos $\rho_P a^3 \sim 10^{-4}$. Logo essa quantidade está apta a ser usada como um parâmetro de expansão quando lidamos com esses sistemas. É interessante compará-la com a situação do hélio líquido, para a qual $\rho_P a^3 > 1$.

4.6 Resfriamento dos Átomos

Para atingir as temperaturas baixíssimas nas quais as transições de fase de BEC ocorrem, experimentais tiveram que procurar novos métodos de resfriamento. Num experimento típico com BECs, se começa à temperatura ambiente e reduz-se a temperatura em nove ordens de grandeza. Isso é feito através de uma combinação de formas de resfriamento. Através do método de resfriamento por laser pode-se chegar a temperaturas na ordem de micro-Kelvin. Depois disso é necessário fazer resfriamento por evaporação.

No resfriamento por laser, incide-se um laser nos átomos que absorvem um fóton e depois reemitem outro fóton numa outra direção. Na média a cor dos fótons espalhados é ligeiramente deslocado para o azul com relação ao laser incidente, i.e. o fóton espalhado tem energia um pouco maior que o absorvido. Essa diferença de energia causa uma diminuição na velocidade das partículas atômicas. Os deslocamentos nos comprimentos de onda podem ocorrer por causa do efeito Doppler (com o deslocamento proporcional à velocidade atômica), ou por causa dos deslocamentos Stark (devido ao campo elétrico dos raios de laser). Essa descrição explica como átomos perdem energia. Outra descrição enfatiza como o momento é transferido aos átomos. Se os átomos são expostos a vários raios laser com frequência e polarização bem definidas, então eles absorvem preferencialmente fótons na direção frontal. Logo, a variação de momento do fóton diminui a velocidade do átomo. A

emissão subsequente de um fóton ocorre em ângulos aleatórios e como resultado, tomando a média sobre vários ciclos de absorção-emissão, não há momento transferido à partícula devido à emissão de fótons. Para fazer com que átomos absorvam preferencialmente na direção frontal os experimentais usam o deslocamento Doppler. Quando o átomo e a luz estão se propagando em direções contrárias o deslocamento Doppler representa um aumento na frequência do fóton no átomo. Quando o laser tem uma frequência menor em relação à frequência de ressonância atômica, o efeito Doppler leva o laser mais perto da ressonância e aumenta a absorção de fótons. Para fótons vindo na mesma direção do átomo o efeito Doppler desloca a frequência do laser para ainda mais longe da frequência de ressonância do átomo.

Quando a nuvem atômica se torna mais densa e mais fria, o efeito do resfriamento descrito acima é dominada por outros processos, que causam aquecimento. Nesse ponto os átomos estão suficientemente frios para serem confinados por uma armadilha magnética. Armadilhar átomos neutros é mais difícil que armadilhar íons já que tais átomos não possuem carga global sobre a qual possam agir campos elétricos e magnéticos. Os acoplamentos capazes de gerar forças armadilhadoras só podem vir de interações entre os momentos dipolares elétricos ou magnéticos com o gradiente de campos elétricos ou magnéticos e é por isso que são usados átomos alcalinos para formar BECs. Átomos alcalinos possuem um elétron desemparelhado e portanto momento magnético. Os acoplamentos dos momentos magnéticos com o gradiente de campos magnéticos são fracos comparados àqueles envolvendo cargas globais e os poços de potencial correspondentes são bem menos profundos. Com isso fica evidente a necessidade de reduzir ao máximo possível a temperatura dos átomos para diminuir sua energia cinética a um valor suficientemente baixo para impedi-los de escapar à armadilha. Por outro lado, os átomos neutros apresentam uma vantagem sobre os íons. Não há repulsão eletrostática entre esses átomos o que possibilita ao físico experimental obter elevadas densidades de átomos armadilhados, o que é muito importante para surgirem efeitos de degenerescência quântica.

Depois de armadilhar os átomos, o sistema é ainda resfriado por um método chamado resfriamento por evaporação onde se faz uma remoção seletiva dos átomos mais energéticos do sistema. Na armadilha magnética os átomos mais energéticos podem atingir regiões que possuem campos magnéticos mais fortes, onde eles entram em ressonância com ondas de rádio ou

microondas, o que muda seu momento magnético de tal forma que os átomos escapam de armadilha. Com isso a temperatura média do sistema é abaixada até ordens de nano-Kelvin.

4.7 Alguns Experimentos Pioneiros

Há muitos resultados experimentais relativos a fenômenos de interferência em condensados atômicos de Bose-Einstein. Aqui apresentaremos alguns que foram pioneiros e tiveram grande impacto nessa área de pesquisa. Em cada caso, o texto é apenas um guia para interpretar o conteúdo dos trabalhos citados, e referências são feitas a figuras e equações que aparecem nelas.

(1) M. Kozuma et al., *Coherent Splitting of Bose-Einstein Condensed Gas with Optically Induced Bragg Diffraction* (1999) [36];
J. E. Simsarian et al., *Physical Review Letters*, **85**, 2040 (2000).

A figura 4.4 extraída do primeiro trabalho esclarece bem o que é chamado de interferência de Bragg de ordem n no qual existem dois lasers estimuladores, com frequências ω e $\omega' < \omega$ respectivamente, e $\delta \equiv \omega - \omega'$.

Quando um fóton de frequência ω é absorvido e em seguida é emitido um fóton de frequência ω' , o sistema que faz isso (por exemplo um átomo) ganha energia $\hbar\delta$ e momento $(\hbar/c)(\omega + \omega')\text{sen}(\theta/2) \simeq 2(\hbar/c)\delta\text{sen}(\theta/2)$. A condição de Bragg de ordem n está satisfeita quando

$$n\hbar\delta = \frac{P_n^2}{2M} \text{ com } P_n = 2n\frac{\hbar}{c}\delta\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (4.31)$$

Assim, tudo se passa como se o estado inicial de momento do átomo ϕ_0 estivesse acoplado com o estado cujo momento coincide com o da condição de Bragg que esteja satisfeita, ϕ_{P_n} . Representamos o estado do átomo como

$$\phi(t) = a(t)\phi_0 + b(t)\phi_{P_n}, \text{ com } a(0) = 1, b(0) = 0. \quad (4.32)$$

Escrevendo o acoplamento efetivo entre o estado inicial e o outro como G_n , obtemos as equações de movimento quânticas efetivas

$$i\hbar\dot{a}(t) = G_nb(t); i\hbar\dot{b}(t) = G_na(t). \quad (4.33)$$

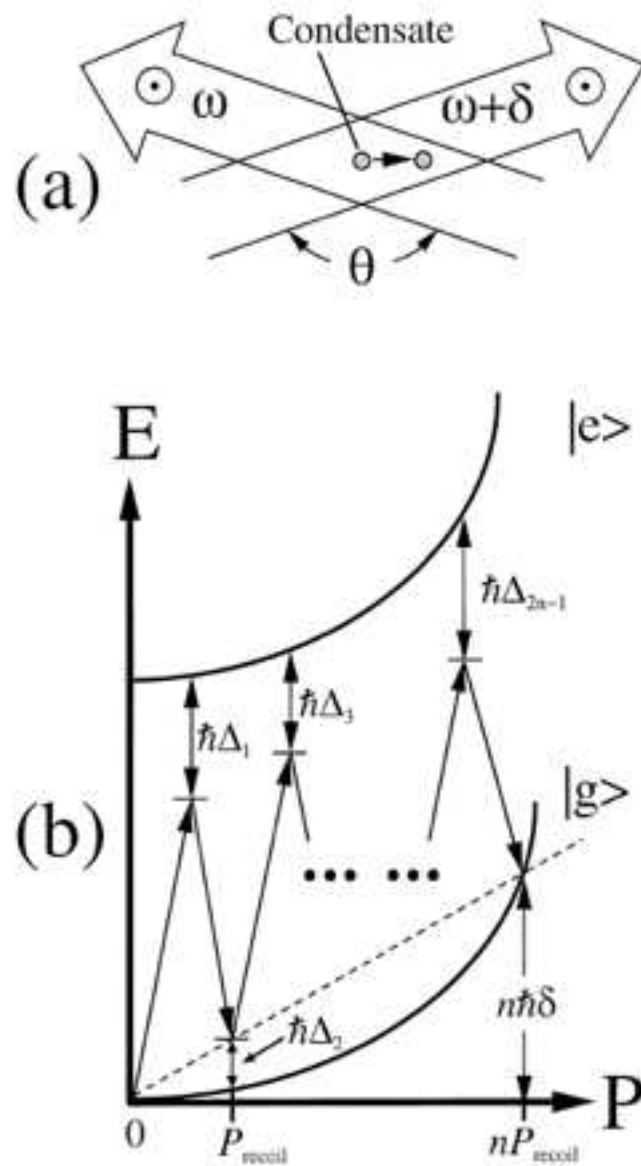


Figura 4.4: O arranjo experimental de raios laser (a) e um diagrama de transição parcial (b) para a difração n-ésima de Bragg. As parábolas correspondem à energia cinética $P^2/2M$. *Figura extraída de Phys. Rev. Lett.* **82**, 871 (1999).

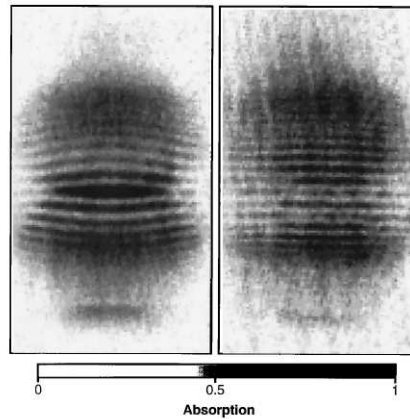


Figura 4.5: Padrão de interferência de dois condensados em expansão observados após 40ms de “vôo”, para duas potências diferentes do laser de argônio. *Figura extraída de Science 275, 637 (1997).*

A solução dessas equações com a condição inicial dada (4.32) é

$$a(t) = \cos\left(\frac{G_n t}{\hbar}\right), \quad b(t) = -i \operatorname{sen}\left(\frac{G_n t}{\hbar}\right), \quad (4.34)$$

de modo que o estado de momento zero e o de momento P_n ficam se transformando um no outro enquanto os lasers estimuladores estiverem ativos. Interrompendo a sua atividade em um tempo t_n tal que $G_n t_n / \hbar = \pi/4$ o estado resultante do suposto átomo será

$$\phi(t_n) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0 - i\phi_{P_n}). \quad (4.35)$$

Para decidir se o que se consegue dessa forma corresponde à interferência de um corpo, ou algo parecido com a interferência devida a correlações cinemáticas é preciso decidir se, nas condições experimentais, esse tipo de transformação afeta o estado de todos os bósons simultaneamente ou se afeta apenas uma parte deles.

Outros trabalhos relacionados a esse: J. Denschlag *et al.*, *Science*, **287**, 97 (2000) [39]; M. Kozuma *et al.*, *Science* **286**, 2309 (1999) [37].

(2) M. R. Andrews *et al.*, *Observation of Interference Between Two Bose Condensates* (1997) [38].

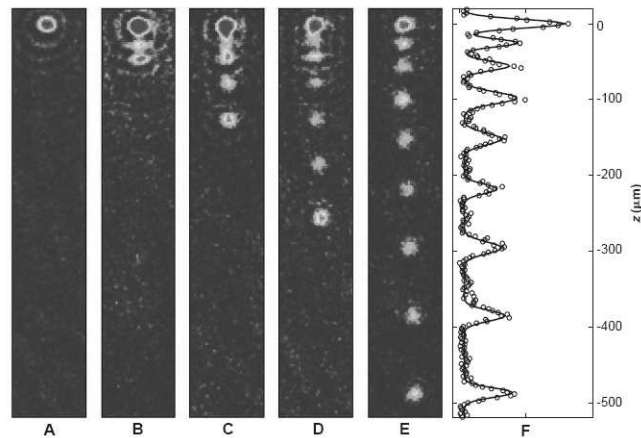


Figura 4.6: Imagem de absorção de um BEC cortado em fatias caindo em queda livre. *Figura extraída de Science 275, 637 (1997).*

Neste trabalho um condensado é cortado em duas partes e essas partes se expandem até que se superpõem parcialmente. O que se observa são figuras claras de interferência entre as duas partes (veja figura 4.5). Na região de superposição os átomos de cada uma das duas partes do condensado se expandem a partir de centros diferentes, e portanto adquirem momentos quase opostos. Mas é preciso pensar em cada átomo como estando em uma ou outra das metades do condensado original. Interferência de um corpo corresponderia a todos os átomos estarem completamente deslocalizados na extensão total das duas partes.

(3) B. P. Anderson e M. A. Kasevich, *Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays* (1998) [40].

Nesse trabalho os autores observam interferência dos vazamentos em queda livre de vários pedaços de um condensado inicial cortado em fatias finas. As armadilhas foram colocadas nos anti-nós de uma onda óptica estacionária.

O resultado mostrado nas figuras 4.6E e 4.6F podem ser reproduzidas em termos de um modelo superpondo n amplitudes que representam ondas de de Broglie calculadas usando a aproximação WKB (veja [41]).

Tunelamento de um Condensado de Bose-Einstein num Poço Simétrico

Em 2005 foi realizado pela primeira vez um experimento que possibilitou a observação direta do tunelamento de um condensado de Bose-Einstein armadilhado num poço de potencial duplo [1]. Um condensado de ^{87}Rb é preparado num poço duplo assimétrico, i.e. a barreira está descentralizada no potencial. Espera-se até que o condensado atinja o equilíbrio e então o potencial duplo é simetrizado de forma não-adiabática (em relação à dinâmica de tunelamento). A partir daí a dinâmica do sistema é observada através da medição *in situ* da distribuição de densidade das partículas. Fica evidente então que a forma inicial do potencial determina a distribuição inicial de partículas. Os experimentais observaram que essa distribuição inicial tem um papel crucial na dinâmica do condensado de Bose-Einstein evoluindo no poço duplo simétrico. Se a diferença inicial de população entre os dois poços está abaixo de um valor crítico, os experimentais observam oscilações de Josephson, i.e. os átomos tunelam para a direita e para a esquerda no tempo. No entanto, se o desbalanceamento inicial de populações é grande, as oscilações de Josephson não são observadas, e baseado num tratamento via campo médio os experimentais apontam para um fenômeno denominado *self-trapping* ou *autoarmadilhamento*. Nós desenvolvemos uma interpretação alternativa, baseada nas características do espectro da hamiltoniana de muitos corpos, para o fato de não se observar tunelamento macroscópico nesses casos, questionando sobre a existência ou não do fenômeno de autoarmadilhamento.

Acreditamos que a questão é o período de tunelamento que, no caso de grandes desbalanceamentos entre as populações dos dois poços no estado inicial, é muito grande, i.e. maior que a janela temporal do experimento, num efeito de muitos corpos.¹

5.1 O Experimento

Nesta seção nós vamos resumir os resultados do experimento da dinâmica oscilatória de um BEC num poço de potencial duplo, para maiores detalhes consulte [1, 42].

5.1.1 Montagem do poço de potencial duplo

As frequências da armadilha harmônica são calibradas nas direções x e z excitando oscilações dipolares coletivas e deduzindo sua posição de centro de massa como função do tempo de evolução das imagens de absorção obtidas. Obtém-se as frequências harmônicas de armadilhamento $\omega_x = 2\pi \cdot 79(2)Hz$ e $\omega_z = 2\pi \cdot 66,0(2)Hz$. A terceira frequência é calibrada de forma indireta porque nessa montagem experimental não é possível observar diretamente oscilações no eixo y , $\omega_y = 2\pi \cdot 91(2)Hz$. O espaçamento da rede é $d = 5.18(9)\mu m$.

A profundidade do potencial periódico é calibrada medindo o movimento relativo dos dois BECs no poço de potencial duplo. A oscilação dipolar dentro dos respectivos poços é excitada aumentando não-adiabaticamente o espaçamento dos poços. A profundidade do poço de potencial corresponde a uma altura de barreira $V_b = \hbar \cdot 263(20)Hz$ para o confinamento harmônico usado experimentalmente ($\omega_x = 2\pi \cdot 78Hz$).

5.1.2 Determinação das variáveis dinâmicas

A dinâmica de tunelamento macroscópico de um condensado de Bose-Einstein num potencial duplo é governada pela evolução temporal de duas variáveis dinâmicas, o desbalanceamento de populações e a fase relativa entre as componentes da esquerda e da direita do poço duplo. No presente trabalho nos concentraremos na primeira. O desbalanceamento de populações é obtido pelas imagens de absorção tomadas depois de um dado tempo de propagação

¹Esse trabalho foi submetido à revista *Physical Review Letters* em Julho 2006

do BEC dentro do poço de potencial duplo. Para ter uma resolução clara dos dois modos localizados, os experimentais aumentam a distância entre os dois BECS antes de fazer a imagem da distribuição atômica. Quando a profundidade da rede é aumentada, o tunelamento cessa momentaneamente de forma que o desbalanceamento de populações é “congelado” durante esse processo. A imagem de absorção da nuvem atômica é tomada no tempo de separação máxima $\delta t = 1,5ms$. Nesse tempo, os dois pacotes de onda têm uma distância aproximada de $5,5\mu m$ e podem então ser resolvidos pelo sistema de imagem. Colocando o perfil da densidade óptica na direção x como uma soma de duas funções gaussianas e na direção z com uma função gaussiana, são obtidos os números de átomos nos poços individuais e o desbalanceamento de populações

$$z = \frac{N_+ - N_-}{N} = 0,23(3). \quad (5.1)$$

5.1.3 Preparação do desbalanceamento inicial de populações

Para observar a dinâmica de tunelamento de um condensado de Bose-Einstein dentro de um poço de potencial duplo simétrico um desbalanceamento inicial de populações $z(0) \neq 0$ é induzido. Isso é implementado experimentalmente colocando adiabaticamente o BEC no estado fundamental de um poço duplo assimétrico como mostrado na figura 5.1. A assimetria do potencial e portanto o desbalanceamento de populações do estado fundamental correspondente pode ser controlado ajustando o deslocamento relativo Δx do laser que realiza o confinamento harmônico na direção x com respeito à rede óptica. O potencial é em seguida deslocado para a configuração simétrica de potencial duplo. Isso inicia a dinâmica de tunelamento macroscópico.

5.1.4 Observação de oscilações de Josephson e autoarmadilhamento

Depois da preparação do estado inicial no potencial assimétrico e o subsequente deslocamento para o potencial simétrico, as partículas tunelantes são diretamente observadas por meio de imagens de absorção. Figura 5.2 mostra as imagens ($17,5\mu m \times 9,9\mu m$) do condensado de Bose-Einstein após um tempo de evolução variável no poço de potencial duplo simétrico. Antes de fazer as imagens, a barreira de potencial é repentinamente subida e o confinamento harmônico na direção x é desligado. Isso resulta em oscilações dipolares das núvens atômicas nos poços individuais.

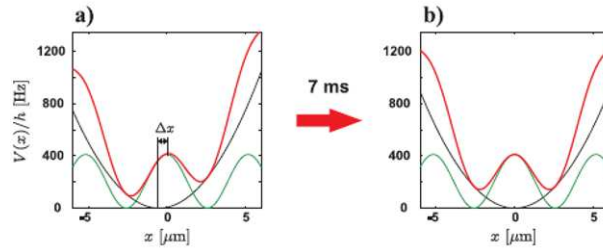


Figura 5.1: O desbalanceamento inicial de populações $z(0) \neq 0$ é preparado armando o BEC no estado fundamental do poço de potencial duplo assimétrico ($\Delta x \neq 0$) mostrado na figura da esquerda. O potencial é em seguida deslocado para o caso simétrico para que a dinâmica de tunelamento possa ser iniciada. *Figura extraída de <http://www.kip.uni-heidelberg.de/matterwaveoptics/thesis.htm> [42]*

Cada imagem corresponde a uma nova realização experimental. Do lado esquerdo da figura 5.2 é evidente a dinâmica de tunelamento macroscópico. O desbalanceamento de populações é ajustado para $z(0) = 0,28(6)$, o que é implementado usando o deslocamento $\Delta x = 240(80)\eta m$ da posição do confinamento harmônico na direção x . A evolução temporal da população dos poços esquerdo e direito é diretamente visível nas imagens de absorção. Os átomos tunelam para a esquerda e para a direita no tempo. O desbalanceamento de populações é invertido após aproximadamente $20ms$ e retorna ao seu valor inicial após aproximadamente $45ms$. À direita da figura 5.2 está a evolução temporal do BEC para $z(0) = 0,62(6)$, o que corresponde a $\Delta x = 500(80)nm$. A população dos dois poços é estacionária dentro da margem de erro experimental.

A análise quantitativa da dinâmica de tunelamento é mostrada na figura 5.3 que mostra os resultados experimentais da evolução temporal do desbalanceamento de populações para $z(0) = 0,28(6)$. O período de tunelamento é de $40(2)ms$. O desbalanceamento de populações oscila em torno de um valor médio $\langle z(t) \rangle_t = 0$.

Acima de um valor crítico z_c , tunelamento não é mais observado na janela temporal do experimento. Figura 5.3b mostra a evolução temporal da variável dinâmica $z(t)$ para $z(0) = 0,62(6)$. Nem $z(t)$ nem a fase apresentam comportamento oscilatório. Os autores chamam isso de *self-trapping regime* ou *regime de autoarmadilhamento*. Esse fenômeno é atribuído à não linearidade da equação de Gross-Pitaevskii que nasce de um tratamento de campo

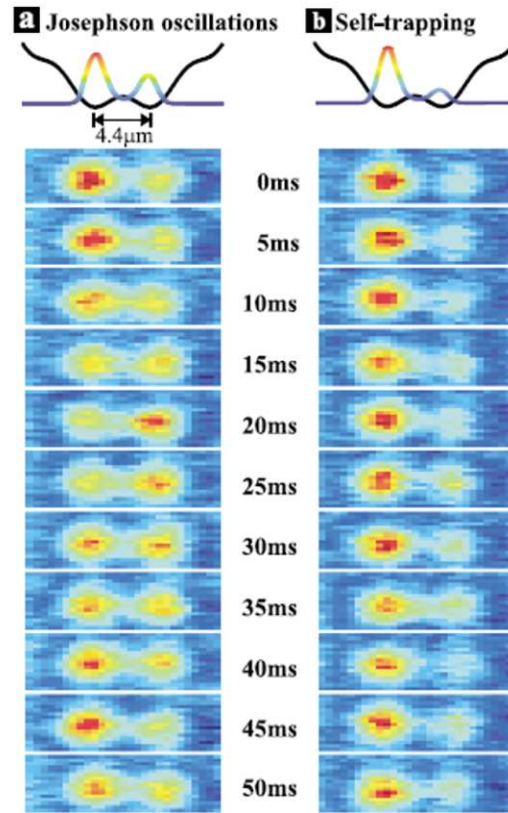


Figura 5.2: Observação do tunelamento macroscópico de um BEC num poço de potencial duplo simétrico. Aqui estão mostradas imagens de evolução da nuvem atômica após um tempo de evolução variável. Em (a) oscilações de Josephson são observadas, a partir de um desbalanceamento inicial relativo de populações $z(0) = 0,28(6)$. Em (b) oscilações de Josephson não são observadas para $z(0) = 0.62(6)$, i.e. a população dentro de cada poço é estacionária dentro da margem de erro experimental. *Figura extraída de Phys. Rev. Lett.* **95**, 010402 (2005) [1].

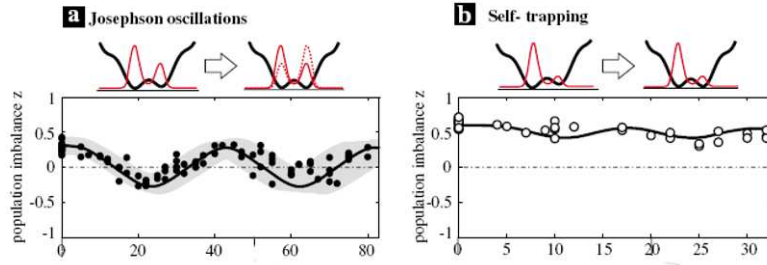


Figura 5.3: Análise quantitativa da evolução temporal das variáveis dinâmicas. (a) Para $z(0) = 0,28(6)$, o desbalanceamento de populações oscila em torno de um valor médio nulo numa escala de tempo $40(2)ms$. A sombra cinza no gráfico de cima indica o espalhamento dos dados previsto na teoria devido à incerteza no desbalanceamento inicial de populações. (b) Para $z(0) = 0,62(6)$ o desbalanceamento de populações é quase estacionário durante o tempo observado. *Figura extraída de Phys. Rev. Lett.* **95**, 010402 (2005) [1].

médio do sistema.

5.2 Descrição de Campo Médio para BECs: a Equação de Gross-Pitaevskii

Como foi mencionado no capítulo anterior, ao se tratar de gases atômicos frios e diluídos, uma abordagem usual é considerar somente interações efetivas de contato de dois corpos e o potencial de espalhamento pode ser aproximado pelo potencial

$$U(\vec{r} - \vec{r}') = g_{3d}\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (5.2)$$

onde $g_{3d} = 4\pi\hbar^2 a/m$ denota a constante de acoplamento tridimensional. Lembrando que o comprimento de espalhamento a é positivo para interação repulsiva. Assumindo esse potencial efetivo e aplicando a aproximação de Bogoliubov [43], E. P. Gross [44, 45] e L. L. Pitaevskii [46] desenvolveram uma teoria de campo médio para a descrição de BECs a temperatura nula. Nesse quadro o condensado é descrito pela função de onda macroscópica de um corpo $\Psi(\vec{r}, t)$ e obedece à equação de Gross-Pitaevskii

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + g_{3d}N|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (5.3)$$

Essa descrição é muito usada, e com sucesso, para explicar experimentos com BECs em termos de poucas quantidades físicas. Nessa representação, a função de onda do condensado é normalizada para a unidade e o quadrado do seu valor absoluto determina a densidade atômica $\rho(\vec{r}, t) = N \cdot |\Psi(\vec{r}, t)|^2$. A energia total consiste na energia cinética, a energia potencial dentro da armadilha externa e a energia de interação de campo médio cujo valor é proporcional ao quadrado da função de onda e é portanto referido como não-linearidade. A equação de Gross-Pitaevskii não pode em geral ser resolvida analiticamente. No caso limite de energia cinética dominante, essa equação se reduz à equação de Schrödinger linear e recuperamos a função de onda do estado fundamental do potencial externo. No caso contrário a esse podemos ignorar o termo de energia cinética, o que corresponde à chamada aproximação de Thomas-fermi. A distribuição de densidade é portanto dada por

$$\rho(\vec{r}) = g^{-1}(\mu - V_{ext}(\vec{r})) \Theta(\mu - V_{ext}(\vec{r})) \quad (5.4)$$

onde Θ é a função degrau unitária e μ é o potencial químico.

O fenômeno de autoarmadilhamento é atribuído à não-linearidade da equação de Gross-Pitaevskii. Para maior detalhamento dessa abordagem recomendamos as referências [35, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55].

5.3 Modelo Solúvel de Muitos Corpos para um BEC de Dois Modos

Um sistema com dois modos é o caso mais simples de um sistema com muitos modos. Uma situação típica aparece no caso de um poço de potencial duplo como aquele representado esquematicamente na figura 5.4. Se a barreira central for muito alta comparada à diferença de energia dentro do dubleto, então uma simplificação possível é a restrição da dinâmica a um espaço de fases de dois modos. Isso é implementado usando os operadores de criação

$$a_{\pm}^{\dagger} = \int d^3r u(r) \phi_{\pm}(z) \phi^{\dagger}(\vec{r}), \quad (5.5)$$

$$\phi_{\pm}(z) = \frac{\phi_1(z) \pm \phi_2(z)}{\sqrt{2}}, \quad (5.6)$$

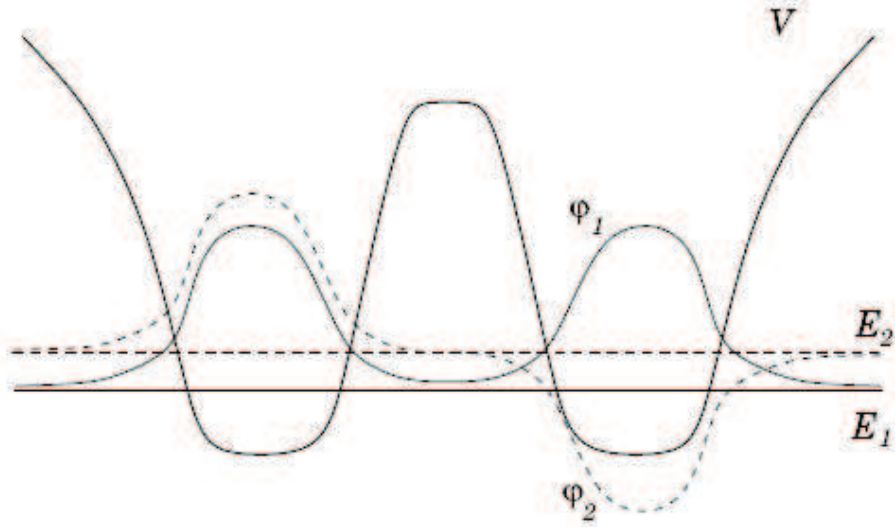


Figura 5.4: Representação esquemática de uma armadilha de poço duplo, com seu dubleto de menor energia correspondente. O menor membro desse dubleto tem a função de onda ϕ_1 (que não possui nó), e a diferença de energia $\Delta E \equiv E_2 - E_1$ determina o período de oscilação entre os dois estados não estacionários e localizados $(\phi_1 \pm \phi_2)/\sqrt{2}$ através de $2\pi\hbar = \delta E$.

onde a função $u(r \perp)$ é a função de onda transversal “congelada” e $\phi_i(z)$, $i = 1, 2$ as autofunções longitudinais do menor dubleto do poço duplo. Dessa forma, $\phi_{\pm}(z)$ são funções de onda estacionárias com picos de cada lado da barreira.

A hamiltoniana básica a ser usada para caracterizar a dinâmica do sistema é a hamiltoniana efetiva segundo-quantizada com a interação efetiva de contato entre dois corpos (4.30) restrita a dois modos. Essa restrição é implementada fazendo a seguinte substituição nos operadores de campo

$$\psi(\vec{r}) \longrightarrow \sum_{\pm} u(r \perp) \phi_{\pm}(z) a_{\pm}, \quad \psi^{\dagger}(\vec{r}) \longrightarrow \sum_{\pm} u^*(r \perp) \phi_{\pm}^*(z) a_{\pm}^{\dagger} \quad (5.7)$$

que, depois de alguma álgebra, nos dá (4.30)

$$H_{eff} \xrightarrow{\sim} H_{BH} \equiv E_+ a_+^{\dagger} a_+ + E_- a_-^{\dagger} a_- + \alpha (a_+^{\dagger} a_- + a_-^{\dagger} a_+) + \frac{\Lambda_+}{2} a_+^{\dagger} a_+^{\dagger} a_+ a_+ + \frac{\Lambda_-}{2} a_-^{\dagger} a_-^{\dagger} a_- a_- . \quad (5.8)$$

As constantes E_{\pm} são os elementos de matriz

$$E_{\pm} = \langle u\phi_{\pm} | \frac{p^2}{2M} + V | u\phi_{\pm} \rangle. \quad (5.9)$$

Note que se as funções deslocalizadas $u\phi_i, i = 1, 2$ são tomadas como autofunções de $p^2/2M + V$ com autovalores E_i , então $E_+ = E_- = (E_1 + E_2)/2$. O parâmetro α representa os elementos fora da diagonal de matriz

$$\alpha = \langle u\phi_{\pm} | \frac{p^2}{2M} + V | u\phi_{\mp} \rangle, \quad (5.10)$$

tomados iguais, as funções de onda sendo ambas reais. Novamente, para autofunções de $p^2/2M + V$, encontramos $\alpha = (E_1 - E_2)/2 < 0$. Isso revela, em particular, que esse termo está relacionado ao tunelamento periódico de partículas através da barreira central.

A parte de dois corpos dá origem a dezesseis termos envolvendo integrais espaciais de vários produtos distintos de funções de onda $u\phi_{\pm}$ de quatro modos. Entretanto, devido ao caráter localizado dessas funções de onda, integrais sobre produtos das quatro funções de onda que não são iguais são muito menores do que aquelas que mantivemos. Os parâmetros Λ_{\pm} são logo essencialmente iguais e são dados por

$$\Lambda = \lambda \int d^3ru^4(r \perp) \phi_{\pm}^4(z). \quad (5.11)$$

A hamiltoniana (5.8) é o modelo de dois sítios de Bose-Hubbard no qual o termo *hopping* é relacionado ao tunelamento entre os dois poços e existe uma interação de dois corpos *in situ* além das diferentes energias possíveis de um corpo num sítio. A forma padrão da hamiltoniana (5.8) para mais de dois sítios é

$$H_{BH} = \sum_i E_i a_i^\dagger a_i + \alpha \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + \frac{\Lambda}{2} \sum_i a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i, \quad (5.12)$$

onde $\langle i, j \rangle$ denota que os sítios i e j são vizinhos.

Apesar das vantagens óbvias de uma aproximação de muitos corpos porém com solução exata, há várias limitações a essa modelo. Assumir apenas dois modos é uma aproximação à situação realística, porém a maior restrição

a esse modelo vem da hipótese de que os coeficientes α e Λ permanecem constantes no tempo. Essa aproximação só é válida quando as interações de muitos corpos produzem pequenas modificações nas propriedades do estado fundamental dos poços individuais. Isso é verdade se a energia de interação *in situ* é muito menor que o espaçamento de níveis da armadilha externa (veja [50]). Nesse caso, $N \ll \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{r_0}{|a|} \sim 200$, onde a é o comprimento de espaçamento e r_0 é a incerteza na posição no estado fundamental do oscilador harmônico.

5.3.1 Resultados para um sistema formado por dois poços

Nesse caso consideramos a hamiltoniana (5.8) com $E_+ = E_- = 0$ e $\Lambda_+ = \Lambda_- = \Lambda$, i.e.

$$H_{BH} = \alpha(a_+^\dagger a_- + a_-^\dagger a_+) + \frac{\Lambda}{2}(a_+^\dagger a_+^\dagger a_+ a_+ + a_-^\dagger a_-^\dagger a_- a_-). \quad (5.13)$$

Já que a armadilha é levada em conta em termos da escolha feita para os orbitais relevantes $u\phi_i$, $i = 1, 2$, não há referência explícita aos graus de liberdade de posição exceto naquilo que é relacionado aos índices \pm e ao caráter localizado dos orbitais correspondentes. Ainda, não existem interações de dois corpos entre bósons em diferentes sítios, e o número total de bósons

$$\hat{N} = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_- \quad (5.14)$$

é uma constante de movimento.

Uma forma conveniente de lidar com a hamiltoniana (5.13) dentro de um setor do espaço de fase segundo-quantizado tendo um número total de partículas bem definido é pela construção dos operadores

$$\begin{aligned} J_\pm &= J_x \pm iJ_y \equiv a_\pm^\dagger a_\mp, \\ J_z &\equiv \frac{a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-}{2}, \\ J &\equiv \frac{a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-}{2} = \frac{\hat{N}}{2}, \end{aligned}$$

o que constitui a realização de Schwinger de álgebra de momento angular em termos de dois modos bosônicos [56].

Nesse contexto eles são frequentemente referidos como operadores de “quase-spin” [57]. O papel do operador J é revelado através da relação

$$J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J(J+1) = \frac{\hat{N}}{2} \left(\frac{\hat{N}}{2} + 1 \right), \quad (5.15)$$

de forma que o valor do quase-spin é metade do número de bósons no setor de espaço de fase considerado. A hamiltoniana de dois sítios (5.13) pode ser expressa em termos dos operadores de quase-spin como

$$\begin{aligned} H_{BH} &= 2\alpha J_x + \frac{\Lambda}{2} [(J + J_z)(J + J_z - 1) + (J - J_z)(J - J_z - 1)] \\ &= 2\alpha J_x + \Lambda J(J - 1) + \Lambda J_z^2. \end{aligned} \quad (5.16)$$

O segundo termo é uma constante de movimento e os dois termos restantes são componentes cartesianas dos quase-spin que não comutam. Isso indica que podemos diagonalizar o termo de *hopping* proporcional a α escolhendo uma representação em termos dos autovetores simultâneos do quadrado do spin total e da componente J_x , e nesse caso o termo de interação efetiva de dois corpos terá elementos fora da diagonal. Ou alternativamente podemos diagonalizar o termo de interação efetiva escolhendo uma representação na qual $J(J - 1)$ e J_z são diagonais e nesse caso o termo de *hopping* terá elementos de matriz fora da diagonal. É essa a representação que usaremos aqui. O estado fundamental para uma barreira completamente impermeável ($\alpha = 0$) é o estado $|J = N/2, J_z = 0\rangle$, o que corresponde a uma mesma população nos dois poços (assumindo N par e interação efetiva de dois corpos repulsiva).

Na hamiltoniana (5.13), o termo de *hopping* favorece a deslocalização das partículas de forma a promover a relevância do menor membro do dubleto quase-degenerado. Ao contrário, o termo de interação efetiva de dois corpos favorece o estado mais simétrico da representação em J_z tendo metade das partículas de cada lado da barreira central. Em geral, o espectro de H_{BH} consiste em $N + 1$ estados no setor de N bósons. Os autovalores e autovetores podem ser obtidos diagonalizando a matriz hamiltoniana.

5.3.2 Uma análise numérica.

Aqui daremos uma abordagem alternativa àquela baseada em efeitos de campo médio e equação de Gross-Pitaveski para a não-observação de tunelamento quando o desbalanceamento inicial de populações é grande na experiência explicada na seção (5.1). É importante notar que esse modelo, que usa a hamiltoniana de Bose-Hubbard (5.8), apresenta essencialmente características típicas de sistemas de muitos corpos como os autoestados correlacionados nos quais, em particular, os números de átomos em cada um dos poços não são bem definidos, mas têm flutuações correlacionadas. De acordo com o modelo aqui desenvolvido, para um certo intervalo do parâmetro $|\alpha/\Lambda|$ o espectro da hamiltoniana de muitos corpos apresenta uma região com dubletos quase degenerados. Para um desbalanceamento inicial de populações suficientemente grande essencialmente um dubleto participará do processo de tunelamento. O período de tunelamento será dado aproximadamente por $t \sim \hbar/\Delta E$ onde ΔE é a pequena diferença de energia dos dubletos. Esse período será muito maior que a janela temporal dos experimentos. Por essa razão, a interpretação da não observação de tunelamento no modelo é radicalmente diferente daquela que vem da equação de Gross-Pitaveskii, atribuída à não-linearidade na abordagem de campo médio.

Lembrando que no modelo de Bose-Hubbard a aproximação que considera constantes no tempo os coeficientes α e Λ só é válida quando as interações de muitos corpos produzem pequenas modificações nas propriedades do estado fundamental dos poços individuais, o que implica em $N \ll \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{r_0}{|a|} \sim 200$, não podemos fazer a análise numérica para as 1150 partículas usada na experiência que queremos analisar. No caso do ^{87}Rb usado na referência [1] nossa análise usando o modelo de Bose-Hubbard fica limitada a $N \ll 200$, embora o parâmetro utilizado em nossas análises seja independente do número total de partículas. Primeiro fazemos um estudo da dinâmica de um sistema de dez partículas para ilustrar nossas idéias porque as escalas de tempo são muito diferentes para mais partículas; ou, em outras palavras, os membros dos dubletos são por demais próximos em energia para que sua separação - e, ao mesmo tempo, a estrutura dos autovetores correspondentes - seja tratável numericamente com a precisão requerida. Depois mostramos que a hamiltoniana para cem partículas possui a mesma estrutura daquela para dez partículas e argumentaremos que a mesma física está presente no caso

de cem partículas.

Antes de tudo devemos modificar a hamiltoniana (5.13) de forma a incorporar a assimetria do poço que dá o desbalanceamento inicial de populações na experiência [1]. Uma forma simples de fazer isso é acrescentar nessa hamiltoniana um termo linear em J_z

$$H = 2\alpha J_x + \Lambda J_z^2 + \delta J_z. \quad (5.17)$$

Diagonalizamos essa hamiltoniana com $\delta \neq 0$ e expandimos seu autoestado de menor energia nos autovetores do poço simétrico (5.13). Isso determina o estado inicial do sistema que irá evoluir no poço duplo simétrico. Será essencial entender o espectro da hamiltoniana do poço simétrico (5.13) pois ele nos fornece os períodos de tunelamento possíveis para o BEC armadilhado. Na figura 5.5 temos o espectro de um sistema de dez partículas num poço simétrico $\delta = 0$ com os parâmetros $\alpha = -0,66, \Lambda = 1$. Esse espectro pode ser dividido em duas regiões distintas: uma que é aproximadamente harmônica e outra que apresenta dubletos degenerados ou quase degenerados. Para $\alpha = 0$ o espectro de energia é composto unicamente de dubletos degenerados. Para $\alpha < 0$ essa degenerescência é gradualmente levantada. Isso pode ser entendido em termos da altura da barreira, que para $\alpha = 0$ é infinita e as partículas estão localizadas em cada poço. Como no caso analisado na seção 2.1 que consistia de uma única partícula no poço de potencial duplo simétrico, à medida que abaixamos a barreira (aumentando o valor de $|\alpha/\Lambda|$ na hamiltoniana (5.13), as partículas ficam deslocalizadas dos dois lados do poço e a degenerescência dos níveis de energia é levantada. No caso de interação *in situ* repulsiva ($\Lambda > 0$), o primeiro estado a perder degenerescência é o estado fundamental. Para interação atrativa ($\Lambda < 0$) o primeiro estado a perder degenerescência quando a barreira central se torna finita é aquele de maior energia. No caso de interação repulsiva, que será o foco da nossa análise, e para valores intermediários de $|\alpha/\Lambda|$ a diferença de energia interna do último dubleto é muito menor que a diferença de energia entre o primeiro e o último autoestado da hamiltoniana. Por exemplo, para $N = 10$ partículas e $\alpha/\Lambda = -0,66$ (veja figura 5.5), a razão desses dois valores é da ordem de 1.5×10^6 . O processo de tunelamento é determinado por dois ingredientes: o espectro da hamiltoniana do poço duplo simétrico e a condição inicial, i.e. como esses autoestados são populados. Observamos que para pequenos desbalanceamentos iniciais de populações ($z(0) = \langle J_z(0) \rangle / N$), as ocupações

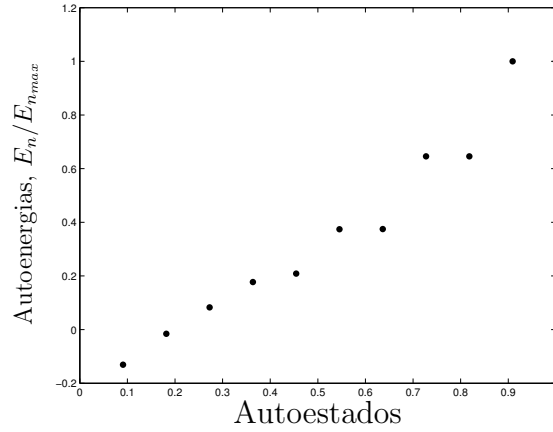


Figura 5.5: o espectro de hamiltoniana para dez partículas num poço potencial duplo com parâmetros $\alpha/\Lambda = -0.66$ e $\delta = 0$. A razão entre a diferença de energia do estado fundamental até o último estado excitado e a diferença entre os dois estados do último dubleto é da ordem de 1.5×10^6 .

são concentradas na parte mais baixa do espectro, essencialmente harmônica (figura 5.5). Entretanto, para $z(0)$ grande o suficiente esse cenário muda radicalmente e essencialmente um único dubleto tende a ser ocupado na expansão do estado inicial. Isso é mostrado na figura 5.6. O eixo horizontal lista os autoestados da figura 5.5. O eixo vertical é dividido em linhas, cada uma correspondendo a uma dada condição inicial, caracterizada por $z(0)$. A coloração indica a probabilidade de ocupação de cada estado. Então cada linha é um retrato do estado inicial expandido na base da hamiltoniana simétrica. A linha vermelha horizontal corresponde ao valor experimental crítico $z_c(0)$ a partir do qual tunelamento não é observado. Note que na figura 5.6 essa linha separa as condições iniciais que são concentradas nos estados de não-dubleto (à esquerda a linha vermelha vertical).

Na referência [1] o desbalanceamento populacional como função do tempo é obtido. Para $z(0) < z_c(0) = 0,5$ ela oscila em torno do seu valor médio, zero. Para $z(0) > 0,5$ oscilações de pequenas amplitudes são observadas em torno de um valor médio diferente de zero (veja a figura 5.3). Para simular esse comportamento no contexto deste modelo precisamos primeiro fixar um tempo de observação. Na figura 5.7 determinamos $z_c(0)$ através da média temporal de $z(t)$ como função do desbalanceamento inicial de populações $z(0)$. Percebemos que essa média é zero até $z_c(0) \sim 0,5$ e daí em diante

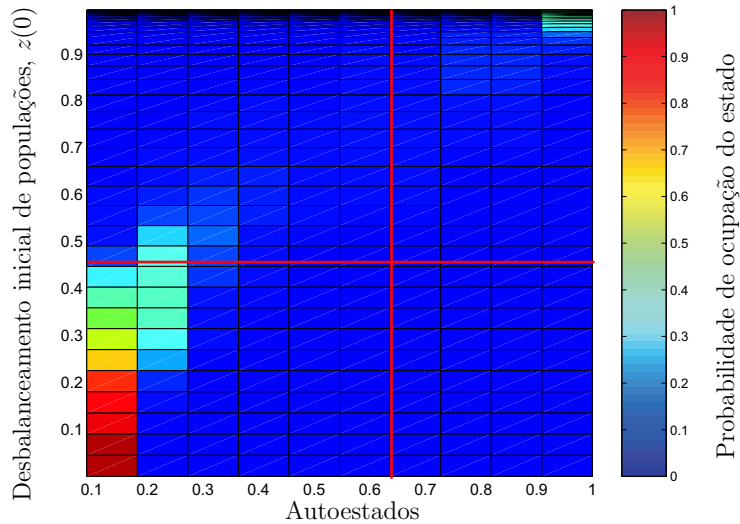


Figura 5.6: A probabilidade de ocupação da base formada pelos autoestados da hamiltoniana simétrica (eixo horizontal) para diferentes desbalançamentos iniciais relativos de populações (eixo vertical), $z = 2\langle J_z(t=0) \rangle / N$. Os parâmetros usados foram $N = 10, \alpha/\Lambda = -0.66$. A linha vertical vermelha separa os estados de dubleto (à direita da linha) dos estados mais baixos de energia que não formam dubletos (à esquerda da linha). A linha vermelha horizontal foi desenhada em $z_c(t=0)$.

apresenta crescimento suave. A partir dessa figura esperaríamos que nenhum tunelamento ocorresse. Na figura 5.8(a) mostramos a evolução temporal de $z(t)$ e observamos que dentro da janela temporal da figura 5.7 existem apenas oscilações de pequena amplitude que jamais cruzam $z = 0$. De fato, se olharmos a figura 5.6 observamos uma concentração da ocupação inicial predominantemente no último dubleto. Extendendo o “tempo de observação” ($t \sim \hbar/\Delta E \sim 10^6 \hbar/\Lambda$) para essa mesma condição inicial, figura 5.8(b) revela amplas oscilações de Josephson em torno de $z = 0$, indicando tunelamento com período dominante $T \simeq 1,2 \times 10^6 \hbar/\Lambda$. As frequências dominantes correspondem à diferença de energia dos mais prováveis pares de estados. Logo, analisando exclusivamente a figura 5.8(a) poderíamos ter a falsa impressão de autoaprisionamento, quando na verdade o período de tunelamento é maior que o tempo de observação. A análise física usada para um sistema de dez partículas foi repetido para cem partículas. O espectro desse sistema com $\alpha/\Lambda = -4.0$ e $\delta = 0$ apresenta a mesma estrutura daquele com dez partículas (figura 5.9). Figura 5.10 é análoga à figura 5.6. Novamente, o valor crítico

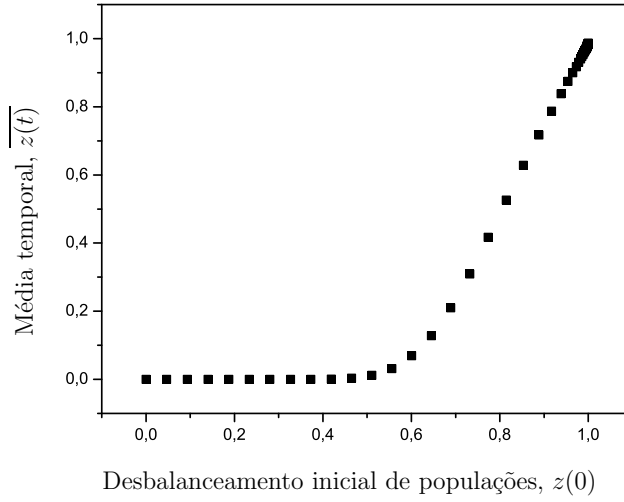


Figura 5.7: A média temporal de $z(t)$ como função do desbalanceamento inicial de populações ($z(t=0)$) para $N = 10, \alpha/\Lambda = -0.66$. Enquanto $\overline{z(t)} = 0$ tunelamento é observado, mas se $z(t) \neq 0$ tunelamento não é observado.

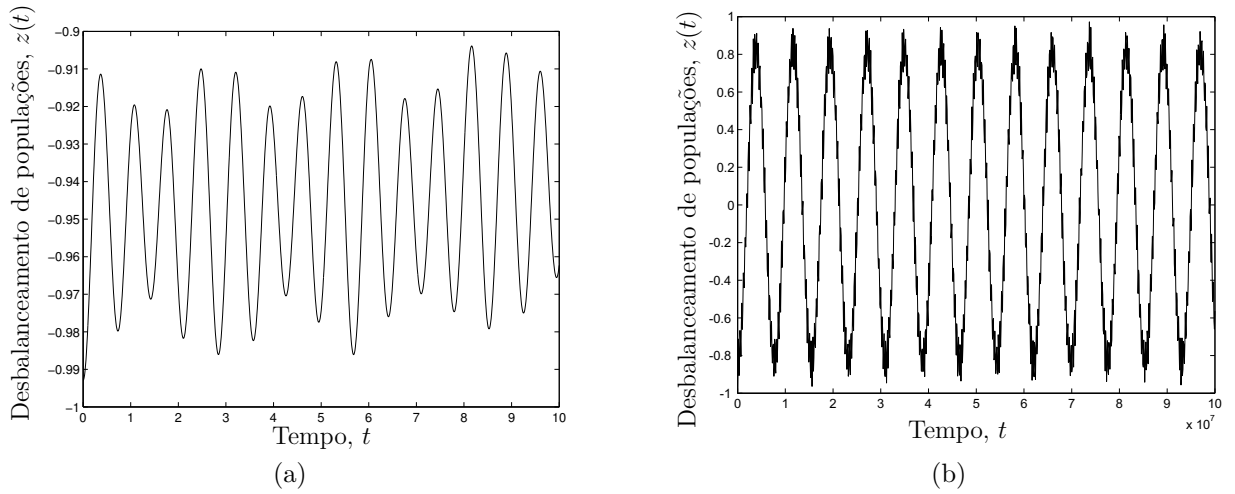


Figura 5.8: A evolução temporal de $z(t)$ para $N = 10$ partículas $\alpha/\Lambda = -0.66$. A ocupação mais significativa é aquela do último dubleto, que tem separação interna $\Delta E \simeq 8.3 \times 10^{-7} \Lambda$.

$z_c(0)$ está diretamente relacionado à ocupação predominante dos autoestados de dubleto do poço de potencial duplo simétrico (à esquerda da linha vertical vermelha na figura 5.10 todos os estados não degenerados e à direita dessa linha eles são essencialmente formados por dubletos degenerados ou quase

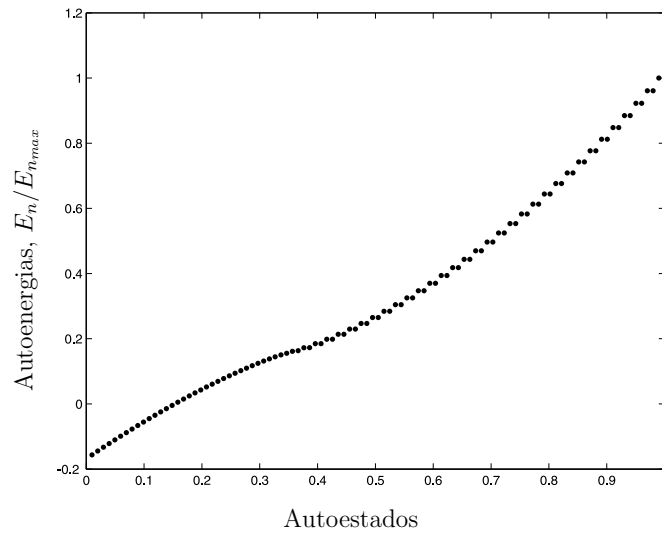


Figura 5.9: O espectro de energia para cem partículas num poço duplo simétrico com parâmetros $N = 100, \alpha/\Lambda = -4.0, \delta = 0$. Abaixo do ponto de inflexão não aparecem dubletos, mas os estados de maior energia são dubletos quase degenerados.

degenerados).

Se alterarmos a razão α/Λ comparada àquela usada na figura 5.10 de forma a ter uma barreira de potencial efetiva mais alta dentro do poço, a dinâmica do sistema é menos sensível a mudanças na condição inicial. Isso é esperado já que nos aproximamos do caso em que temos dois poços de potencial separados por uma barreira infinita. o espectro desse poço consiste quase inteiramente de dubletos e períodos possíveis de tunelamento são grandes. É importante pontuar que apesar da física que governa a dinâmica de tunelamento ser única, a alteração de parâmetros como força de interação, potencial externo ou número de partículas torna o regime de tunelamento mais ou menos acessível ao experimento.

5.4 Autoaprisionamento ou Longos Períodos de Tunelamento?

Apesar do modelo simples de hamiltoniana de muitos corpos usado aqui não ser suficientemente realístico para grandes números de partículas ($N \geq 200$), nossa análise aponta uma explicação para a não observação de tunela-

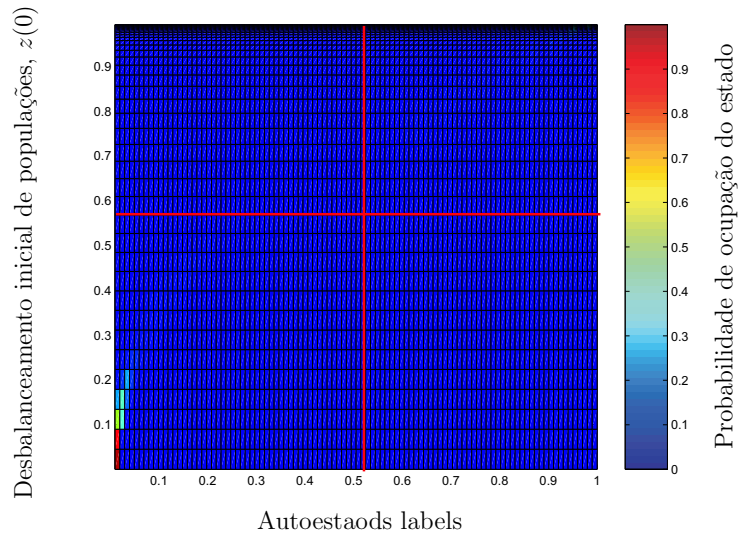


Figura 5.10: A probabilidade de ocupação da base de autoestados da hamiltoniana (eixo horizontal) para desbalanceamento inicial de populações (eixo vertical), $z = \langle J_z(t=0) \rangle / N$. Os parâmetros usados foram $N = 100, \alpha/\Lambda = -0.4$. A linha vertical separa os estados completamente não degenerados daqueles (à esquerda da linha) daqueles que formam dubletos quase degenerados (à direita da linha). A linha vermelha horizontal foi desenhada em $z_c(t=0)$.

mento na experiência [1] completamente diferente da usual. Não existem não-linearidades neste sistema e logo o processo de tunelamento é explicado unicamente em termos das condições iniciais e das propriedades espectrais da hamiltoniana de muitos corpos. Nesse contexto, o espectro é dividido em duas regiões, uma das quais consistindo em dubletos. Quando o desbalanceamento inicial de populações é suficientemente grande somente os estados de dubleto são apreciavelmente ocupados pela condição inicial. No entanto a ocupação mesmo que pequena da parte mais baixa do espectro sempre contribuirá com uma frequência de oscilação grande. Para pequenas janelas temporais o sistema apresenta oscilações de pouca amplitude. Entretanto, para maiores janelas temporais o tunelamento macroscópico se torna evidente, mesmo que este possua muitas vezes período de tunelamento maior que os tempos característicos dos experimentos. Essa é uma explicação alternativa para o fenômeno de autoaprisionamento e acreditamos que a realização de um experimento similar àquele da referência [1] usando um menor número de partículas ajudaria a tornar mais claro a não observação de tunelamento quando o desbalanceamento de populações entre os dois lados do poço de potencial duplo é muito grande.

Considerações Finais

Nesta dissertação estudamos dois exemplo de tunelamento coerente num poço de potencial duplo. O primeiro exemplo é um modelo esquemático que tem como objetivo uma compreensão clara e didática da dinâmica oscilatória de um sistema consistindo em uma partícula num poço duplo sujeito a decoerência. Esse modelo se basea na analogia com um spin-1/2 na presença de uma campo magnético constante. Usamos a forma de Lindblad [21] para obter a evolução temporal da matriz densidade no caso de acoplamento com dois reservatórios distintos à temperatura nula. Em ambos os casos, vemos que o acoplamento com o reservatório localiza a partícula no poço duplo. É importante ressaltar que estamos nos referindo a uma localização no sentido clássico estatístico da palavra, ou seja, a partícula se localiza em um, outro, ou ambos os poços. O estado inicialmente puro evolui para um estado completamente misto no limite $t \rightarrow 0$.

A segunda parte dessa dissertação consiste num exemplo realístico de tunelamento num sistema de muitos corpos, realizado experimentalmente em 2005 [1]. Um condensado de Bose-Einstein evolui num poço de potencial duplo e as condições iniciais são controladas experimentalmente. Na realização do experimento, o condensado é colocado na armadilha magnética de forma a ter um dado número de bósons, dentre os 1150, de cada lado do poço duplo. Isso é feito assimetrizando o potencial e esperando o equilíbrio do sistema ser atingido, quando então, o potencial é simetrizado de forma não adiabática. O sistema então evolui no poço simétrico e sua dinâmica é observada através de imagens de absorção. Quando há um desbalanceamento populacional entre os dois lados do poço maior que um valor crítico, oscilações de Josephson não são mais observadas e o sistema aparenta es-

tar localizado. Note que aqui, novamente, fala-se de localização no sentido quântico estatístico, já que flutuações das partículas individuais continuam a ocorrer. A função de onda macroscópica do BEC aparenta localizar. Os autores desse trabalho experimental atribuem essa “transição de fase” a um fenômeno chamado *self-trapping* ou autoaprisionamento, que é previsto no contexto de um campo médio, um tratamento muito usado, geralmente com sucesso, para sistemas de muitos corpos.

No presente trabalho, questionamos a passagem para o regime de *self-trapping* no caso da experiência acima. Investigamos esse mesmo sistema, agora do ponto de vista de uma hamiltoniana de muitos corpos restrita a dois modos, na formulação de Bose-Hubbard. Apesar do modelo de dois modos não ser suficientemente realístico para sistemas com um grande número de partículas ($N \geq 200$), ele oferece uma explicação completamente diferente para a não observação de tunelamento no experimento analisado. Também observamos uma “transição de fase” no mesmo valor crítico de desbalanceamento inicial relativo de populações daquele encontrado na referência [1]. No entanto, do ponto de vista da hamiltoniana de muitos corpos, a transição de fase é relacionada a dois ingredientes: às propriedades espectrais da hamiltoniana, que possui uma região aproximadamente harmônica e outra composta por dubletos com pequena separação interna; e às condições iniciais que, para um grande desbalanceamento de populações em cada lado do poço, apresentam probabilidade de ocupação concentrada nos dubletos. Nesse caso, o período predominante de tunelamento macroscópico é dado aproximadamente por $t \simeq \hbar/\Delta E$, onde ΔE é o espaçamento interno do dubleto com maior probabilidade de ocupação no estado inicial. Sabemos também que o espaçamento interno dos dubletos presentes no espectro da hamiltoniana de muitos corpos diminui com o aumento do número total de partículas N . Desse ponto de vista, acreditamos que a não observação de tunelamento para determinadas condições iniciais nos experimentos com BECs num poço duplo é um problema de janela temporal do experimento. O tunelamento ocorreria se esperássemos mais tempo. Já que com 1150 partículas o período de tunelamento seria muito grande comparado até ao tempo de vida do condensado, acreditamos que só um experimento que usasse um menor número de partículas seria capaz de “flagrar” o tunelamento macroscópico no caso de grande desbalanceamento inicial relativo de populações nos poços de potencial.

Quanto a um possível prosseguimento do trabalho, é importante comen-

tar que recentemente foi apontado na referência [26] que alguns termos excluídos do modelo de dois modos de Bose-Hubbard podem ter um papel importante na situação experimental. Os novos termos refletem a física da transferência de átomos de um poço para o outro devido a colisões. A inclusão desses novos termos pode ser implementada na hamiltoniana de Bose-Hubbard adicionando uma quantidade proporcional a J_x^2 . O parâmetro de controle de J_x^2 é a sobreposição relativa entre as autofunções da esquerda e da direita. No entanto, é imprescindível pontuar que o espectro desse modelo de dois modos “aprimorado” tem a mesma estrutura daquele usado aqui, i.e. esse novo espectro de energia é também dividido numa região de dubletos e uma região sem dubletos. Isso nos indica que a interpretação aqui encontrada como alternativa ao autoaprisionamento deve ser confirmada na adaptação do presente trabalho à hamiltoniana modificada, proposta em [26]. Outra possibilidade de chegarmos mais perto da realidade seria estender nosso estudo para uma hamiltoniana de muitos corpos com muitos modos. Esse trabalho requer um tratamento numérico muito sofisticado e temos dúvidas se os resultados seriam interpretáveis fisicamente.

Para concluir, é interessante notar que os dois exemplos estudados no presente trabalho investigam formas de localização em sistemas tunelando coerentemente num poço de potencial duplo. No primeiro caso confirmamos o que já era esperado, i.e. que a decoerência localiza o sistema ao afetar os termos fora da diagonal da sua matriz densidade. No segundo caso, no entanto, refutamos a localização sugerida pela teoria de campo médio. Apresentamos uma interpretação alternativa na qual somente a condição inicial não é capaz de localizar o sistema, mas sim retardar seu tunelamento. Esperamos que experimentos possam ser elaborados no futuro próximo para verificar uma ou outra interpretação.

BIBLIOGRAFIA

- [1] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani e M. K. Oberthaler, *Physical Review Letters* **95**, 010402 (2005).
- [2] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani e M. K. Oberthaler, *Physical Review Letters* **95**, 010402 (2005).
- [3] G. A. Gamow, *Zeits. f. Physik* **51**, 204 (1928); **52**, 510 (1928).
- [4] E. Condon e R. Gurney, *Nature* **122**, 439 (1928).
- [5] E. Condon e R. Gurney, *Physical Review* **33**, 127 (1929).
- [6] F. Hund, *Zeits. f. Physik* **43**, 805 (1927).
- [7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique Quantique*, Vol. 1, Hermann, France, 1977.
- [8] L. Nordheim, *Z. Physik* **46**, 833 (1927).
- [9] J. R. Oppenheimer, *Physical Review* **31**, 66 (1928).
- [10] B. D. Josephson, *Physics Letters* **1**, 251 (1962).
- [11] P. L. Anderson e J. W. Rowell, *Physical Review Letters* **10**, 230 (1963).
- [12] A. Barone e P. Paterno, *Physics and Applications of the Josephson Effect*, Wiley and Sons, Nova Iorque (1982).
- [13] A. Armour, Notes on Decoherence, 2002
- [14] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Annals of Physics (NY)* **149**, 374 (1983)

-
- [15] A. J. Leggett *et al.*, *Review of Modern Physics* **59**, 1 (1987)
- [16] D. Giulini, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer-Verlag Telos, 1996.
- [17] A. N. Salgueiro, A. F. R. de Toledo Piza, J. G. Peixoto de Faria and M. C. Nemes, *Physical Review A* **64**, 032113 (2001).
- [18] M. O. Terra Cunha, M. C. Nemes, *Physics Letters A* **329**, 409 (2004).
- [19] R. C. de Berrêdo, *et al.*, *Physica Scripta*, **57**, 4, 533 (1998).
- [20] W. H. Zurek, *Physics Today* **44**, 36, (1991).
- [21] G. Lindblad, *Com. Mat. Phys.* **48**, 119, 1976.
- [22] W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation: Identity Crisis for Indistinguishable Particles*, Proceedings of the Symposium “One Hundred Years of the Quantum: from Max Planck to Entanglement”, University of Puget Sound, Tacoma, Washington, October 29-30, 2000.
- [23] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner e T. J. Greytak, *Physical Review Letters*, **81**, 3811 (1998).
- [24] J. E. Simsarian *et al.*, *Physical Review Letters*, **85**, 2040 (2000).
- [25] J. L. van Hemmen e A. St, *Theory of mesoscopic quantum tunneling in magnetism: a WKB approach in Quantum Tunneling of Magnetization - QTM '94*, L. Gunther and B. Barbara, Eds., Kluwer Academic Publishers Dordrecht/Boston/London (1995).
- [26] D. Ananikian and T. Bergeman, *Physical Review A*, 013604 (2006).
- [27] S. N. Bose; *Z. Phys.*, **26(6)**, 178 (1924).
- [28] A. Einstein, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss.*, **Bericht 22**, 261 (1924).
- [29] A. Einstein, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss.*, **Bericht 3**, 18 (1925).
- [30] A. Einstein, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss.*, **Bericht 1**, 3 (1925).
- [31] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman e E. A. Cornell, *Science*, **269**, 198 (1995).

- [32] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn e W. Ketterle, *Physical Review Letters*, **75**, 3969 (1995).
- [33] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H. C. Ngerl e R. Grimm, Scienceexpress/www.scienceexpress.org/5December2002/Page1/10.1126///science.1079699
- [34] W. Ketterle e N. J. van Druten, *Phys. Rev. A*, **54**, 656 (1996).
- [35] A.F.R. de Toledo Piza, *Brazilian Journal of Physics*, **34 n°3B**, 1102 (2004).
- [36] M. Kozuma, L. Deng, E. W. Hagley, J. Wen, R. Lutwak, K. Helmerson, S. L. Rolston, e W. D. Phillips, *Physical Review Letters*, **82**, 871 (1999).
- [37] M. Kozuma *et al.*, *Science* **286**, 2309 (1999)
- [38] J. Denschlag *et al.*, *Science*, **287**, 97 (2000)
- [39] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- [40] B. P. Anderson e M. A. Kasevich, *Science* **282**, 1686 (1998).
- [41] A. F. R. de Toledo Piza, *Condensados Atômicos de Bose Einstein*, Curso de Verão, IFUSP, (2002).
- [42] Michael Albiez, PhD thesis: "<http://www.kip.uni-heidelberg.de/matterwaveoptics/thesis.htm>", (2005).
- [43] N. Bogoliubov, *Journal of Physics USSR*, **11**, 23 (1947).
- [44] E. P. Gross, *Nuovo Cimento*, **20**, 454 (1961).
- [45] E. P. Gross, *Journal of Mathematical Physics*, **4**, 195 (1963).
- [46] L. P. Pitaevskii, *Sovietic Physics JETP*, **13**, 451 (1961).
- [47] L.D. Carr, Charles W. Clark and W.P. Reinhardt, *Physical Review A* **62**, 063610 (2000); L.D. Carr, Charles W. Clark and W.P. Reinhardt, *Physical Review A*, **62**, 063611 (2000).
- [48] K.W. Mahmud, J.K. Kutz and W.P. Reinhardt, *Physical Review A*, **66**, 063607 (2002).

-
- [49] Khan W. Mahmud, Heidi Perry and William P. Reinhardt, *Physical Review A* **71**, 023615 (2005).
- [50] G. Milburn *et al*, *Physical Review A* **55**, 4318 (1997).
- [51] A.P. Hines, R.H. McKenzie and G.J. Milburn, *Physical Review A* **67** 013609 (2003).
- [52] A.J. Leggett, *Review of Modern Physics* **73**, 307 (2001).
- [53] D. Ananikian and T. Bergeman, *Physical Review A* **73**, 013604 (2006).
- [54] J.R. Anglin, P. Drummond, A. Smerzi, *Physical Review A* **64**, 063605 (2001).
- [55] H.-Q. Zhou, J. Links, R.H. McKenzie and X. -W. Guan, *Journal of Physics A* **36**, L113 (2003).
- [56] J. Schwinger, *Quantum Theory of angular momentum*, L. Biedenharn e H. Van Dam, Eds., Academic Press, Nova iorque (1965).
- [57] A. N. Salgueiro, M. C. Nemes, M. D. Sampaio e A. F. R. de Toledo Piza, *Physica A*, **290**, 4 (2001).

“Não sou nada. Nunca serei nada. Não posso querer ser nada. À parte isso, tenho em mim todos os sonhos do mundo.” (Fernando Pessoa)