

Héliques Mesquita Frazão

**Transição de fase quântica em um hamiltoniano efetivo
de três modos para bósons interagentes**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: José Geraldo Peixoto de Faria
Coorientador: Giancarlo Queiroz Pellegrino

Belo Horizonte

2018

Agradecimentos

À Deus.

Aos meus pais e à minha esposa pelo apoio incondicional.

À Maria Carolina Nemes, orientadora original deste trabalho, que nos deixou tão repentinamente, por toda a sua paciência e atenção de ‘mãe’ para com tantos estudantes. Que Deus a tenha em sua infinita Graça e Misericórdia!

Às pessoas que contribuíram diretamente para a finalização deste trabalho: José Geraldo Peixoto de Faria e Giancarlo Queiroz Pellegrino (professores do CEFET-MG).

Aos colegas do 302 e seus agregados pela amistosa convivência.

Ao CNPq e à CAPES pelo apoio financeiro.

O trabalho de muitas gerações demonstrou a existência de ordem e regularidade nos fenômenos naturais, daquilo que chamamos de leis da Natureza. O estudo que ora iniciamos pode ser empreendido pelos mais diversos motivos, mas uma de suas maiores recompensas é uma melhor compreensão da simplicidade, beleza e harmonia dessas leis. É uma espécie de milagre, como disse Einstein: “O que a natureza tem de mais incompreensível é o fato de ser compreensível.”

(H. M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica*)

“Na verdade, tudo é d’Ele, por Ele e para Ele. A Ele a glória para sempre. Amém!”

(Rm 11,36)

“Quem não pode fazer grandes coisas, faça ao menos o que estiver na medida de suas forças; certamente não ficará sem recompensa.”

(Santo Antônio de Pádua)

Resumo

Neste trabalho, nós estudamos um hamiltoniano efetivo de três modos de frequência descrevendo bósons interagentes. Podemos considerar estes bósons como *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora, na configuração do ângulo mágico, ou como átomos frios armadilhados opticamente em um poço triplo, com a conservação do desequilíbrio das populações. Verificamos que as propriedades do espectro quântico, que caracterizam uma transição de fase quântica, possuem uma analogia com as propriedades do espaço de fase clássico de uma função hamiltoniana obtida no limite termodinâmico. O adensamento de níveis no espectro, em torno do estado fundamental e do mais energético, corresponde ao surgimento de uma separatriz (uma trajetória que separa librações e rotações) no espaço de fase clássico. Esta analogia clássica nos permite, ainda, a caracterização das fases e a determinação da ordem da transição, além da construção de um diagrama de fase.

Palavras-chave: Hamiltoniano de três-modos, Transição de fase quântica, Análise clássica.

Abstract

In this work, we study an effective three-mode Hamiltonian describing interacting bosons. These bosons can be considered as exciton-polaritons in a semiconductor microcavity at the magic angle or cold atoms optically trapped in a triple-well potential with a population imbalance conservation. We observe that the quantum properties of the spectrum characterize a quantum phase transition. We realize a thermodynamic limit of the Hamiltonian and we study the classical properties of the phase space. We observe a close analogy between quantum and classical properties: an inflection point (a level approximation) in spectrum corresponds to a separatrix (a trajectory that separates librations and rotations) in phase space. This analogy allows us to characterize the system phases, the order of the transition, and also to construct a phase diagram.

Keywords: Three-mode Hamiltonian, Quantum Phase Transition, Classical Analysis.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	CONCEITOS FUNDAMENTAIS	17
2.1	Condensado de Bose-Einstein	17
2.2	Transição de fase quântica	22
2.3	Hamiltoniano efetivo de três modos	23
2.3.1	<i>Exciton-polaritons</i> em uma microcavidade semicondutora	24
2.3.2	Átomos frios em um poço de potencial triplo	25
2.3.3	Um hamiltoniano efetivo	27
3	ANÁLISE QUÂNTICA	29
3.1	Comportamento do espectro	29
3.2	Discussão do espectro e transição de fase quântica	34
4	ANÁLISE CLÁSSICA	39
4.1	Limite termodinâmico do hamiltoniano	39
4.2	Comportamento do espaço de fase	41
4.2.1	Análise dos pontos críticos de $h(j_z, \phi)$	45
4.3	Comparação dos comportamentos clássico e quântico	51
4.3.1	Caracterização das fases da transição	52
5	TRANSIÇÃO DE FASE QUÂNTICA E EXEMPLOS DE SISTEMAS FÍSICOS	57
5.1	Ordem da transição de fase	57
5.2	Diagrama de fase	58
5.3	<i>Exciton-polaritons</i> em uma microcavidade semicondutora	61
5.4	Átomos frios em um poço de potencial triplo	63
6	CONCLUSÕES	65
	REFERÊNCIAS	67
	APÊNDICES	73
	APÊNDICE A – HAMILTONIANO DE <i>EXCITON-POLARITONS</i> EM UMA MICROCAVIDADE SEMICONDUTORA	75

A.1	<i>Excitons e fótons</i>	75
A.2	<i>Exciton-polaritons</i>	76
APÊNDICE B – AMPLIFICAÇÃO PARAMÉTRICA NA CONFIGURAÇÃO DO ÂNGULO MÁGICO		79
B.1	Lasers de bombeio sobre a microcavidade	79
B.2	Configuração do “ângulo mágico”	79
B.3	Amplificação paramétrica	80
APÊNDICE C – HAMILTONIANO DE BÓSONS INTERAGENTES		85
C.1	Estados simetrizados e espaço de Hilbert \mathbb{B}_N	85
C.2	Espaço de Fock e operadores de aniquilação e criação de bósons	87
C.3	Operadores de um corpo, dois corpos ou n corpos	91
C.4	Hamiltoniano de bósons interagentes	93
ANEXOS		95
ANEXO A – ARTIGO PUBLICADO		97

1 Introdução

Um tópico de grande interesse físico e bastante estudado atualmente é a denominada “transição de fase quântica” (TFQ) [1,2]. Diferentemente da transição de fase termodinâmica usual, que é caracterizada por uma temperatura crítica T_c e determinada pelas flutuações térmicas do sistema, a TFQ ocorre para temperatura $T = 0$ e é determinada por flutuações quânticas do sistema. Na TFQ, as alterações observadas no sistema ocorrem quando variamos algum parâmetro no hamiltoniano ao invés da temperatura, como ocorre na transição de fase termodinâmica. No modelo de Ising quântico em um campo transversal, por exemplo, observamos uma TFQ entre as fases ferromagnética e paramagnética quando a intensidade do campo aplicado é variada [1, 3–5]. Como esse exemplo ilustra, pelo estudo da TFQ se obtém um melhor entendimento a respeito do complexo comportamento apresentado por sistemas de muitos corpos [6, 7]. Nos parágrafos a seguir, apresentamos dois sistemas de muitos corpos que são de interesse em nosso trabalho.

O primeiro destes sistemas, que tem sido intensamente pesquisado nas décadas recentes, é a microcavidade semicondutora [8, 9]. Existem muitas características interessantes apresentadas por este sistema como, por exemplo, a possibilidade de formação de um condensado de Bose-Einstein (CBE) em um sistema de estado sólido [10] (inclusive à temperatura ambiente [11]) e a superfluidez [12]. Outra característica interessante está na chamada configuração de “ângulo mágico”, onde podemos observar o fenômeno da amplificação paramétrica da luz emitida pela cavidade [13]. Uma descrição teórica para esse fenômeno pode ser dada considerando-se somente três modos para os *exciton-polaritons* da cavidade¹, denominados de *pump*, *signal* e *idler* [14]. As evidências apontadas pelo experimento descrito em [13] sugerem que somente estes três modos se encontram coerentemente e macroscopicamente populados nesta situação e, assim, podemos considerar um hamiltoniano de três modos na descrição efetiva do sistema.

Outro sistema de muitos corpos de grande interesse atualmente é o de condensados de átomos frios armadilhados em redes ópticas [15, 16], cuja descrição, em geral, pode ser feita por hamiltonianos do tipo de Bose-Hubbard [17, 18]. O interesse em tais sistemas se deve à sua capacidade de simular muitos fenômenos previstos para ocorrer em arranjos de átomos presos, tais como a própria condensação de Bose-Einstein [19, 20], sólitons [21, 22], efeito Josephson para bósons e oscilações não-lineares [23, 24], e também TFQ entre uma fase do tipo isolante de Mott e outra do tipo superfluida [1, 25]. No caso de condensados armadilhados em poços de potencial duplo [26, 27] ou triplo [28, 29], a TFQ observada é entre os regimes dinâmicos de auto-aprisionamento macroscópico e de oscilações de Rabi

¹ Quase-partículas criadas pelo acoplamento entre *excitons* (estados ligados entre elétrons e buracos) do material semicondutor e fótons da cavidade.

(ou de Josephson). Em geral, na descrição destes sistemas por hamiltonianos do tipo de Bose-Hubbard, são negligenciados os termos de interação denominados de “colisão cruzada”, provenientes da superposição entre funções de onda de bósons em diferentes modos. Mas trabalhos recentes apontam a relevância destes para a dinâmica do condensado [29, 30].

O ponto de partida de nosso trabalho é o hamiltoniano de três-modos para bósons interagentes

$$H = \sum_{i=0,1,2} E_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i+j=k+l} \hbar G_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l, \quad (1.1)$$

onde a_i^\dagger (a_i) é o operador criação (aniquilação) de um bóson de energia E_i , que obedece as relações de comutação bosônicas

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

O primeiro termo em (1.1) representa a descrição dos bósons livres, enquanto o segundo representa a interação entre diferentes modos, que obedece a condição: $G_{ijkl} \neq 0$ para $i+j = k+l$, e $G_{ijkl} = 0$ para $i+j \neq k+l$. Utilizando este hamiltoniano podemos descrever um sistema de *exciton-polaritons* numa microcavidade semicondutora na configuração do ângulo mágico, onde a condição $i+j = k+l$ representa a conservação do momento na interação entre diferentes modos. Por outro lado, também podemos considerar o hamiltoniano anterior como descrevendo um sistema de átomos frios armadilhados em um poço de potencial triplo, com a condição $i+j = k+l$ representando a conservação do desequilíbrio das populações dos modos. Nesta descrição, o estudo do hamiltoniano (1.1), que é essencialmente diferente do tipo de Bose-Hubbard, nos revela que a dinâmica dos condensados sujeita apenas ao termo de interação de colisão cruzada (espalhamento entre os três modos) resulta numa TFQ entre as fases de auto-aprisionamento macroscópico e de oscilações.

Recentemente a investigação da TFQ tem sido auxiliada por uma análise clássica feita no limite termodinâmico de alguns modelos quânticos de muitos corpos. Esta análise se soma a outras ferramentas existentes para o estudo da TFQ, como o estudo das propriedades do estado fundamental e as medidas de emanhamento [31, 32] em torno do ponto crítico. Vários modelos foram estudados neste contexto, por exemplo, o modelo de Lipkin [33] e o modelo de emparelhamento [34, 35] (ambos da física nuclear), o modelo de Dicke para a super-radiância na óptica quântica [36, 37], excitons em sistemas bi-camada de elétrons [38, 39], gases de Bose ultra-frios armadilhados em poços múltiplos [29], entre outros [40–42]. Neste trabalho, realizamos esta análise clássica no hamiltoniano de três modos para bósons interagentes (1.1). Notamos nesta análise uma estreita analogia entre os aspectos do espectro quântico e as propriedades clássicas do correspondente limite termodinâmico do modelo. Associada à aproximação de níveis no espectro, que caracteriza uma TFQ, observamos o aparecimento de órbitas fechadas (librações) no espaço de fase clássico. A fase de auto-aprisionamento macroscópico do sistema é caracterizada por

termos unicamente trajetórias abertas (rotações) do espaço de fase, enquanto a fase de oscilações pelo aparecimento das trajetórias fechadas. Além dessa caracterização das fases, a análise clássica nos auxilia na determinação da ordem da transição e na construção de um diagrama de fase.

Nosso trabalho está organizado da seguinte maneira: no capítulo 2, introduzimos brevemente alguns conceitos importantes para o trabalho: condensado de Bose-Einstein e transição de fase quântica; e, além disso, apresentamos o hamiltoniano efetivo de três modos para um sistema de bósons interagentes; verificamos, ainda, como este hamiltoniano pode ser usado na descrição de *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora na configuração do ângulo mágico, como também, na descrição de um átomos frios armadilhados opticamente em um poço de potencial triplo, com a conservação do desequilíbrio das populações. No capítulo 3, analisamos o espectro quântico do hamiltoniano de três modos, onde verificamos um comportamento característico de uma transição de fase quântica; para caracterizar esta transição, calculamos valores médios e a entropia linear no estado fundamental. Em seguida, no capítulo 4, realizamos uma análise clássica do hamiltoniano de três modos. Após reescrevermos o hamiltoniano quântico utilizando os operadores de pseudo-spin, deduzimos uma função hamiltoniana clássica pelo limite termodinâmico do hamiltoniano quântico. Em seguida, analisamos o espaço de fase e a superfície de energia da hamiltoniana clássica, e verificamos uma estreita analogia entre a transição de fase quântica evidenciada pelo espectro, e as alterações no espaço de fase clássico. Nos capítulos 3 e 4, através das análises quântica e clássica do hamiltoniano de três modos apresentado no capítulo 2, deduzimos a presença de uma transição de fase quântica, determinamos os pontos críticos e caracterizamos as fases envolvidas. No capítulo 5, discutimos outras propriedades associadas à transição de fase quântica: a determinação da ordem da transição de fase e a construção de um diagrama de fases. Finalizamos o capítulo com uma aplicação de nossos resultados aos dois exemplos de sistemas físicos: *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora e átomos frios armadilhados em um poço de potencial triplo. Finalmente, no capítulo 6, apresentamos nossas conclusões.

2 Conceitos Fundamentais

Neste trabalho, realizamos uma análise quântica e uma análise clássica de um hamiltoniano efetivo de três modos para um condensado de bósons interagentes, e verificamos que esse sistema apresenta uma transição de fase quântica. Neste capítulo, introduzimos brevemente dois conceitos fundamentais envolvidos em nosso trabalho: condensado de Bose-Einstein (seção 2.1) e transição de fase quântica (seção 2.2). Concluimos este capítulo apresentando o hamiltoniano efetivo de três modos (seção 2.3) e verificamos como este hamiltoniano pode ser usado na descrição de *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora, na configuração do ângulo mágico, como também na descrição de um átomos frios armadilhados opticamente em um poço de potencial triplo, com a conservação do desequilíbrio das populações.

2.1 Condensado de Bose-Einstein

As partículas fundamentais constituintes da matéria são caracterizadas pela propriedade quântica de um momento angular intrínseco, que denominamos *spin*. Os autovalores do observável associado a essa propriedade quântica são determinados através de um número inteiro ou semi-inteiro. As partículas que possuem *spin* inteiro são denominadas bósons, enquanto as partículas de *spin* semi-inteiro são denominadas férmions. Na situação de partículas compostas e energias baixas comparadas a sua energia de ligação, a soma do *spin* de seus componentes, que pode ser um número inteiro ou semi-inteiro, determina a descrição do estado global. Por exemplo, partículas compostas por um número qualquer de bósons ou por um número par de férmions são descritas como bósons (*spin* total inteiro).

As propriedades estatísticas quânticas de uma partícula de *spin* inteiro e sem massa foram estudadas pela primeira vez por S. N. Bose em 1924 [43]. Atualmente, denominamos estas propriedades a estatística quântica de fótons. No ano seguinte, A. Einstein estendeu o trabalho de Bose para um sistema de partículas massivas não-interagentes [44]. Naquele trabalho, a idéia básica do condensado de Bose-Einstein (CBE) foi apresentada: uma transição de fase termodinâmica em que um número macroscópico de partículas se condensa no estado fundamental de mais baixa energia. Tal transição é alcançada para uma temperatura suficientemente baixa e resulta diretamente da estatística de bósons. Essa predição do trabalho de Einstein foi considerada puramente matemática por se tratar de um gás ideal de partículas não-interagentes e, por isso, não obteve atenção da comunidade científica até os resultados experimentais que surgiram na década seguinte.

Experimentos desenvolvidos independentemente por P. L. Kapitza e também por J. F. Allen e A. D. Misener, em 1938 [45, 46], revelaram o fenômeno da superfluidez, o

fluxo totalmente sem viscosidade do hélio (^4He) líquido. Tal fenômeno foi associado à manifestação experimental de um CBE por F. London [47]. No entanto, essa idéia intuitiva de London se confrontava com o fato de o ^4He superfluido ser um sistema fortemente interagente, bem distinto do gás ideal descrito por Einstein. Cerca de uma década mais tarde, surgiu a primeira teoria considerando um gás de bósons interagentes e o efeito da condensação de Bose-Einstein formulada por N. N. Bogoliubov [48]. Por outro lado, uma teoria fenomenológica para a superfluidade em termos do espectro excitado do ^4He líquido foi desenvolvida por L. Landau [49]. Essa teoria obteve suporte pela confirmação experimental do espectro excitado do ^4He , bem como de uma teoria microscópica desenvolvida por R. P. Feynman [50]. Apesar de terem fomentado a discussão a respeito da superfluidade, os conceitos teóricos do CBE, desenvolvidos por Einstein e Bogoliubov, somente obtiveram confirmação experimental em 1995, através de experimentos com gases atômicos diluídos [19, 20].

As condições experimentais para a obtenção do CBE [51] podem ser alcançadas pelo confinamento de gases atômicos bastante diluídos, a baixas temperaturas e com polarização de *spin*, através de armadilhas magnéticas ou armadilhas ópticas de dipolo. Um exemplo destas armadilhas está mostrado na figura 1. Nestas armadilhas, podemos obter um estado de equilíbrio meta-estável que corresponde ao CBE. O estado de equilíbrio do condensado é meta-estável pois, nas correspondentes condições de temperatura e pressão, o estado de equilíbrio termodinâmico corresponderia, para a maioria dos sistemas atômicos, a uma fase sólida. Em outras palavras, a fase gasosa do condensado atômico decairia em uma fase sólida de cristal devido aos processos de recombinação de três corpos. Nas armadilhas acima mencionadas, a densidade do gás é bastante baixa ao ponto de as colisões de três corpos serem raras e, por isso, o sistema possui um tempo relativamente longo para alcançar o estado sólido estável. Devido à baixa temperatura, a estatística quântica dos bósons protagoniza a formação do condensado onde o tempo de termalização interna, devido às colisões de dois corpos, é consideravelmente menor que o tempo de vida da amostra. Isso significa que o tempo requerido para atingir a fase de condensado e o tempo requerido para atingir a fase sólida são suficientemente diferentes e, dessa forma, podemos investigar experimentalmente as várias propriedades da fase de condensado. A figura 2 mostra, através da concentração na distribuição de velocidades na nuvem atômica, a transição de fase do CBE que ocorre para um sistema de átomos de rubídio resfriados [19].

Na década de 70, ocorre o início dos estudos experimentais a respeito de um CBE atômico, com a proposta de resfriamento de átomos por laser em gases diluídos [52–55]. Mas, anteriormente a isso, na década de 60, já houve uma investigação sobre a condensação de uma quase-partícula da física de semicondutores denominada *exciton* [56, 57]. Estas excitações elementares em um semicondutor são formadas pelo acoplamento de um elétron da banda de condução e um buraco da banda de valência. Muitos estudos foram realizados nas últimas décadas, e hoje já temos evidências de um CBE de *excitons* [58]. Entretanto, a

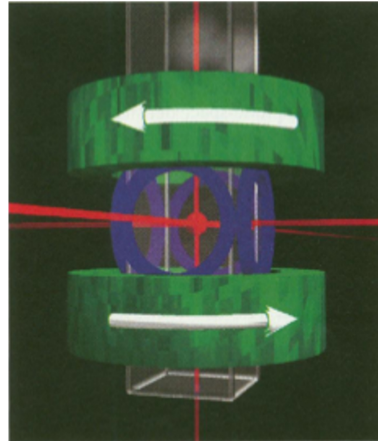


Figura 1 – Figura esquemática retirada da referência [19]: seis feixes de laser se interceptam em uma célula de vidro criando uma armadilha opto-magnética. As bobinas gerando as componentes do campo magnético, um campo de quadrupolo fixo e um campo transversal girante, são mostradas em verde e azul, respectivamente. A célula de vidro está suspensa abaixo de uma câmara de aço (não mostrada) contendo uma bomba de vácuo e uma fonte de átomos de rubídio.

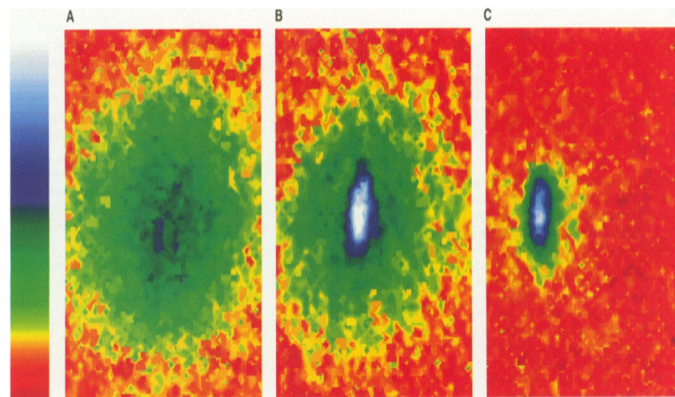


Figura 2 – Distribuição de velocidades (em cores, com a velocidade zero em branco) numa nuvem de átomos de rubídio espalhada espacialmente no plano da figura (retirada da referência [19]): (A) imediatamente antes da formação do condensado; (B) imediatamente após a formação do condensado; e (C) após uma evaporação adicional restando uma amostra do condensado praticamente puro. Observamos uma assinatura do CBE: no meio de uma larga distribuição térmica (cores verde e amarelo), aparece um pico estreito centrado na velocidade zero (cores azul e branco).

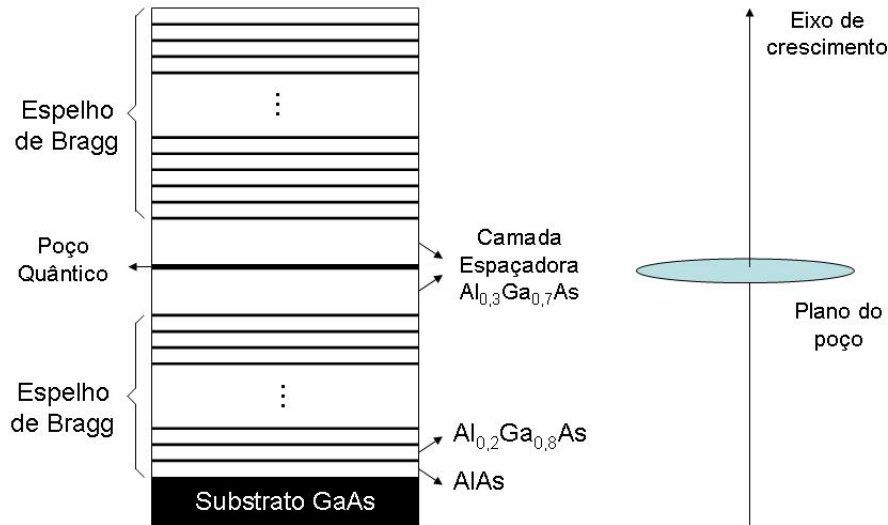


Figura 3 – Microcavidade semicondutora formada por espelhos de Bragg (DBR - *Distributed Bragg Reflector*) e contendo um poço quântico no seu interior (figura adaptada a partir de [62, 63]).

realização de um CBE de *excitons* é caracterizada pela dificuldade experimental encontrada na acumulação de *excitons* na densidade crítica do CBE, já que ocorre a competição com os processos de dissociação dos *excitons* em um plasma de elétrons e buracos e de decaimentos não-radiativos. Além disso, os *excitons* sofrem localização devido a defeitos no cristal e, por isso, um ensemble de *excitons* em um cristal real pode ser formado por muitos *excitons* não idênticos. Na década de 90, houve a proposta da realização de um CBE de *exciton-polaritons*, quase-partículas formadas pelo acoplamento entre *excitons* presos em poços quânticos no semicondutor e fótons de uma microcavidade plana. A Figura 3 mostra uma realização experimental do sistema, enquanto a Figura 4 mostra a formação do *exciton* no poço quântico. A realização de um CBE de *exciton-polaritons* possui algumas vantagens experimentais em relação ao CBE de *excitons*. O acoplamento forte entre os componentes resulta numa quase-partícula de massa efetiva pequena, o *exciton-polariton*, mas com uma função de onda espacialmente estendida, o que pode contornar a dificuldade da localização com *excitons*. Quanto a dificuldade com a densidade limite do CBE, a inserção de múltiplos poços quânticos dentro de uma microcavidade pode diminuir a densidade de excitons por poço, reforçando a densidade bi-dimensional dos *polaritons*. A realização experimental de um CBE de *exciton-polaritons* foi obtida recentemente por diferentes grupos [10, 11, 59–61]. A Figura 5 mostra a formação do CBE de *exciton-polaritons* na referência [10].

Neste trabalho, apresentamos o hamiltoniano de três modos (1.1) que pode ser usado na descrição dos dois tipos de CBE aqui apresentados: de átomos frios armadilhados opticamente em poço de potencial triplo e de *exciton-polaritons* numa microcavidade semicondutora.

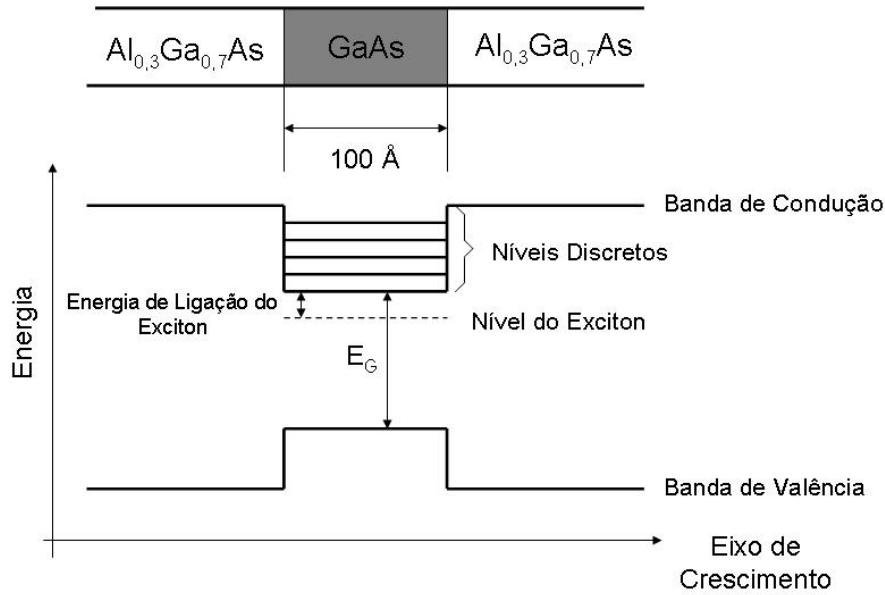


Figura 4 – Distribuição das bandas de energia na formação de um poço quântico (figura adaptada a partir de [62]). Destacamos o nível de energia e energia de ligação para o *exciton*.

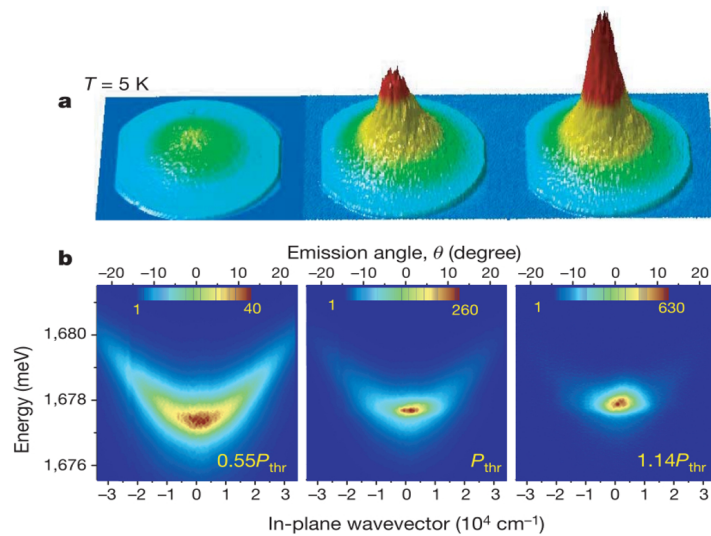


Figura 5 – Comparação entre estados antes (esquerda), no limiar (centro) e depois (direita) da formação do CBE de *exciton-polaritons*. (a) Na intensidade emitida pela microcavidade em função do ângulo, observamos um pico em $\theta_x = \theta_y = 0$ correspondente à condensação dos *exciton-polaritons* no momento $k_{\parallel} = 0$. (b) Na resolução da intensidade em (a) resolvida em energia, observamos a condensação no estado fundamental (Figura retirada de [10]).

2.2 Transição de fase quântica

Um sistema quântico pode sofrer uma transição de fase contínua à temperatura $T = 0$, quando algum parâmetro do hamiltoniano é variado. Denominamos esta mudança de fase no sistema transição de fase quântica [1,2]. Um exemplo simples é o fenômeno verificado no modelo de Ising em um campo externo transversal em função da intensidade do campo aplicado, onde observamos uma transição entre as fases ferromagnética e paramagnética [1]. A mudança observada no sistema pode corresponder também a uma transição na forma ou na configuração geométrica como ocorre, por exemplo, na física nuclear [33, 34]. A transição de fase quântica é causada não pela variação da temperatura, como acontece na transição de fase termodinâmica usual, mas por algum parâmetro do hamiltoniano do sistema. Este parâmetro pode ser, por exemplo, a energia de carregamento de um arranjo de junções Josephson, que controla a sua transição entre supercondutor e isolante, ou ainda, a intensidade do campo magnético em uma amostra que apresenta o efeito Hall quântico, que controla a transição entre os platôs quantizados [2]. Estas transições de fase quânticas possuem interessantes propriedades teóricas e experimentais sendo a mais importante delas a extrema relevância dos efeitos quânticos que não podem ser desprezados.

Uma característica que acompanha a transição de fase quântica é uma não-analiticidade¹ observada na energia do estado fundamental do sistema. Para compreendermos esta alteração do estado fundamental, consideremos um hamiltoniano $H(G)$ que varia em função de uma constante de acoplamento G . Este hamiltoniano pode estar associado, por exemplo, a um sistema de N átomos nos sítios de uma rede. As propriedades físicas do estado fundamental do sistema, em geral, variam suavemente em função da alteração no parâmetro G . Mas pode acontecer o caso, dependendo da forma do hamiltoniano, em que ocorra um cruzamento de níveis entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Isso significa que, para um dado valor do parâmetro $G = G_c$, as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado alternam as posições no espectro, como mostra a figura 6 (a). Assim, temos a formação de uma cúspide em G_c , que corresponde a um ponto de não analiticidade (descontinuidade da primeira derivada) para a energia do estado fundamental em função do parâmetro G . Na situação de um número finito N , pode ocorrer de observarmos, ao invés de um cruzamento, uma repulsão de níveis, como mostra a figura 6 (b). Nesse caso, o cruzamento dos níveis ocorre somente no limite $N \rightarrow \infty$. Mas ambos os casos, o cruzamento ou a repulsão dos níveis, assinalam uma mudança qualitativa que ocorre na natureza das correlações do estado fundamental devido à transição de fase quântica.

A transição de fase quântica ocorre para $T = 0$, enquanto os experimentos em laboratório são realizados a uma temperatura que, embora possa ser muito pequena, é

¹ Consideramos a analiticidade de uma função como a propriedade desta função possuir todas as suas derivadas contínuas.

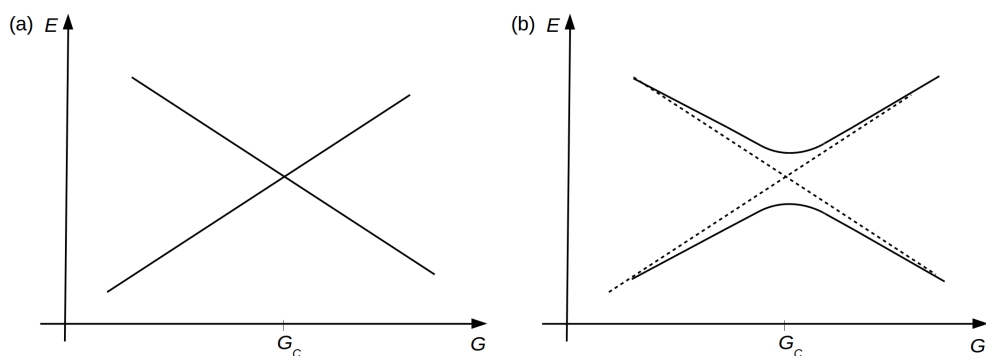


Figura 6 – Autovalores mais baixos da energia de um hamiltoniano $H(G)$. Observamos em (a) o cruzamento de níveis entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado; e em (b), a repulsão entre estes níveis.

necessariamente não nula. Surge, então, a questão de como conectar a transição de fase quântica do sistema com os resultados obtidos a temperatura não-nula. Na realidade, este constitui um dos resultados principais de uma teoria para a transição de fase quântica: descrever as consequências da singularidade que existe em $T = 0$ sobre as propriedades físicas a $T > 0$. Essa abordagem oferece uma compreensão para as propriedades termodinâmicas do sistema para valores do acoplamento G em torno do ponto crítico $G = G_c$. Dessa forma, obtemos uma perspectiva física adicional aos tratamentos convencionais que consideram expansões a partir de situações limites de um acoplamento muito pequeno ($G \rightarrow 0$) ou muito grande ($G \rightarrow \infty$).

Neste trabalho, verificamos uma TFQ em um hamiltoniano efetivo de três modos para um sistema de bósons interagentes, onde o parâmetro variado no hamiltoniano corresponde ao acoplamento G entre os três modos.

2.3 Hamiltoniano efetivo de três modos

Um hamiltoniano efetivo pode ser derivado a partir do hamiltoniano de três modos (1.1),

$$H = \sum_{i=0,1,2} E_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i+j=k+l} \hbar G_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l,$$

pela consideração das constantes de movimento. Verificamos que este hamiltoniano pode ser usado na descrição de *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora na configuração do ângulo mágico, como também na descrição de um condensado de átomos frios armadilhados em um poço de potencial triplo, com a conservação do desequilíbrio das populações. No próximo capítulo, o espectro do hamiltoniano efetivo de três modos será analisado e o seu limite termodinâmico será utilizado na análise clássica no Capítulo 4.

2.3.1 Exciton-polaritons em uma microcavidade semicondutora

O *exciton-polariton* é uma quase-partícula formada a partir do acoplamento entre um *exciton* do material semicondutor e um fóton da microcavidade. Sob certas condições experimentais² podemos modelar os *exciton-polaritons* na microcavidade semicondutora pelo hamiltoniano [8, 14],

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \Omega_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{PP} p_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}, \quad (2.1)$$

onde $p_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ é o operador de criação dos *exciton-polaritons* com vetor de onda no plano da cavidade \mathbf{k} e energia $E_{\mathbf{k}} = \hbar \Omega_{\mathbf{k}}$. O primeiro termo descreve os *exciton-polariton* livres, enquanto o segundo descreve a interação de Coulomb entre diferentes modos dos *exciton-polaritons*. Para valores típicos dos parâmetros experimentais os coeficientes de interação são dados por

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{PP} \simeq V_0 u_{|\mathbf{k}'-\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}} \cdot u_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}'}, \quad V_0 = \frac{6e^2 a_{exc}}{\epsilon_0 A}, \quad (2.2)$$

onde a_{exc} é o raio de Bohr bi-dimensional dos *exciton-polaritons*, ϵ_0 é a constante dielétrica do semicondutor e A é a área de quantização macroscópica. Os parâmetros $u_{\mathbf{k}}$ são denominados coeficientes Hopfield e são dados por

$$u_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\Delta_{\mathbf{k}} + \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}}{2\sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}} \right)^{1/2}, \quad (2.3)$$

onde $\Delta_{\mathbf{k}} = E_{cav}(\mathbf{k}) - E_{exc}(\mathbf{k})$ é o *detuning* (dessintonia) entre fótons e *excitons* e Ω_R é energia de interação de Rabi entre fótons e *excitons*.

Uma interessante característica desse sistema é a chamada configuração do “ângulo mágico” na qual observamos uma amplificação da luz emitida pela cavidade [13]. Uma descrição teórica desse fenômeno pode ser conseguida considerando-se apenas três modos para os *exciton-polariton* denominados *pump*, *signal* e *idler* [14]. Na configuração do ângulo mágico, se \mathbf{k}_p é o vetor de onda do bombeio (*pump*), o espalhamento de dois *exciton-polaritons* com este vetor de onda, \mathbf{k}_p , resulta em outros dois *exciton-polaritons* com vetores de onda $\mathbf{0}$ e $2\mathbf{k}_p$. As evidências apontadas pelo experimento [13] sugerem que somente os três modos *signal* ($\mathbf{0}$), *pump* (\mathbf{k}_p) e *idler* ($2\mathbf{k}_p$) são coerentemente e macroscopicamente populados [8, 14]. Nesta situação, podemos aproximar o hamiltoniano (2.1) como

$$\begin{aligned} H = & \hbar(\Omega_s p_s^{\dagger} p_s + \Omega_i p_i^{\dagger} p_i + \Omega_p p_p^{\dagger} p_p) \\ & + \hbar[G_{si} p_s^{\dagger} p_s p_i^{\dagger} p_i + G_{pi} p_p^{\dagger} p_p p_i^{\dagger} p_i + G_{sp} p_s^{\dagger} p_s p_p^{\dagger} p_p \\ & + G_{ss} p_s^{\dagger} p_s p_s^{\dagger} p_s + G_{ii} p_i^{\dagger} p_i p_i^{\dagger} p_i + G_{pp} p_p^{\dagger} p_p p_p^{\dagger} p_p \end{aligned}$$

² Para uma demonstração deste hamiltoniano ver o Apêndice A.

$$+Gp_s^\dagger p_i^\dagger p_p^2 + G^* p_s p_i (p_p^\dagger)^2] \quad (2.4)$$

onde $p_s \equiv p_0$, $p_p \equiv p_{k_p}$, $p_i \equiv p_{2k_p}$, $\hbar\Omega_s \equiv E_0 - V_{0,0,0}^{PP}$, $\hbar\Omega_p \equiv E_{k_p} - V_{k_p,k_p,0}^{PP}$, e $\hbar\Omega_i \equiv E_{2k_p} - V_{2k_p,2k_p,0}^{PP}$. O coeficiente do espalhamento entre os três modos G e os demais coeficientes G_{jk} , ($j, k = s, p, i$) são determinados por combinações dos coeficientes de interação³ $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}^{PP}$. Observamos que a aproximação de três modos (2.4) para os *exciton-polaritons* é idêntica ao hamiltoniano de três modos (1.1) com a devida associação entre os modos $p_s \rightarrow a_0$, $p_p \rightarrow a_1$ e $p_i \rightarrow a_2$ e a condição $i + j = k + l$ representando a conservação de momento na interação entre diferentes modos.

No Apêndice B, partindo do hamiltoniano de três modos (2.4), verificamos o efeito de amplificação paramétrica para os *exciton-polaritons* na configuração do ângulo mágico. No Capítulo 5, utilizaremos um experimento com *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora na configuração do ângulo mágico, como um exemplo de sistema físico para aplicarmos os resultados obtidos nos Capítulos 3 e 4.

2.3.2 Átomos frios em um poço de potencial triplo

A descrição quântica de um sistema de bósons interagentes é dada pelo operador hamiltoniano⁴

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}, \nabla) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}'), \quad (2.5)$$

onde $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ ($\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$) é o operador de campo que aniquila (cria) uma partícula na posição \mathbf{r} , $H(\mathbf{r}, \nabla)$ é o hamiltoniano de uma partícula e $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é o potencial de interação de partículas aos pares. Consideramos a interação entre as partículas descrita por um pseudo-potencial do tipo esfera dura [6],

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.6)$$

onde a é o comprimento de espalhamento de onda, negativo para interação atrativa e positivo para a repulsiva. Podemos considerar a base do espaço de uma partícula, $\{|\phi_i\rangle\}$, como o conjunto de auto-estados do hamiltoniano de uma partícula. Expandindo o operador de campo nesta base obtemos,

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^d \langle \mathbf{r} | \phi_i \rangle a_i = \sum_{i=1}^d \phi_i(\mathbf{r}) a_i, \quad \text{e} \quad (2.7)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | \mathbf{r} \rangle a_i^\dagger = \sum_{i=1}^d \phi_i^*(\mathbf{r}) a_i^\dagger, \quad (2.8)$$

³ A expressão para estes coeficientes pode ser encontrada no Apêndice A.

⁴ Para uma demonstração deste hamiltoniano ver o Apêndice C.

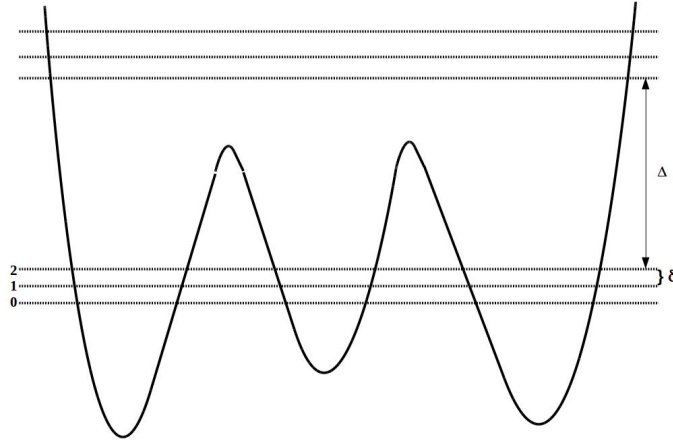


Figura 7 – No limite em que os três primeiros níveis estão bastante afastados dos demais ($\Delta \gg \delta$), podemos imaginar a situação em que somente estes três níveis serão consideravelmente populados.

onde a_i (a_i^\dagger) são os operadores aniquilação (criação) de uma partícula no auto-estado $|\phi_i\rangle$. Usando (2.6) e as relações de transformação (2.7) e (2.8), podemos escrever

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}, \nabla) \phi_j(\mathbf{r}) a_i^\dagger a_j + \frac{V_0}{2} \sum_{i,j,k,l} \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) \phi_k(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}) a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l. \quad (2.9)$$

Reconhecendo $\phi_i(\mathbf{r})$ como as auto-funções normalizadas do hamiltoniano de uma partícula e definindo

$$G_{ijkl} \equiv \frac{V_0}{2\hbar} \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) \phi_k(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

podemos escrever o hamiltoniano de bósons interagentes como

$$\hat{H} = \sum_i E_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j,k,l} \hbar G_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l, \quad (2.11)$$

onde E_i é o autovalor do hamiltoniano de uma partícula correspondente à autofunção $\phi_i(\mathbf{r})$.

O hamiltoniano anterior é bem geral e descreve sistemas de partículas que interagem apenas por interação de dois corpos. Pode representar, por exemplo, um sistema de átomos frios armadilhados opticamente em um poço de potencial triplo. Podemos imaginar a situação em que os três primeiros níveis do poço triplo são igualmente espaçados e em que estes níveis estão bastante afastados dos demais, como mostra a Fig. 7. Nessa situação somente estes três níveis deverão ser consideravelmente populados. Nessa aproximação, o hamiltoniano (2.11) pode ser reescrito como

$$H \approx \hbar(\Omega_0 a_0^\dagger a_0 + \Omega_1 a_1^\dagger a_1 + \Omega_2 a_2^\dagger a_2) +$$

$$\begin{aligned}
& +\hbar[G_{02}a_0^\dagger a_0 a_2^\dagger a_2 + G_{12}a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 + G_{01}a_0^\dagger a_0 a_1^\dagger a_1 + \\
& +G_{00}a_0^\dagger a_0 a_0^\dagger a_0 + G_{11}a_1^\dagger a_1 a_1^\dagger a_1 + G_{22}a_2^\dagger a_2 a_2^\dagger a_2 + \\
& +Ga_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2 + G^* a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2], \tag{2.12}
\end{aligned}$$

onde usamos a conservação da energia no termo de interação, ou seja, consideramos $G_{ijkl} = 0$ se $E_i + E_j \neq E_k + E_l$. Essa condição resulta em uma conservação do desequilíbrio entre as populações nos modos 0 e 2, ou seja, a duas populações variam sempre igualmente. O hamiltoniano (2.12) que obtemos para os bósons interagentes em um poço de potencial triplo é idêntico ao hamiltoniano de três modos (1.1). Os coeficientes na expressão (2.12) acima são determinados pelos G_{ijkl} em (2.10), como

$$\Omega_i = E_i/\hbar - G_{iiii}, \quad G_{ii} = G_{iiii} \quad (i = 0, 1, 2), \tag{2.13}$$

$$G_{ij} = G_{ijij} + G_{jiji} + G_{ijji} + G_{jiij} \quad (i \neq j; i, j = 0, 1, 2), \tag{2.14}$$

$$G = G_{1102} + G_{1120}, \quad G^* = G_{0211} + G_{2011}. \tag{2.15}$$

No Capítulo 5, utilizaremos um exemplo particular de poço de potencial triplo armadilhando opticamente átomos frios, como uma segunda aplicação de sistema físico para nossos resultados.

2.3.3 Um hamiltoniano efetivo

Podemos definir duas constantes de movimento associadas ao hamiltoniano (1.1) pelos operadores

$$\hat{N} = a_0^\dagger a_0 + a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2, \quad \text{e} \quad \hat{D} = a_0^\dagger a_0 - a_2^\dagger a_2 \tag{2.16}$$

que representam, respectivamente, o número total de bósons e a diferença de população entre bósons nos modos 0 e 2. Enfatizamos que a constante D significa a conservação do momento, quando consideramos os polaritons, e a conservação do desequilíbrio entre as populações, quando consideramos os átomos frios. Em termos dos operadores acima, podemos reescrever o hamiltoniano (1.1) como

$$H = H_{ND}(\hat{N}, \hat{D}) + H_{ef}(\hat{n}_0, a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2), \tag{2.17}$$

onde $\hat{n}_0 = a_0^\dagger a_0$. Dessa forma, temos uma parte do hamiltoniano que depende apenas das constantes de movimento \hat{N} e \hat{D} , H_{ND} , e outra parte que depende do número de bósons do modo 0, \hat{n}_0 , e do termo de espalhamento dos três modos, $a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2$. A primeira parte,

H_{ND} , resulta apenas em uma fase global na determinação das auto-funções do sistema e, assim, a evolução temporal é determinada pela segunda parte do hamiltoniano (2.17)

$$H_{ef} = \hbar\delta a_0^\dagger a_0 + \hbar g (a_0^\dagger a_0)^2 + \hbar [G a_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2 + G^* a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2], \quad (2.18)$$

onde

$$\begin{aligned} \delta = & \Omega_0 + \Omega_2 - 2\Omega_1 + N(G_{12} + G_{01} - 4G_{11}) + \\ & + D(3G_{12} - G_{02} + G_{01} - 4G_{11} - 2G_{22}), \end{aligned} \quad (2.19)$$

e

$$g = -2G_{12} + G_{00} + G_{02} - 2G_{01} + 4G_{11} + G_{22}. \quad (2.20)$$

Os espectros dos hamiltonianos (1.1) e (2.18) diferem apenas por uma constante, $H_{ND}(N, D)$, onde N e D são constantes com valores fixos. Podemos escrever a base dos números de ocupação como $|n_0, n_1, n_2\rangle = |n_0, N + D - 2n_0, n_0 - D\rangle$, e, por conveniência e simetria, consideraremos N par e $D = 0$.

No capítulo que segue, faremos uma análise do espectro quântico do hamiltoniano efetivo (2.18).

3 Análise quântica

Neste capítulo, analisamos o espectro do hamiltoniano efetivo de três modos (2.18), deduzido no capítulo anterior,

$$H_{ef} = \hbar\delta a_0^\dagger a_0 + \hbar g (a_0^\dagger a_0)^2 + \hbar [G a_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2 + G^* a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2],$$

para diferentes valores dos parâmetros reescalados g/δ e G/δ . Pelo comportamento apresentado pelo espectro, observamos algumas características que indicam uma transição de fase quântica. O mesmo comportamento pode ser observado para diferentes valores do número total de partículas e, por conta disso, escolhemos apresentar a seguir somente os resultados para $N = 500$.

3.1 Comportamento do espectro

Nesta seção, verificamos o espectro do hamiltoniano anterior reescalado como $E = H_{ef}/\hbar\delta$,

$$E = a_0^\dagger a_0 + \frac{g}{\delta} (a_0^\dagger a_0)^2 + \frac{G}{\delta} a_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2 + \frac{G^*}{\delta} a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2. \quad (3.1)$$

Observamos na expressão acima que o parâmetro reescalado g/δ está relacionado ao termo de quarta ordem em a_0 . O parâmetro G/δ , por sua vez, está relacionado ao termo de acoplamento entre os três modos $a_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2$. Nas figuras 8 e 9 a seguir, observamos um cálculo numérico do espectro quântico do hamiltoniano (3.1), considerando diferentes valores do acoplamento entre os modos G/δ (entre 0.00001 e 0.0035) para um dado valor do coeficiente de quarta ordem g/δ (0, 0.003 e -0.003).

Na figura 8 (a), observamos os autovalores E_i do espectro, considerando uma variação do acoplamento G/δ para o termo de quarta ordem nulo, $g/\delta = 0$. Para $G/\delta = 0$, o hamiltoniano (3.1) se reduz a um oscilador harmônico e, nesse caso, obtemos um espectro com a forma linear. Na figura 8 (a), observamos o que ocorre com o espectro à medida que G/δ cresce a partir de 0: o aparecimento de curvaturas nas extremidades do espectro e, em seguida, a partir de um dado valor do acoplamento ($G/\delta > 0.001$), temos o aparecimento de dois pontos de inflexão (indicando uma mudança de concavidade no espectro) um em cada extremidade. Para valores ainda maiores de G/δ , temos estes dois pontos de inflexão se aproximando do centro do espectro. Podemos observar melhor o comportamento do espectro através dos gráficos da diferença entre autovalores adjacentes ($\Delta E_i = E_{i+1} - E_i$), na figura 10 (a), onde os pontos de inflexão são caracterizados pelos mínimos nesta diferença (cúspides). Temos, para $G/\delta = 0$, uma diferença constante característica de um oscilador harmônico. À medida que G/δ cresce a partir de 0, temos o surgimento de um mínimo

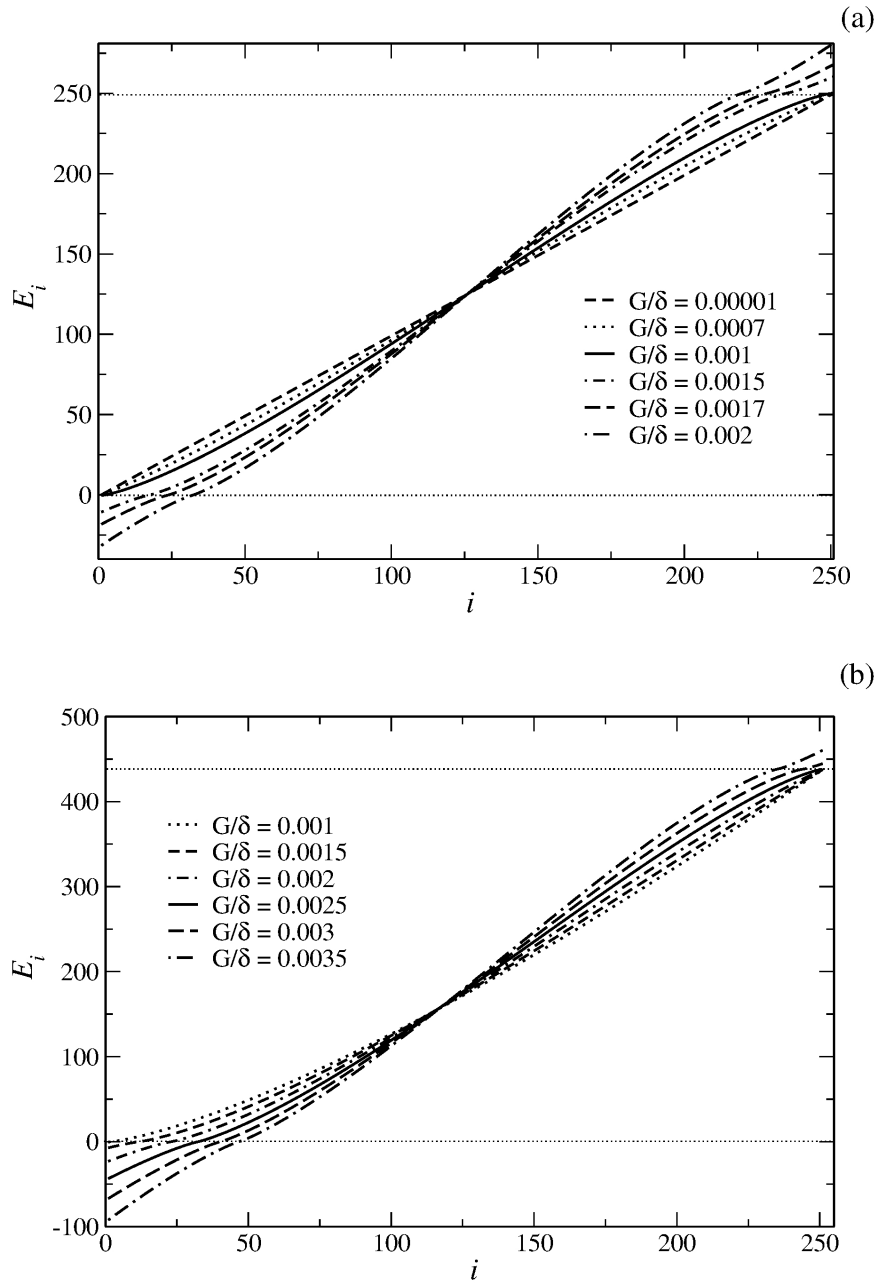


Figura 8 – Autovalores do hamiltoniano E_i em função do índice i para $g/\delta = 0$ (a), $g/\delta = 0.003$ (b), $N = 500$ e diferentes valores G/δ de acoplamento entre os modos. As linhas tracejadas horizontais marcam as energias $E = 0$ e $E = N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$.

nas extremidades e, a partir de um dado valor do acoplamento ($G/\delta > 0.001$), temos o aparecimento de duas cúspides. Para valores ainda maiores de G , temos o deslocamento destes mínimos (cúspides) das extremidades para o centro. Podemos concluir, a partir desta análise das figuras 8 (a) e 10 (a), que o efeito do acoplamento entre os três modos G/δ sobre o hamiltoniano é o de aproximar os autovalores nas extremidades do espectro, o que resulta no aparecimento de dois pontos de inflexão para um dado valor de G/δ (0.001).

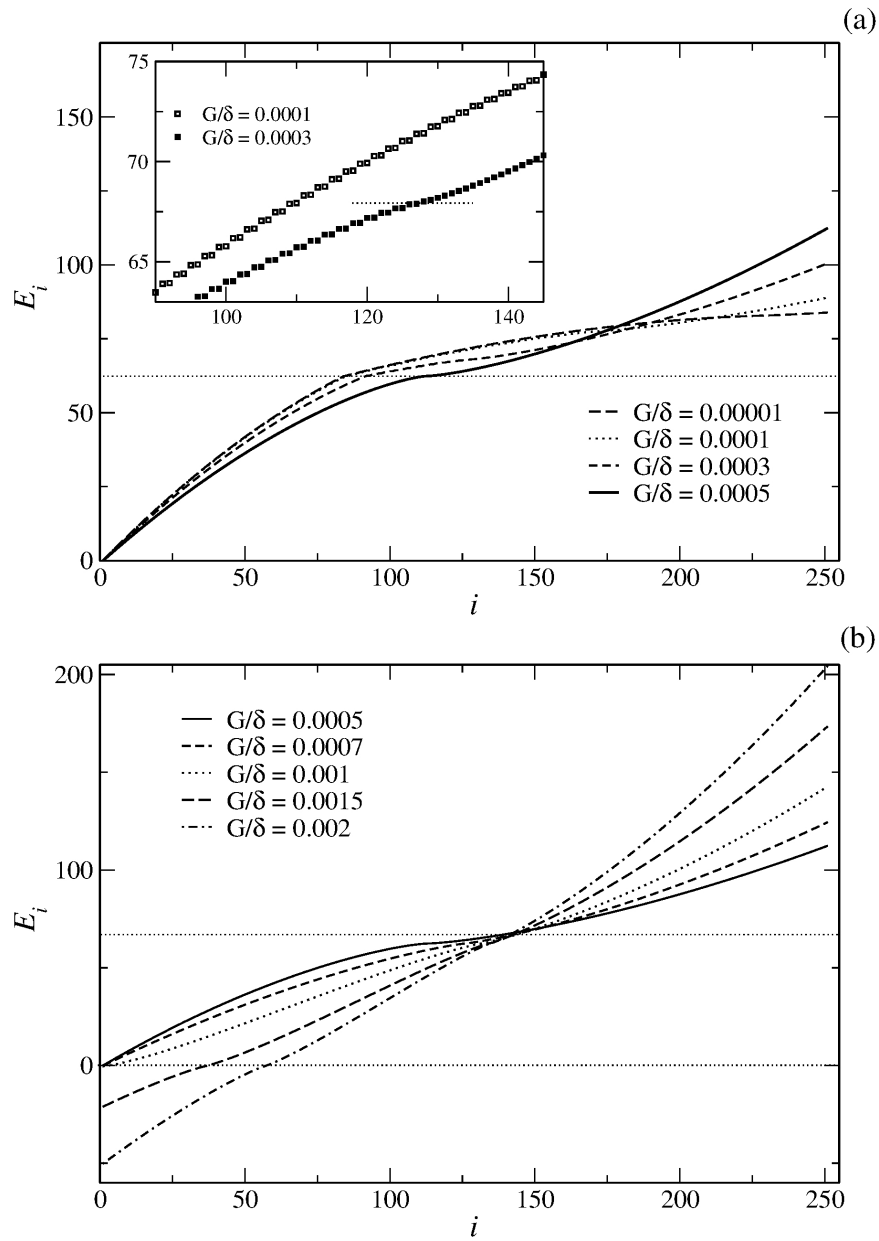


Figura 9 – Autovalores do hamiltoniano E_i em função do índice i para $g/\delta = -0.003$, $N = 500$ e diferentes valores G/δ de acoplamento entre os modos. As linhas tracejadas horizontais marcam as energias $E = 0$, $E = N/6$ e $E = N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$. Em (a), temos um destaque na região de degenerescência.

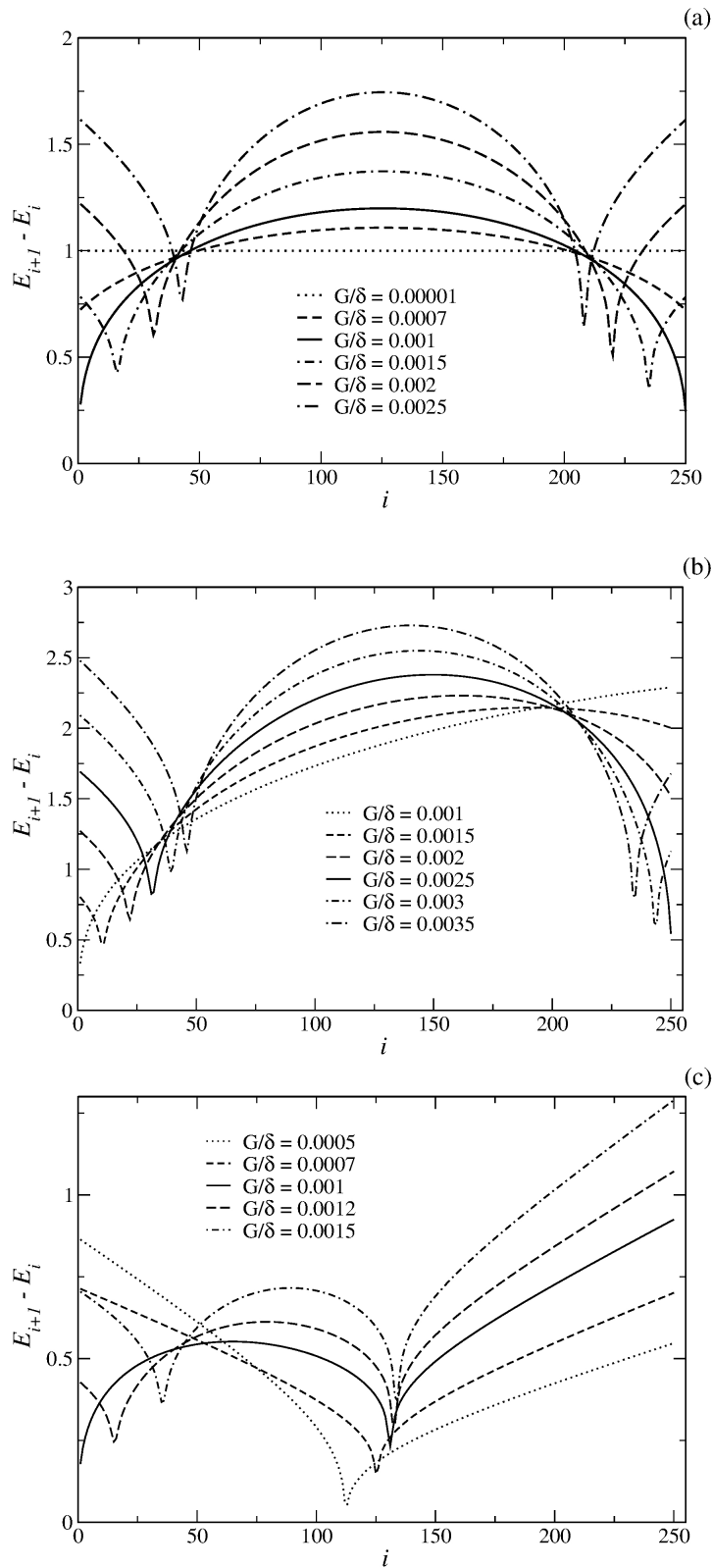


Figura 10 – Diferença entre autovalores adjacentes $E_{i+1} - E_i$ em função do índice i para $g/\delta = 0$ (a), $g/\delta = 0.003$ (b), $g/\delta = -0.003$ (c), $N = 500$ e diferentes valores G/δ do acoplamento entre os modos.

Na figura 8 (b), observamos o espectro quântico do hamiltoniano (3.1) para uma variação do termo de acoplamento entre os modos G/δ , mantendo o termo de quarta ordem constante e positivo, $g/\delta = 0.003$. Para $G/\delta = 0$ e $g/\delta > 0$, o hamiltoniano (3.1) se reduz a um oscilador de quarta ordem e, nesse caso, obtemos um espectro com uma curvatura “parabólica” côncava para cima, ou seja, obtemos uma aproximação dos autovalores próximos ao fundamental ($E = 0$) e um afastamento dos autovalores próximos à energia mais alta. Na figura 8 (b), observamos o que ocorre com o espectro com o aumento do valor de G/δ a partir de 0: aparecimento de dois pontos de inflexão mas que, ao contrário do espectro na figura 8 (a), aparecem de forma separada próximos à energia $E = 0$, para $G/\delta > 0.001$, e ao topo do espectro, para $G/\delta > 0.003$. Podemos observar também este comportamento através dos gráficos da diferença entre autovalores adjacentes, figura 10 (b). Temos, para $G/\delta = 0$, a diferença crescendo linearmente com o índice do estado. À medida que G/δ cresce a partir de 0, temos o surgimento de um mínimo (cúspide) na parte inferior para $G/\delta > 0.001$; aumentando ainda mais o valor do acoplamento G/δ , temos o deslocamento deste mínimo da extremidade para o centro, enquanto outro mínimo (cúspide) se forma na parte superior para $G/\delta > 0.003$. Para valores maiores de G/δ , temos os dois mínimos tendendo para o centro do espectro. Podemos concluir, a partir desta análise das figuras 8 (b) e 10 (b), que o efeito do acoplamento entre os três modos G/δ (aproximar os autovalores das duas extremidades do espectro) associado ao efeito do termo de quarta ordem $g/\delta > 0$ (aproximar autovalores próximos ao fundamental e afastar autovalores próximos ao mais energético) sobre o hamiltoniano é o de gerar dois pontos de inflexão nas extremidades do espectro de forma separada: próximo a energia $E = 0$ para $G/\delta > 0.001$ e próximo ao autovalor mais energético para $G/\delta > 0.003$.

Na figura 9, observamos o espectro quântico do hamiltoniano (3.1) para uma variação do termo de acoplamento entre os modos G/δ , mantendo o termo de quarta ordem constante e negativo, $g/\delta = -0.003$. Para $G/\delta = 0$ e $g/\delta < 0$, o hamiltoniano (3.1) se reduz a um oscilador de quarta ordem invertido e obtemos o espectro com uma curvatura “parabólica” côncava para baixo, ou seja, temos um afastamento dos autovalores próximos ao fundamental ($E = 0$) e uma aproximação dos autovalores próximos à energia mais alta. Observamos, também, uma característica adicional neste espectro: a existência de uma região de autovalores degenerados situada entre $E = N/6$ e $E = N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$. Aumentando o valor do acoplamento entre os modos G/δ a partir de 0, observamos a diminuição dessa região degenerada até desaparecer para $G/\delta > 0.0005$. Observamos, ainda, que para qualquer valor $G/\delta > 0$ temos sempre um ponto de inflexão no espectro próximo ao autovalor mais energético. Para valores $G/\delta > 0.001$, observamos o aparecimento de um outro ponto de inflexão próximo a $E = 0$. Para valores ainda maiores de G/δ temos os dois pontos de inflexão tendendo para o centro do espectro. Podemos observar também o comportamento do espectro para $G/\delta > 0.0005$ (ou seja, sem a existência da região de autovalores degenerados) pelos gráficos da diferença entre autovalores adjacentes,

figura 10 (c). Temos para, $G/\delta = 0.0005$, um ponto de inflexão localizado na energia $E = N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$. À medida que G/δ cresce a partir de 0.0005, temos o surgimento de um segundo mínimo (cúspide) na parte inferior para $G/\delta > 0.001$; aumentando ainda mais o valor do acoplamento G/δ , temos o deslocamento das cúspides das extremidades para o centro. Podemos concluir, a partir desta análise das figuras 9 e 10 (c), que o efeito do acoplamento entre os três modos G/δ (aproximar os autovalores das duas extremidades do espectro) associado ao efeito do termo de quarta ordem negativo $g/\delta < 0$ (afastar autovalores próximos ao fundamental e aproximar autovalores próximos ao mais energético) sobre o hamiltoniano é o de gerar dois pontos de inflexão nas extremidades do espectro de forma separada: próximo ao autovalor mais energético, para $G/\delta > 0$, e próximo a $E = 0$, para $G/\delta > 0.001$.

Na próxima seção, discutimos mais os resultados anteriores sobre o comportamento do espectro e os associamos à indicação de uma transição de fase quântica no sistema.

3.2 Discussão do espectro e transição de fase quântica

O comportamento observado na seção anterior pode ser entendido da seguinte maneira: para $g/\delta = 0$, existe uma espécie de “simetria” entre os estados de maior energia e de menor energia, ou seja, temos o espectro “simétrico” em relação ao centro e suas extremidades. Essa “simetria” se observa para os diferentes valores do acoplamento entre os modos G/δ , pois o aparecimento de pontos de inflexão que observamos ocorre para o mesmo valor G/δ nas duas extremidades do espectro. Ao considerarmos g/δ diferente de zero, ou seja, considerarmos o termo de quarta ordem no hamiltoniano (3.1), essa “simetria” do espectro é alterada de modo que os estados de maior e de menor energias do espectro passam a ter comportamentos diferentes para uma variação do acoplamento entre os modos G/δ :

- com $g/\delta > 0$, os autovalores em torno do estado fundamental ($E = 0$) estão mais próximos e se observa isoladamente um ponto de inflexão para estes valores quando $G/\delta > 0.001$; somente para $G/\delta > 0.003$ se observam os dois pontos de inflexão no espectro;
- com $g/\delta < 0$, os autovalores em torno do estado mais energético estão mais próximos, e se observa isoladamente um ponto de inflexão para estes valores quando $G/\delta > 0$; somente para $G/\delta > 0.001$ se observam os dois pontos de inflexão no espectro.

Mas, em todos os casos, observamos uma acumulação (aproximação) dos níveis de energia próximos ao estado fundamental do espectro que pode ser indício da ocorrência de uma transição de fase quântica [1]. Assim, o aparecimento do ponto de inflexão que observamos no espectro é um sinal da transição de fase pois, em torno dele, existe uma

grande proximidade entre os autovalores – equivalente aos mínimos (cúspides) observados na diferença $\Delta E_i = E_{i+1} - E_i$ na figura 10.

Outra indicação de uma transição de fase quântica poder ser encontrada nas correlações do estado fundamental [1]. Na figura 11 (a), calculamos o valor médio da população de bósons do modo-0, $\langle n_0 \rangle$, no estado fundamental, para diferentes valores do acoplamento entre os modos G/δ . Nesta figura, observamos duas regiões distintas: para $G/\delta < 0.001$, temos o número médio de n_0 aproximadamente igual a zero, enquanto que, para $G/\delta > 0.001$, temos um número médio diferente de zero e crescente com G/δ . Podemos observar também as correlações do estado fundamental pela medida da entropia linear

$$S = 1 - \text{Tr}[\rho_{n_0}^2], \quad (3.2)$$

onde ρ_{n_0} é a matriz densidade reduzida para os bósons do modo-0. A figura 11 (b) mostra a variação da entropia linear do estado fundamental em função do acoplamento entre os modos G/δ . Observamos, novamente, duas regiões distintas: para $G/\delta < 0.001$, temos a entropia linear S crescendo exponencialmente a partir de zero, enquanto que, para $G/\delta > 0.001$, temos a entropia crescendo mais lentamente. Em todo caso, podemos identificar dois comportamentos distintos que estão relacionados a duas fases do sistema.

Podemos caracterizar as duas fases apresentadas pelo sistema, analisando o valor médio $\langle n_0 \rangle$ (figura 11):

- para valores de G/δ abaixo do crítico, temos no estado fundamental a população de bósons concentrada em uma espécie (modo-1), pois a população do modo-0 e, conseqüentemente, do modo-2 são praticamente nulas¹;
- para valores de G/δ acima do crítico, essa concentração nas espécies é alterada e, para valores de G/δ crescentes, temos a população de bósons tendendo a estar distribuídas nas três espécies.

As duas fases encontradas são características em sistemas de condensados de bósons interagentes em poços quânticos e são denominadas respectivamente **auto-aprisionamento macroscópico** e de **oscilações de Rabi (ou de Josephson)** [29]. Na fase de oscilações, a população de cada espécie de bóson oscila entre seus valores máximo e mínimo, ocorrendo a transição entre espécies (ou seja, entre diferentes modos) constantemente sem que exista um modo preferencial. No regime de auto-aprisionamento macroscópico, a população de determinada espécie de bóson se mantém, em média, sempre superior à das outras.

A figura 11 aponta que a transição de fase quântica ocorre para um valor crítico do acoplamento entre os modos $G/\delta \sim 0.001$. No próximo capítulo, realizamos uma análise

¹ Na dinâmica definida pelo hamiltoniano (2.4), as populações dos bósons do modo-0 e do modo-2 são alteradas sempre da mesma maneira pelo termo de acoplamento entre os três modos G (o que resulta na conservação de $D = a_0^\dagger a_0 - a_2^\dagger a_2$).

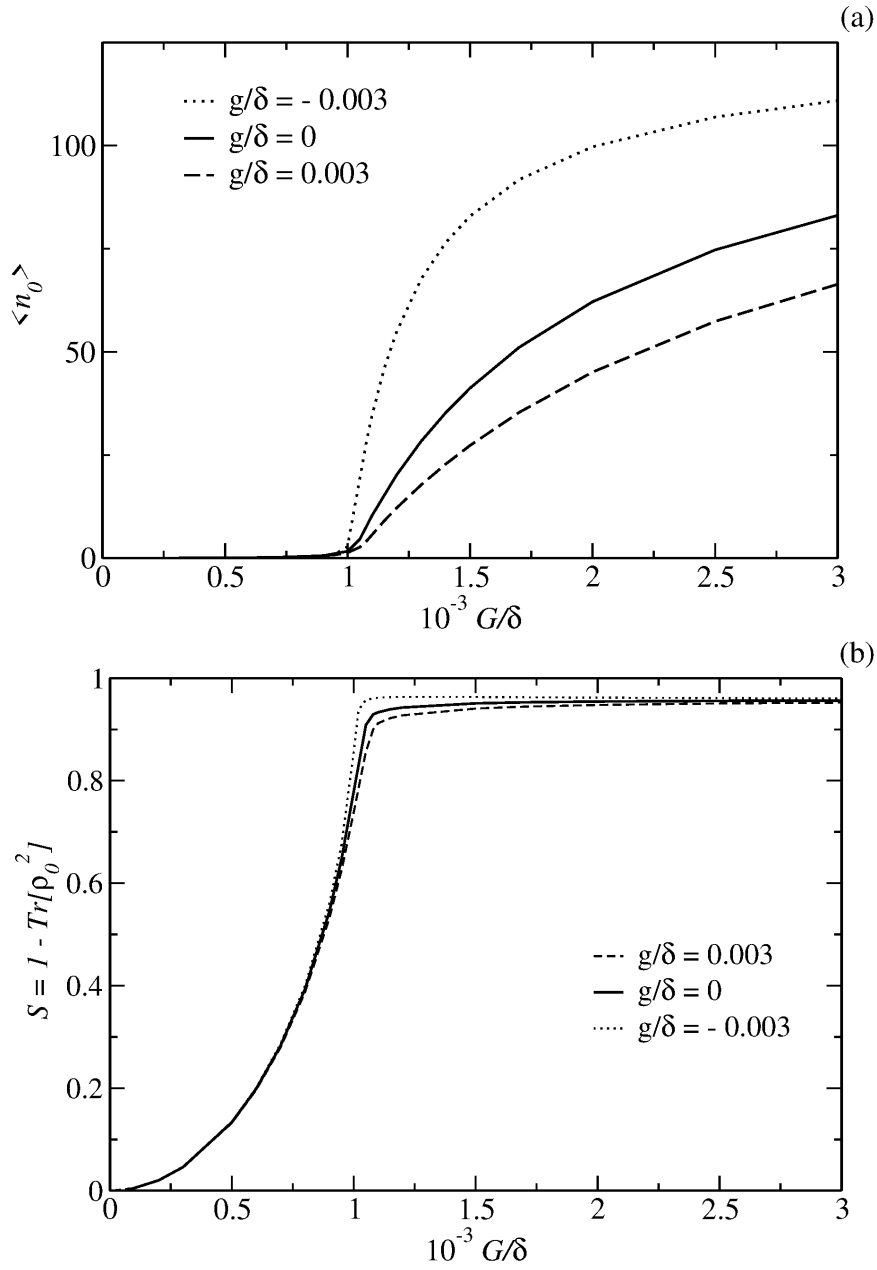


Figura 11 – Cálculo no estado fundamental, em função do acoplamento entre os modos G/δ , para: (a) Valor esperado de n_0 (numero de bósons no modo-0); e (b) Entropia linear $S = 1 - \text{Tr}[\rho_{n_0}^2]$.

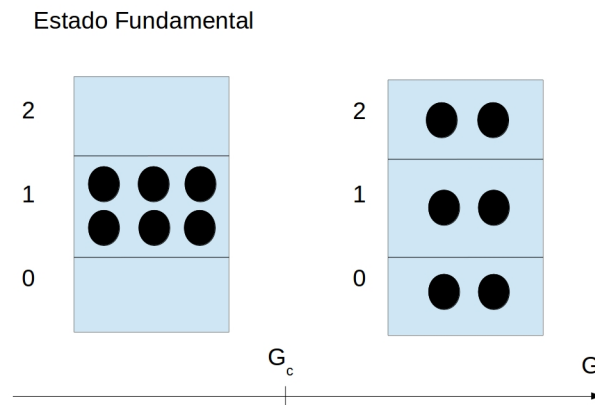


Figura 12 – Ilustração da transição de fase que ocorre no sistema com o aumento de G/δ : para valores abaixo do crítico $G < G_c$, temos os bósons concentrados em uma espécie (modo-1 no estado fundamental) – fase de *auto-aprisionamento macroscópico*; para valores acima do crítico $G > G_c$, essa concentração em uma das espécies é alterada e, para valores de G/δ crescentes, temos as populações tendendo a estar distribuídas nas três espécies – fase de *oscilações*.

clássica do hamiltoniano (3.1) e, a partir desta análise, vemos que o valor crítico de G/δ para a transição de fase pode ser determinado analiticamente. A análise clássica possibilita-nos, também, caracterizar as duas fases apresentadas pelo sistema.

4 Análise clássica

Neste capítulo realizamos uma análise clássica do hamiltoniano efetivo de três modos (2.18), deduzido no capítulo 2,

$$H_{ef} = \hbar\delta a_0^\dagger a_0 + \hbar g (a_0^\dagger a_0)^2 + \hbar [G a_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2 + G^* a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2].$$

Nesta análise, utilizamos o limite termodinâmico do hamiltoniano quântico para obtermos uma função hamiltoniana clássica. Em seguida, analisamos o espaço de fase clássico e a superfície de energia para diferentes valores dos parâmetros g/δ (associado ao termo de quarta ordem) e G/δ (associado ao acoplamento entre os três modos). O comportamento observado nessas quantidades clássicas pode ser estreitamente relacionado com o comportamento do espectro quântico analisado no capítulo anterior. A partir dessa relação, podemos deduzir os valores críticos relacionados à transição de fase quântica, bem como a caracterização das fases envolvidas na transição.

4.1 Limite termodinâmico do hamiltoniano

Antes de proceder ao limite termodinâmico, devemos introduzir os operadores de pseudo-spin e reescrever o hamiltoniano de três modos numa forma conveniente para ser utilizada no limite termodinâmico. Pela dinâmica do hamiltoniano de três modos (2.12), os únicos possíveis auto-estados no formalismo do número de ocupação, $|n_0, n_1, n_2\rangle$, são:

$$|0, N, 0\rangle, |1, N - 2, 1\rangle, \dots, |N/2, 0, N/2\rangle. \quad (4.1)$$

Assim, para um número total de partículas $N = n_0 + n_1 + n_2$, que assumimos ser par, temos $N/2 + 1$ estados possíveis. Este fato permite-nos fazer a tradução desta base numa base de autovetores dos operadores de pseudo-spin \mathbf{J}^2, J_z :

$$|J, -J\rangle, |J, -J + 1\rangle, \dots, |J, J\rangle. \quad (4.2)$$

A correspondência um a um entre estas bases é feita assumindo-se

$$J_z \equiv \hat{n}_0 - \frac{N}{4}, \quad (4.3)$$

tal que $-J < J_z < J$, $J \equiv N/4$. Comparando as operações

$$a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2 |N, D, n_0\rangle = \alpha |N, D, n_0 - 1\rangle \quad (4.4)$$

e

$$a_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2 |N, D, n_0\rangle = \beta |N, D, n_0 + 1\rangle \quad (4.5)$$

com

$$J_{\pm}|J, J_z\rangle = \sqrt{J(J+1) - J_z(J_z \pm 1)}|J, J_z \pm 1\rangle, \quad (4.6)$$

podemos definir os operadores

$$J_+ = J_x + iJ_y \equiv \frac{1}{\sqrt{2n_0(N - 2n_0 + 1)}} a_0^\dagger a_2^\dagger a_1^2 \quad (4.7)$$

e

$$J_- = J_x - iJ_y \equiv a_0 a_2 (a_1^\dagger)^2 \frac{1}{\sqrt{2n_0(N - 2n_0 + 1)}}. \quad (4.8)$$

Em termos dos operadores J_z e J_{\pm} , o hamiltoniano (2.18) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} H_{ef} &= \hbar\delta(J_z + J) + \hbar g(J_z + J)^2 \\ &+ \hbar\{G\sqrt{2(J_z + J)[2(J - J_z) + 1]}J_+ \\ &+ G^*J_- \sqrt{2(J_z + J)[2(J - J_z) + 1]}\}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Podemos obter uma função hamiltoniana clássica a partir do hamiltoniano quântico anterior (4.9). Para isso, devemos reescalar o hamiltoniano quântico dividindo-o por N/V e, em seguida, realizar um limite termodinâmico com $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$, conservando constante a densidade de partículas N/V . Nesse limite, usamos as definições [64, 65]

$$j_k = \lim_{J \rightarrow \infty} \frac{J_k}{J}, \quad (k = +, -, x, y, z) \quad (4.10)$$

e

$$j_x = \frac{1}{2}(j_+ + j_-) = \sqrt{1 - j_z^2} \cos \phi, \quad j_y = \frac{1}{2i}(j_+ - j_-) = \sqrt{1 - j_z^2} \sin \phi, \quad (4.11)$$

onde ϕ e j_z correspondem às variáveis canonicamente conjugadas da função hamiltoniana clássica. Resulta da definição (4.10) que o espectro dos operadores escalonados j_k se torna cada vez mais denso à medida que nos aproximamos do limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Nessa situação, podemos considerar j_k como variáveis contínuas que, pela definição (4.11), podem ser representadas sobre uma esfera unitária. Usando as relações de comutação do momento angular para os operadores de pseudo-spin J_k ,

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \quad (i, j, k = x, y, z), \quad (4.12)$$

onde ϵ_{ijk} é o símbolo antissimétrico, obtemos

$$[j_i, j_j] = \frac{i\hbar}{J} \epsilon_{ijk} j_k, \quad (4.13)$$

de tal forma que os operadores reescalados devem comutar no limite termodinâmico. Além disso, podemos considerar que

$$\{j_i, j_j\} \equiv \frac{J}{i\hbar} [j_i, j_j] = \epsilon_{ijk} j_k, \quad (4.14)$$

corresponde ao parêntese de Poisson das variáveis dinâmicas j_k . Para obter as quantidades reescaladas em J , fazemos H_{ef}/J ,

$$\begin{aligned} \frac{H_{ef}}{J} &= \hbar\delta(j_z + 1) + \hbar g J(j_z + 1)^2 + 2\hbar G J \sqrt{1 - j_z^2} j_+ + 2\hbar G^* J j_- \sqrt{1 - j_z^2} \\ &= \hbar\delta(j_z + 1) + \hbar g J(j_z + 1)^2 + 4\hbar G J(1 - j_z^2) \cos \phi, \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde usamos $G^* = G$ e que $1/J \rightarrow 0$ no limite termodinâmico. Para obtermos o reescalamo $h = H_{ef}/(\frac{N}{V})$, basta multiplicarmos a expressão anterior por $V/4$ lembrando que $J = N/4$. Fazendo isso, obtemos

$$h = h(j_z, \phi) = \delta'(j_z + 1) + g'(j_z + 1)^2 + 4G'(1 - j_z^2) \cos \phi, \quad (4.16)$$

com as constantes reescaladas

$$\delta' = \hbar\delta V/4, \quad g' = \hbar g NV/16, \quad G' = \hbar G NV/16. \quad (4.17)$$

Verificaremos a seguir o comportamento do espaço de fase e da superfície de energia, associados à função hamiltoniana clássica (4.16).

4.2 Comportamento do espaço de fase

Nesta seção, verificamos a superfície de energia e o espaço de fase clássico fazendo

$$\frac{h(j_z, \phi)}{\delta'} = (j_z + 1) + \frac{g'}{\delta'}(j_z + 1)^2 + 4\frac{G'}{\delta'}(1 - j_z^2) \cos \phi, \quad (4.18)$$

Pelas definições (4.17), observamos que as constantes reescaladas $g'/\delta' = J(g/\delta)$ e $G'/\delta' = J(G/\delta)$ são correspondentes aos parâmetros do hamiltoniano quântico (2.18) do termo de quarta ordem e do termo de acoplamento entre os três modos, respectivamente. Consideramos, primeiramente, o termo de quarta ordem nulo ($g'/\delta' = 0$), para diferentes valores do acoplamento entre os modos G'/δ' . Em seguida, consideramos um dado valor para g'/δ' , positivo e negativo, e variamos o valor de G'/δ' . Nas figuras 13 a 16, observamos o espaço de fase $j_z \times \phi$ e a superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para a hamiltoniana (4.16) usando $g'/\delta' = 0$. Para $G'/\delta' = 0$ a superfície de energia é um plano correspondente à função $h(j_z, \phi)/\delta' = j_z + 1$. À medida que G'/δ' aumenta a partir de 0, o plano vai curvando-se (figura 13) até um dado valor de G'/δ' limiar (figura 14), a partir do qual temos o surgimento de pontos extremos de máximo e mínimo (figuras 15 e 16). Nas mesmas figuras, observamos as trajetórias do espaço de fase. Para $G'/\delta' = 0$, temos trajetórias abertas (rotações) em linhas retas correspondentes à função $h(j_z, \phi)/\delta' = j_z + 1 = \text{constante}$. À medida que G'/δ' aumenta, as trajetórias se tornam curvas (figura 13) até a situação limite (figura 14), a partir da qual temos o surgimento dos extremos na superfície de energia e, conseqüentemente, o aparecimento de trajetórias fechadas (librações) em torno destes

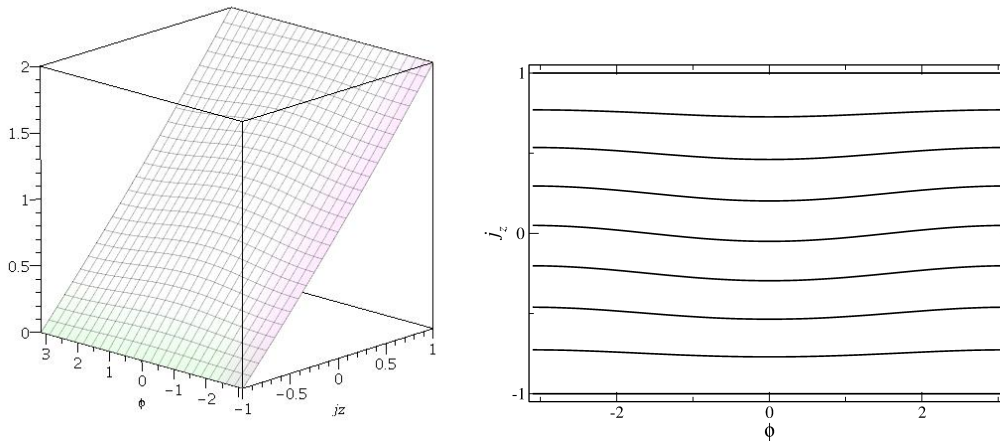


Figura 13 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0$ e $G = 0.0125$.

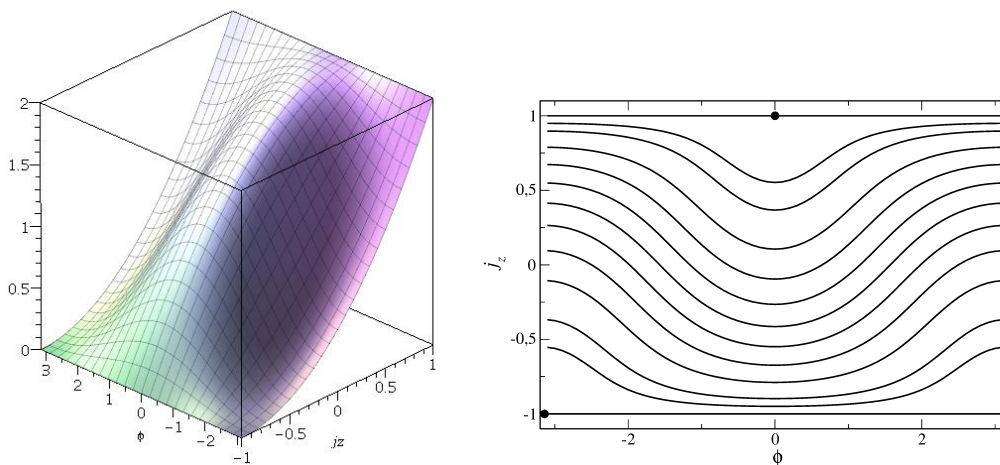


Figura 14 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0$ e $G'/\delta' = 0.125$.

pontos (figuras 15 e 16). Nessa situação, temos uma trajetória particular, denominada **separatriz**, que separa as trajetórias abertas das trajetórias fechadas. Assim, as figuras 15 e 16 mostram duas trajetórias separatrizes, uma para altas energias (em torno do máximo) e outra para baixas energias (em torno do mínimo), que surgem para o mesmo valor do acoplamento G'/δ' (pela figura 14, esse valor limiar é $G'/\delta' \sim 0.125$). Observamos, também, que o aumento do acoplamento G'/δ' resulta na diminuição da área do espaço de fase correspondente às órbitas abertas e a aproximação das duas separatrizes cada vez mais (figuras 15 e 16).

Nas figuras 17 a 24, observamos o espaço de fase $j_z \times \phi$ e a superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para a hamiltoniana (4.16) usando $g'/\delta' = 0.375$ e $-0,375$. Para um acoplamento

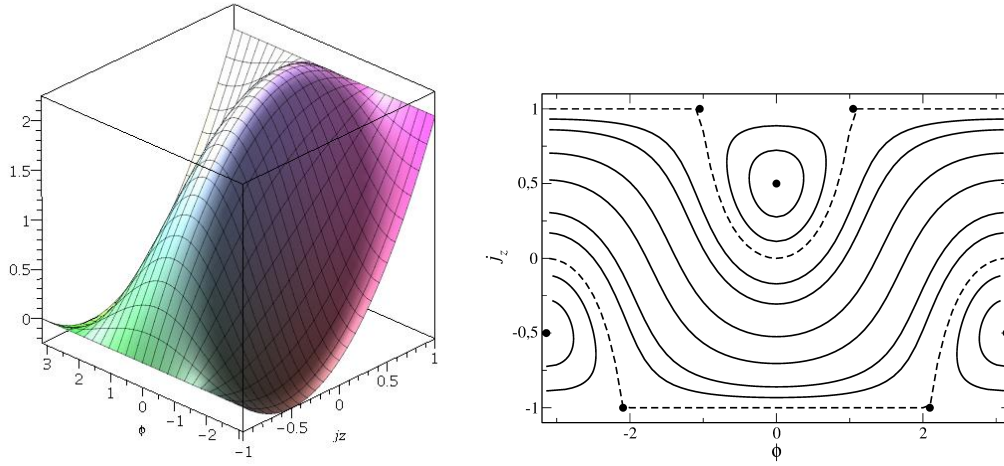


Figura 15 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0$ e $G'/\delta' = 0.25$.

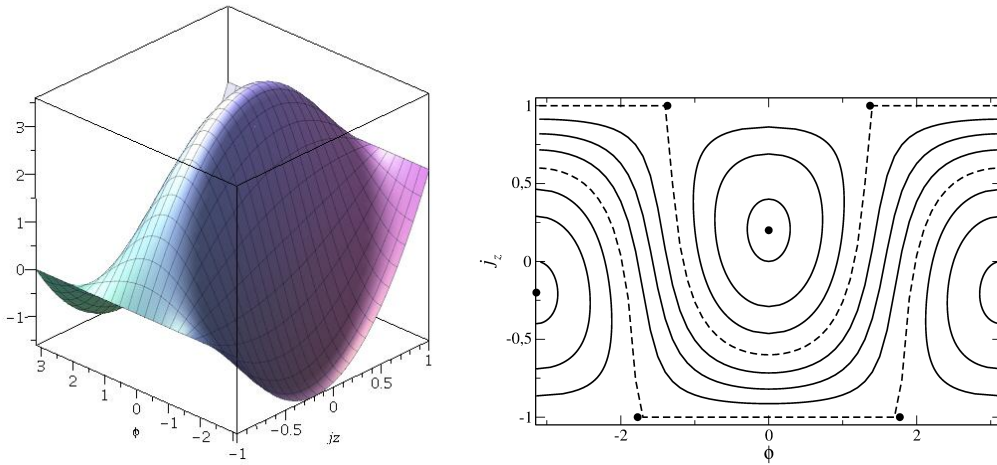


Figura 16 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0$ e $G'/\delta' = 0.625$.

entre os modos nulo, $G'/\delta' = 0$, temos uma superfície de energia de forma parabólica em j_z e constante em ϕ correspondente à função

$$\frac{h(j_z, \phi)}{\delta'} = (j_z + 1) + \frac{g'}{\delta'}(j_z + 1)^2, \quad (4.19)$$

onde $-1 < j_z < 1$. Para o termo de quarta ordem positivo, $g'/\delta' = 0.375$, temos uma parábola côncava para cima e apenas uma raiz na equação (4.19) (figuras 17 a 20), enquanto que, para o termo de quarta ordem negativo, $g'/\delta' = -0.375$, temos uma parábola côncava para baixo e a existência de duas raízes na equação (4.19) para $G'/\delta' < 0.0625$ (figuras 21 a 24). Essa duplicidade é um reflexo da degenerescência que encontramos no espectro do hamiltoniano quântico para $g/\delta < 0.0005$. À medida que o acoplamento G'/δ' aumenta, a superfície parabólica vai curvando-se até um valor limiar (figura 17), a partir do qual temos

o aparecimento de um mínimo (figura 18), para $g'/\delta' = 0.375$, e de um máximo (figuras 21 e 22), para $g'/\delta' = -0.375$. Observamos novamente uma diferença de comportamento, considerando os valores positivo e negativo do termo de quarta ordem: para $g'/\delta' < 0$, temos o surgimento de uma separatriz no espaço de fase para qualquer valor de acoplamento $G'/\delta' > 0$; enquanto que, para $g'/\delta' > 0$, temos o surgimento de uma separatriz para o acoplamento $G'/\delta' > 0.125$. Para um valor ainda maior do acoplamento G'/δ' , temos um outro limiar (figuras 19 e 23), a partir do qual temos o surgimento de um máximo (figura 20), para $g'/\delta' = 0.375$, e de um mínimo (figura 24), para $g'/\delta' = -0.375$. Assim, observamos uma outra diferença de comportamento, considerando os valores positivo e negativo do termo de quarta ordem: para $g'/\delta' < 0$, temos o surgimento de uma segunda separatriz no espaço de fase para o acoplamento $G'/\delta' > 0.125$; enquanto que, para $g'/\delta' > 0$ temos o surgimento de uma segunda separatriz para o acoplamento $G'/\delta' > 0.375$.

Nas figuras 17 a 24, observamos também as trajetórias do espaço de fase. Para o acoplamento entre os modos nulo, $G'/\delta' = 0$, temos trajetórias abertas em linhas retas correspondentes à função (4.19). À medida que o acoplamento G'/δ' aumenta, as trajetórias se tornam curvas até os valores limites de G'/δ' (como mostram as figuras 17, 18 e 23), a partir dos quais temos o surgimento dos extremos na superfície de energia e, conseqüentemente, o aparecimento das separatrizes e trajetórias fechadas em torno destes pontos extremos (como mostram as figuras 18, 19 e 24). Como apontamos anteriormente, nessa situação temos dois tipos de trajetórias separatrizes: uma para as altas energias (em torno do máximo) e outra para baixas energias (em torno do mínimo). Observamos, assim, que o efeito do termo de quarta ordem, $g'/\delta' \neq 0$, é alterar o surgimento dos dois tipos de separatrizes, que surgem para valores diferentes do acoplamento G'/δ' : para $g'/\delta' = -0.375$, a separatriz das altas energias surge para $G'/\delta' > 0$, enquanto a separatriz de baixas energias surge para $G'/\delta' > 0.125$; para $g'/\delta' = 0.375$, a separatriz de baixas energias surge para $G'/\delta' > 0.125$, enquanto a separatriz de altas energias surge para $G'/\delta' > 0.375$;

Comparando os comportamentos anteriores do espaço de fase e da superfície de energia, para $g'/\delta' = 0$ e $g'/\delta' \neq 0$, podemos concluir que:

(i) o efeito do aumento do acoplamento G'/δ' , é deformar as superfícies de energia para $G'/\delta' = 0$ (plana, para $g'/\delta' = 0$; e parabólica em j_z , para $g'/\delta' \neq 0$), com o eventual surgimento das trajetórias separatrizes para altas energias e para baixas energias;

(ii) o efeito de g'/δ' é alterar o surgimento das trajetórias separatrizes de altas e baixas energias. Para $g'/\delta' = 0$, as duas separatrizes surgem para o mesmo valor limiar do acoplamento G'/δ' . Para $g'/\delta' \neq 0$, as duas separatrizes surgem para valores limiares distintos do acoplamento G'/δ' .

Os valores limiares do acoplamento entre os modos G'/δ' , para os quais temos o surgimento das separatrizes, podem ser determinados a partir da análise dos pontos

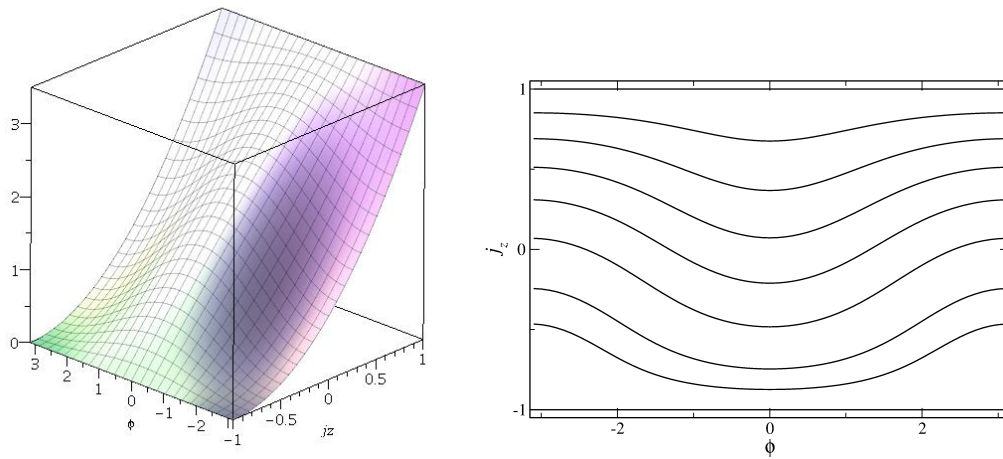


Figura 17 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0.375$ e $G'/\delta' = 0.125$.

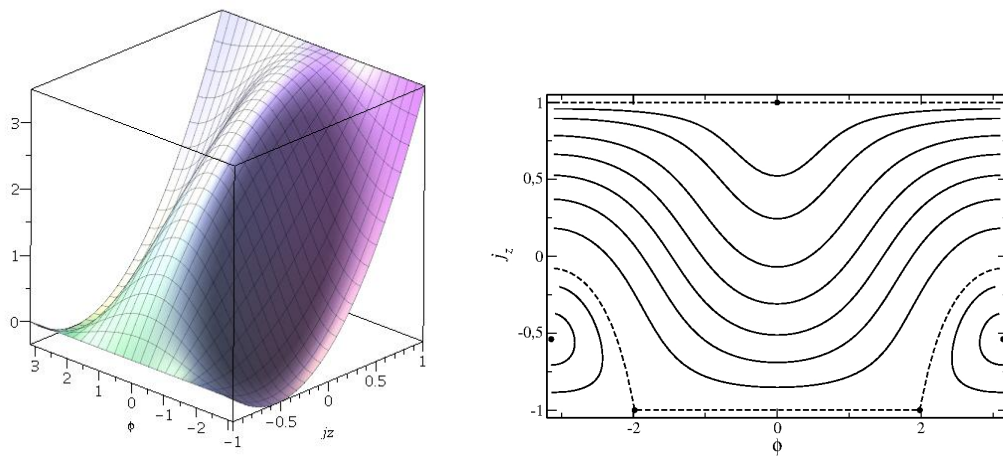


Figura 18 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0.375$ e $G'/\delta' = 0.3125$.

críticos da superfície de energia, que realizamos a seguir.

4.2.1 Análise dos pontos críticos de $h(j_z, \phi)$

Podemos entender melhor o comportamento verificado para o espaço de fase por meio da análise dos pontos críticos da função hamiltoniana (4.16). As primeiras derivadas de $h(j_z, \phi)$ nas variáveis j_z e ϕ são dadas, respectivamente, por

$$\frac{\partial h}{\partial j_z} = \delta' + 2g'(j_z + 1) - 8G'j_z \cos \phi \quad (4.20)$$

e

$$\frac{\partial h}{\partial \phi} = -4G'(1 - j_z^2) \sin \phi. \quad (4.21)$$

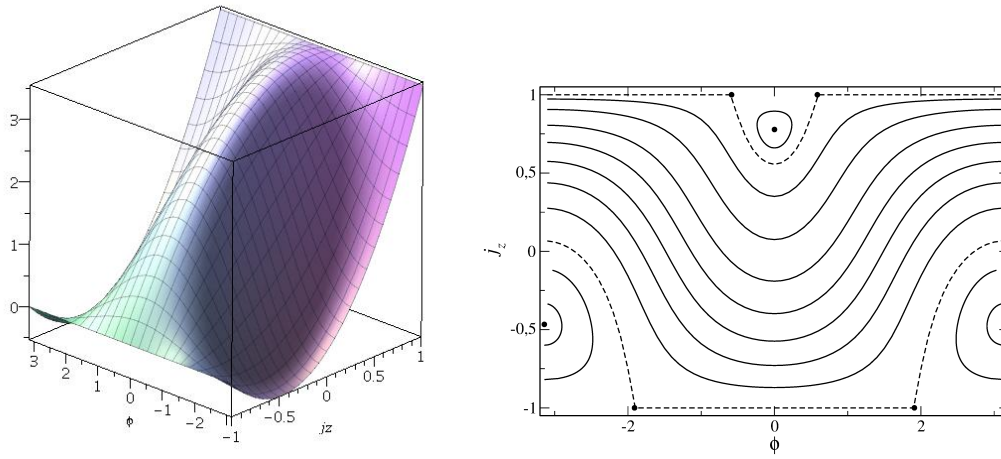


Figura 19 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0.375$ e $G'/\delta' = 0.375$.

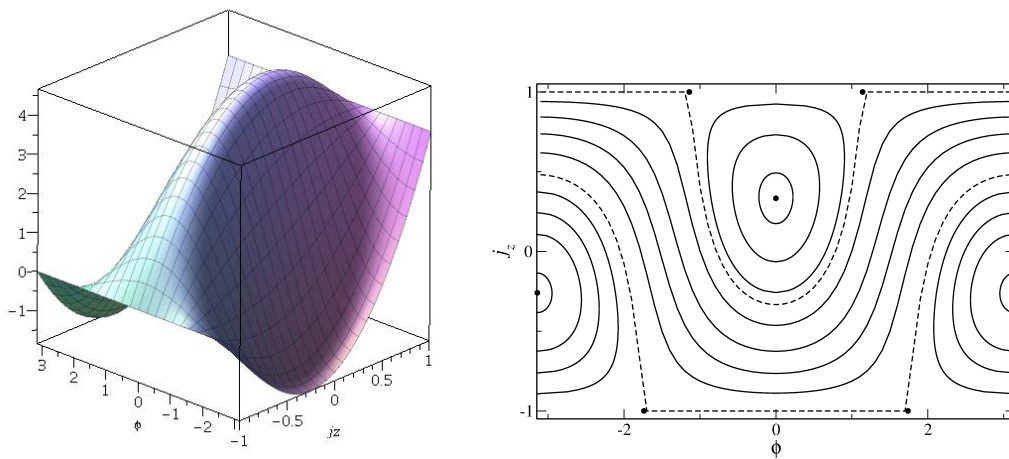


Figura 20 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = 0.375$ e $G'/\delta' = 0.75$.

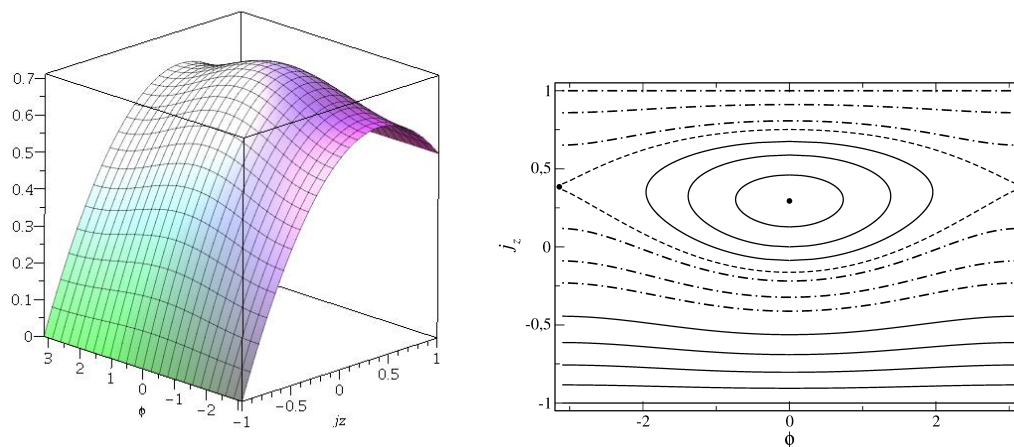


Figura 21 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = -0.375$ e $G'/\delta' = 0.0125$. As linhas destacadas (traço e ponto) no espaço de fase correspondem às trajetórias degeneradas.

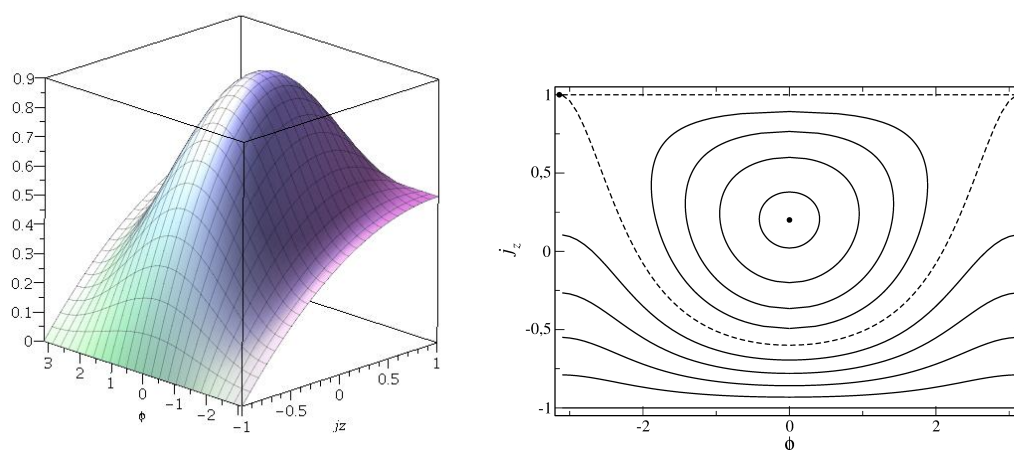


Figura 22 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = -0.375$ e $G'/\delta' = 0.0625$.

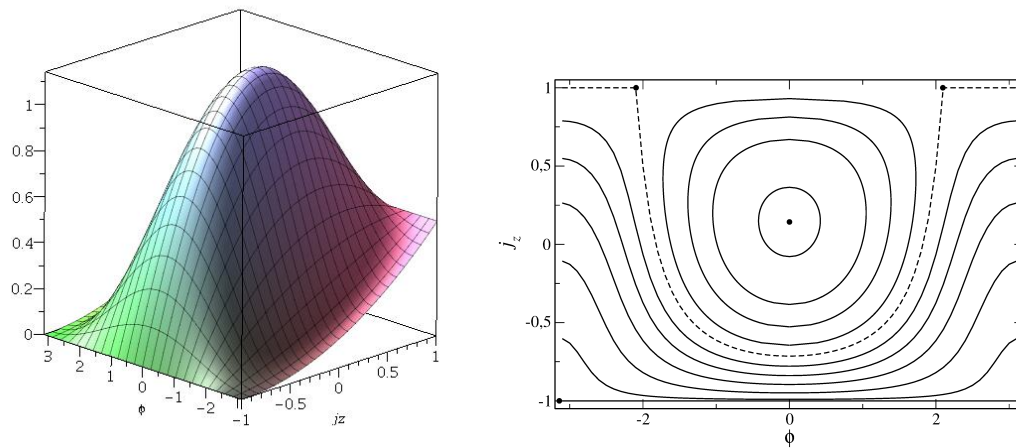


Figura 23 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = -0.375$ e $G'/\delta' = 0.125$.

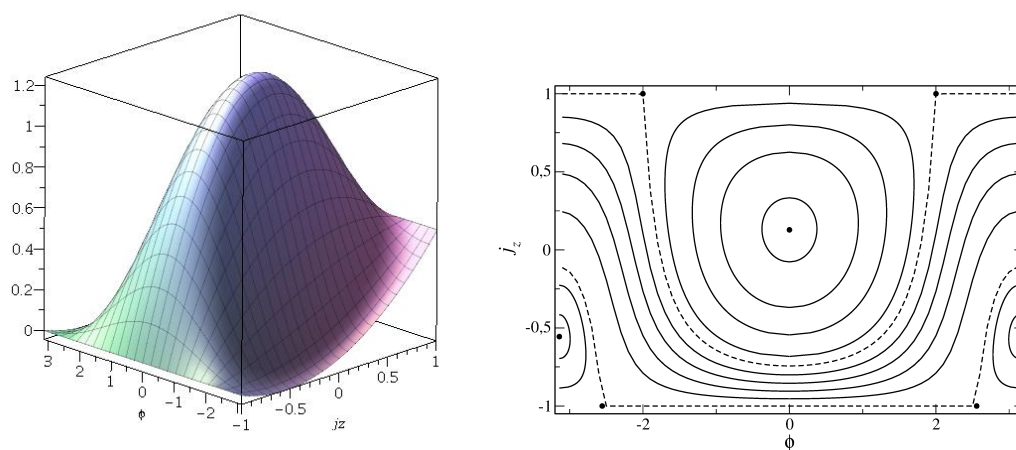


Figura 24 – Espaço de fase $j_z \times \phi$ e superfície de energia $h(j_z, \phi)/\delta'$ para $g'/\delta' = -0.375$ e $G'/\delta' = 0.150$.

Fazendo $\frac{\partial h}{\partial \phi} = 0$ e considerando $G' \neq 0$, devemos ter $(1 - j_z^2) \sin \phi = 0$ que implica

$$j_z = \pm 1 \quad (4.22)$$

ou

$$\phi = n\pi \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots). \quad (4.23)$$

Considerando separadamente cada valor acima, obtemos os pontos críticos:

(i) Para $\phi = 0$, fazemos $\frac{\partial h}{\partial j_z} = 0$ e obtemos $\delta' + 2g'(j_z + 1) - 8G'j_z = 0$, o que implica

$$j_z = \frac{\delta' + 2g'}{8G' - 2g'}. \quad (4.24)$$

Dessa forma, temos o ponto crítico $(j_z, \phi) = (\frac{\delta' + 2g'}{8G' - 2g'}, 0)$. Observando que, por definição, $|j_z| \leq 1$, este ponto crítico será permitido somente para $|\delta' + 2g'| \leq |8G' - 2g'|$.

(ii) Para $\phi = \pm\pi$, fazemos $\frac{\partial h}{\partial j_z} = 0$ e obtemos $\delta' + 2g'(j_z + 1) + 8G'j_z = 0$, o que implica

$$j_z = -\frac{\delta' + 2g'}{8G' + 2g'}. \quad (4.25)$$

Dessa forma, temos o ponto crítico $(j_z, \phi) = (-\frac{\delta' + 2g'}{8G' + 2g'}, \pm\pi)$. Observando que, por definição, $|j_z| \leq 1$, este ponto crítico será permitido somente para $|\delta' + 2g'| \leq |8G' + 2g'|$.

(iii) Para $j_z = 1$, fazemos $\frac{\partial h}{\partial j_z} = 0$ e obtemos $\delta' + 4g' - 8G' \cos \phi = 0$, o que implica

$$\cos \phi = \frac{\delta' + 4g'}{8G'} \rightarrow \phi = \arccos \left(\frac{\delta' + 4g'}{8G'} \right). \quad (4.26)$$

Dessa forma, temos o ponto crítico $(j_z, \phi) = (1, \arccos \frac{\delta' + 4g'}{8G'})$. Observando que $|\cos \phi| \leq 1$, este ponto crítico será permitido somente para $|\delta' + 4g'| \leq |8G'|$.

(iv) Para $j_z = -1$, fazemos $\frac{\partial h}{\partial j_z} = 0$ e obtemos $\delta' + 8G' \cos \phi = 0$, o que implica

$$\cos \phi = \frac{-\delta'}{8G'} \rightarrow \phi = \arccos \left(-\frac{\delta'}{8G'} \right). \quad (4.27)$$

Dessa forma, temos o ponto crítico $(j_z, \phi) = (-1, \arccos -\frac{\delta'}{8G'})$. Observando que $|\cos \phi| \leq 1$, este ponto crítico será permitido somente para $|\delta'| \leq |8G'|$.

A partir de uma análise das derivadas de segunda ordem da função hamiltoniana $h(j_z, \phi)$ nas variáveis j_z e ϕ , podemos determinar se os pontos críticos (i) - (iv) correspondem a máximo, mínimo ou ponto de sela. Os resultados obtidos nesta análise estão sumarizados nas Tabelas 1 e 2. A partir destes resultados, podemos deduzir os valores críticos do acoplamento entre os modos G'/δ' e obtermos os pontos extremos de máximo e mínimo na superfície de energia e, correspondentemente, o surgimento das trajetórias separatrizes para altas e baixas energias no espaço de fase clássico:

- Para um termo de quarta ordem nulo, $g'/\delta' = 0$, temos a mesma condição do acoplamento $G'/\delta' > 1/8$ e, portanto, o mesmo valor limiar $G'/\delta' = 1/8 = 0.125$, para a existência de pontos de máximo e de mínimo e das duas separatrizes de altas e baixas energias (figuras 14 e 15).
- Para um termo de quarta ordem positivo, $g'/\delta' = 0.375$, temos a condição do acoplamento $G'/\delta' > 1/8$ e valor limiar $G'/\delta' = 1/8 = 0.125$ para a existência de pontos de mínimo e da separatriz para baixas energias (figura 17), e a condição $G'/\delta' > (1 + 4g'/\delta')/8 = 0.3125$ e o valor limiar $G'/\delta' = 0.3125$ para a existência de pontos de máximo e da separatriz para altas energias (figura 18).
- Para um termo de quarta ordem negativo, $g'/\delta' = -0.375$, temos a condição do acoplamento $G'/\delta' > 1/8$ e valor limiar $G'/\delta' = 1/8 = 0.125$ para a existência de pontos de mínimo e da separatriz para baixas energias (figura 23), e a condição $G'/\delta' > 0$ e o valor limiar $G'/\delta' = 0$ para a existência de pontos de máximo e da separatriz para altas energias (figura 21).

	Pontos Críticos (j_z, ϕ)	Condição	Tipo
i	$(\frac{\delta'+2g'}{8G'-2g'}, 0)$	$G'/\delta' > (1 + 4g'/\delta')/8$	Máximo
ii	$(-\frac{\delta'+2g'}{8G'+2g'}, \pm\pi)$	$G'/\delta' > 1/8$	Mínimo
iii	$(1, \text{acos} \frac{\delta'+4g'}{8G'})$	$G'/\delta' > (1 + 4g'/\delta')/8$	Ponto de sela
iv	$(-1, \text{acos} \frac{\delta'}{8G'})$	$G'/\delta' > 1/8$	Ponto de sela

Tabela 1 – Sumário da análise dos pontos críticos da superfície $h(j_z, \phi)$ considerando $g'/\delta' \geq -1/4$.

	Pontos Críticos (j_z, ϕ)	Condição	Tipo
i	$(\frac{\delta'+2g'}{8G'-2g'}, 0)$	$G'/\delta' > 0$	Máximo
ii	$(-\frac{\delta'+2g'}{8G'+2g'}, \pm\pi)$	$G'/\delta' > 1/8$	Mínimo
iii	$(1, \text{acos} \frac{\delta'+4g'}{8G'})$	$G'/\delta' > -(1 + 4g'/\delta')/8$	Ponto de sela
iv	$(-1, \text{acos} \frac{\delta'}{8G'})$	$G'/\delta' > 1/8$	Ponto de sela

Tabela 2 – Sumário da análise dos pontos críticos da superfície $h(j_z, \phi)$ considerando $g'/\delta' < -1/4$.

O comportamento do espaço de fase e da superfície de energia, determinados anteriormente (figuras 13 a 24), e os pontos críticos, determinados acima (tabelas 1 e 2), podem ser relacionados à transição de fase quântica verificada no capítulo anterior. Isso é realizado na próxima seção.

4.3 Comparação dos comportamentos clássico e quântico

Podemos estabelecer um paralelo entre o comportamento quântico do espectro, da análise quântica do capítulo anterior, e o comportamento clássico do espaço de fase, da análise clássica desenvolvida neste capítulo. No comportamento quântico, ao aumentarmos a influência do acoplamento entre modos G/δ , observamos o aparecimento de pontos de inflexão nas duas extremidades superior e inferior do espectro (em torno do nível fundamental e do mais energético). No comportamento clássico, ao aumentarmos a influência do acoplamento entre modos reescalado G'/δ' , observamos o aparecimento de trajetórias separatrizes no espaço de fase clássico, para altas e baixas energias. Podemos deduzir, então, a existência das separatrizes no espaço de fase clássico como um indicativo de pontos de inflexão (aproximação de níveis) do espectro quântico e, portanto, da transição de fase quântica. Ou seja, a transição de fase quântica é observada no espaço de fase clássico pelo surgimento das trajetórias fechadas determinadas pela separatriz. Assim, o valor crítico do acoplamento entre modos G/δ , que indica a presença de pontos de inflexão no espectro quântico, deve corresponder ao valor crítico do acoplamento entre modos reescalado G'/δ' , que indica a presença de separatrizes no espaço de fase clássico. Pela tabela 1, temos os valores críticos fornecidos pela análise clássica:

- para o surgimento da separatriz de baixas energias: $G'/\delta' = 0.125$, independente do valor de g'/δ' (ver figuras 14, 17 e 23).
- para o surgimento da separatriz de altas energias: $G'/\delta' = 0.125$ para $g'/\delta' = 0$ (ver figura 14), $G'/\delta' = 0.3125$ para $g'/\delta' = 0.375$ (ver figura 18) e $G'/\delta' = 0$ para $g'/\delta' = -0.375$ (ver figura 21).

Pelas definições (4.17), temos $G'/\delta' = (N/4)(G/\delta)$ e $g'/\delta' = (N/4)(g/\delta)$, e pela analogia com a análise clássica, podemos deduzir os valores críticos da análise quântica (para $N = 500$):

- para o surgimento do ponto de inflexão próximo à energia fundamental: $G/\delta = 0.001$, independente do valor de g/δ (verificado nas figuras 8 e 9 (b)).
- para o surgimento do ponto de inflexão próximo ao autovalor mais energético: $G/\delta = 0.001$ para $g/\delta = 0$ (verificado na figura 8 (a)), $G/\delta = 0.0025$ para $g/\delta = 0.003$ (verificado na figura 8 (b)) e $G/\delta = 0$ para $g/\delta = -0.003$ (verificado na figura 9 (a)).

Os valores deduzidos acima podem ser verificados pelas figuras do espectro quântico e do espaço de fase clássico. O valor crítico do acoplamento entre os modos, $G/\delta = 0.001$, para $N = 500$, também é verificado pela análise das correlações do estado fundamental realizada no capítulo anterior (seção 3.2).

Vemos a seguir que, além dos pontos críticos da transição de fase dados acima, através da análise clássica podemos determinar os diferentes regimes dinâmicos (fases) apresentados pelo sistema.

4.3.1 Caracterização das fases da transição

Analizamos, agora, o comportamento das variáveis canônicas j_z e ϕ em função do tempo, para caracterizarmos a transição de fase quântica que ocorre no sistema. Para encontrarmos $j_z(t)$ e $\phi(t)$, devemos resolver as equações de Hamilton associadas à função hamiltoniana (4.16), dadas por¹

$$\frac{\partial h}{\partial j_z} = \dot{\phi} = \delta' + 2g'(j_z + 1) - 8G'j_z \cos \phi, \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial h}{\partial \phi} = -\dot{j}_z = -4G'(1 - j_z^2) \sin \phi. \quad (4.29)$$

Pelas definições de J_z , na equação (4.3), e de j_z , na equação (4.10), podemos relacionar a população de bósons do modo 0, n_0 , à variável j_z , através de $j_z = n_0/(N/4) - 1$. Dessa forma, a variação de j_z fornece-nos a variação da população de bósons do modo 0. Por exemplo, quando a população for nula, $n_0 = 0$, temos $j_z = -1$ e, quando a população for máxima, $n_0 = N/2$, temos $j_z = 1$. A variação de $\phi(t)$, por sua vez, mostra-nos se a trajetória no espaço de fase é aberta ($\phi(t)$ crescente) ou fechada ($\phi(t)$ periódico). Analisamos, a seguir, a solução numérica das equações (4.28) e (4.29), para $g'/\delta' = 0$ e diferentes valores de G'/δ' , considerando duas condições iniciais: ($j_0 = -0.999$, $\phi_0 = 0$) e ($j_0 = 0.999$, $\phi_0 = \pi$). A primeira delas corresponde à condição inicial de uma população do modo 0 praticamente nula e a um ponto do espaço de fase de energia próxima à mínima (figura 25). A segunda corresponde à condição inicial de uma população do modo 0 praticamente máxima e a um ponto do espaço de fase de energia próxima à máxima (figura 26).

Pela figura 25, observamos que, apesar de partir de uma mesma condição inicial, as soluções para $j_z(t)$ e $\phi(t)$ podem ter dois comportamentos distintos dependendo do valor do acoplamento entre modos G'/δ' :

1. para $G'/\delta' \leq 0.125$, observamos uma oscilação de j_z de pequena amplitude, mantendo seu valor próximo ao inicial ($j_0 = -0.999$), com $\phi(t)$ crescente. Em termos da população de bósons do modo 0, podemos dizer que temos uma população inicial praticamente nula ($j_0 = -0.999$) variando muito pouco em relação ao seu valor inicial. Como ϕ é crescente, nesse caso, temos uma trajetória aberta no espaço de fase.
2. para $G'/\delta' > 0.125$, observamos uma oscilação de j_z de grande amplitude, comparada ao seu valor inicial, que cresce com o aumento de G'/δ' . $\phi(t)$, por sua vez, é periódico.

¹ Podemos encontrar estas equações a partir das definições (4.10), (4.11) e (4.14).

Nesse caso, a população n_0 começa a variar muito em relação ao seu valor inicial praticamente nulo, e essa variação tende a crescer com o aumento de G'/δ' . No espaço de fase, como ϕ é periódico, temos uma trajetória fechada (em torno de um ponto de mínimo na superfície de energia).

Um comportamento semelhante é observado na figura 26, onde distinguimos também dois tipos de comportamento para $j_z(t)$ e $\phi(t)$: para $G'/\delta' \leq 0.125$, uma oscilação de pequena amplitude, mantendo seu valor próximo ao inicial (nesse caso, $j_0 = 0.999$), com $\phi(t)$ crescente; e, para $G'/\delta' > 0.125$, uma oscilação de grande e crescente amplitude, comparada ao seu valor inicial, com $\phi(t)$ periódico (trajetória fechada, nesse caso, em torno de um ponto de máximo na superfície de energia). Observamos assim, que os dois comportamentos para $j_z(t)$ e $\phi(t)$, são determinados pelo valor crítico da transição de fase determinado anteriormente, $G'/\delta' = 0.125$ e, portanto, estão relacionados aos surgimentos de máximos e mínimos na superfície de energia, e das correspondentes trajetórias separatrizes do espaço de fase. Se realizarmos a mesma análise, mas considerando $g'/\delta' \neq 0$, podemos verificar também o segundo valor crítico, correspondente ao surgimento da separatriz de altas energias de forma separada da separatriz de baixas energias.

Os comportamentos encontrados para $j_z(t)$ e $\phi(t)$ podem ser associados às duas fases encontradas em sistemas de condensados de bósons interagentes [29]: de **oscilações** e de **auto-aprisionamento macroscópico**. No regime de oscilações, a população de bóson de cada modo (0, 1, 2) oscila entre seus valores máximo e mínimo, ou seja, os bósons trocam constantemente de modos diferentes por espalhamento, sem que exista um modo preferencial. Podemos reconhecer como este o regime em que $j_z(t)$ e, conseqüentemente n_0 , oscila em grandes amplitudes (comportamento 2, do parágrafo anterior). No regime de auto-aprisionamento macroscópico, a população de determinado modo se mantém, em média, sempre superior à do outro modo, ou seja, apenas uma pequena porção dos bósons trocam de modo por espalhamento, enquanto a maioria permanece fixa em um modo preferencial. Podemos reconhecer como este, o regime em que j_z (e n_0) oscila em pequenas amplitudes (comportamento 1, do parágrafo anterior).

Conseguimos, assim, uma caracterização das duas fases também na análise clássica, por meio das variáveis canônicas $j_z(t)$ e $\phi(t)$. Procedemos no próximo capítulo à discussão sobre a ordem da transição de fase e à construção de um diagrama de fases associado à transição.

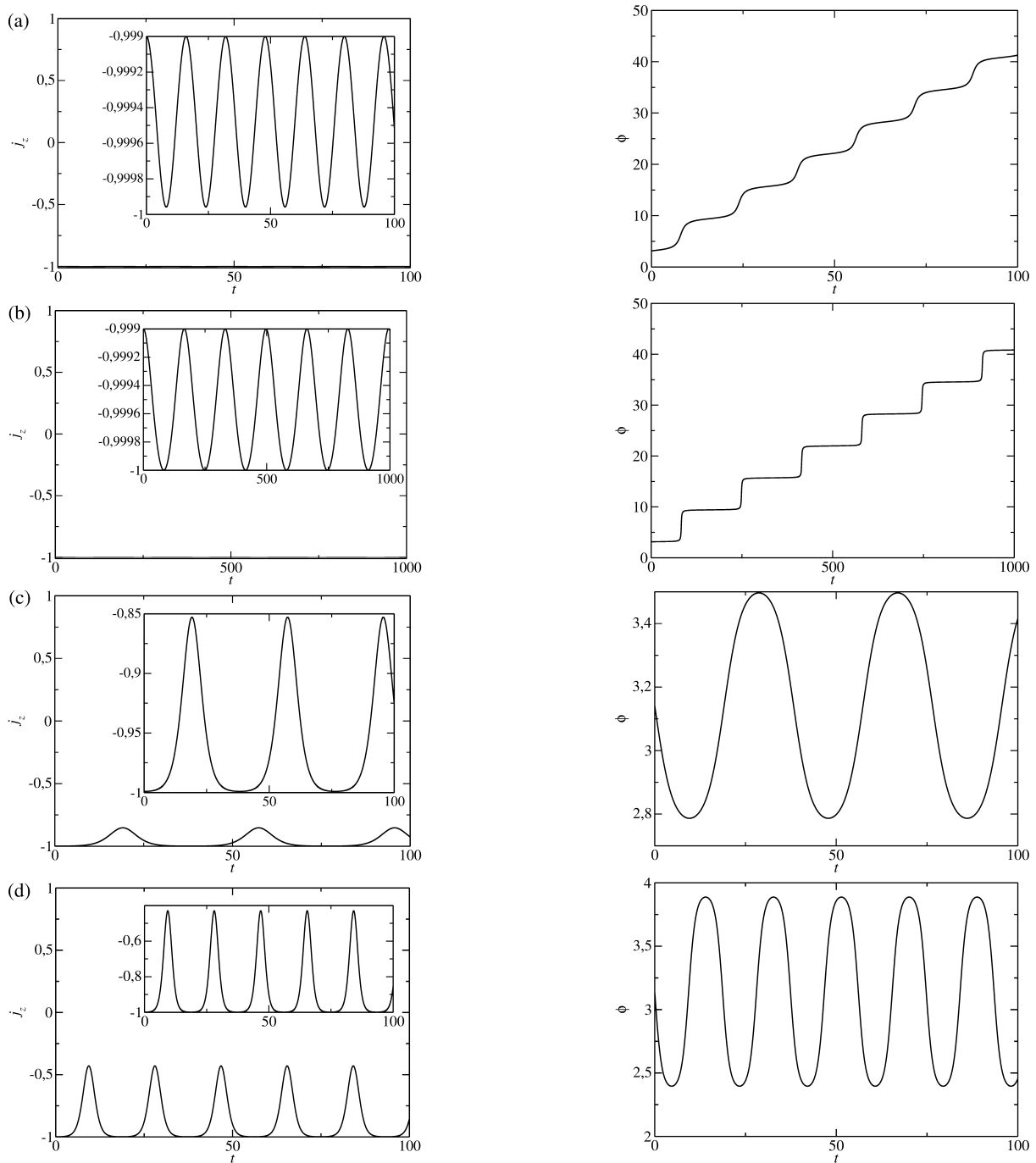


Figura 25 – Variáveis canônicas j_z e ϕ em função do tempo para a condição inicial: $j_0 = -0.999$ e $\phi_0 = \pi$. Parâmetros: $g'/\delta' = 0$ e (a) $G'/\delta' = 0.115$, (b) $G'/\delta' = 0.125$, (c) $G'/\delta' = 0.135$, (d) $G'/\delta' = 0.175$.

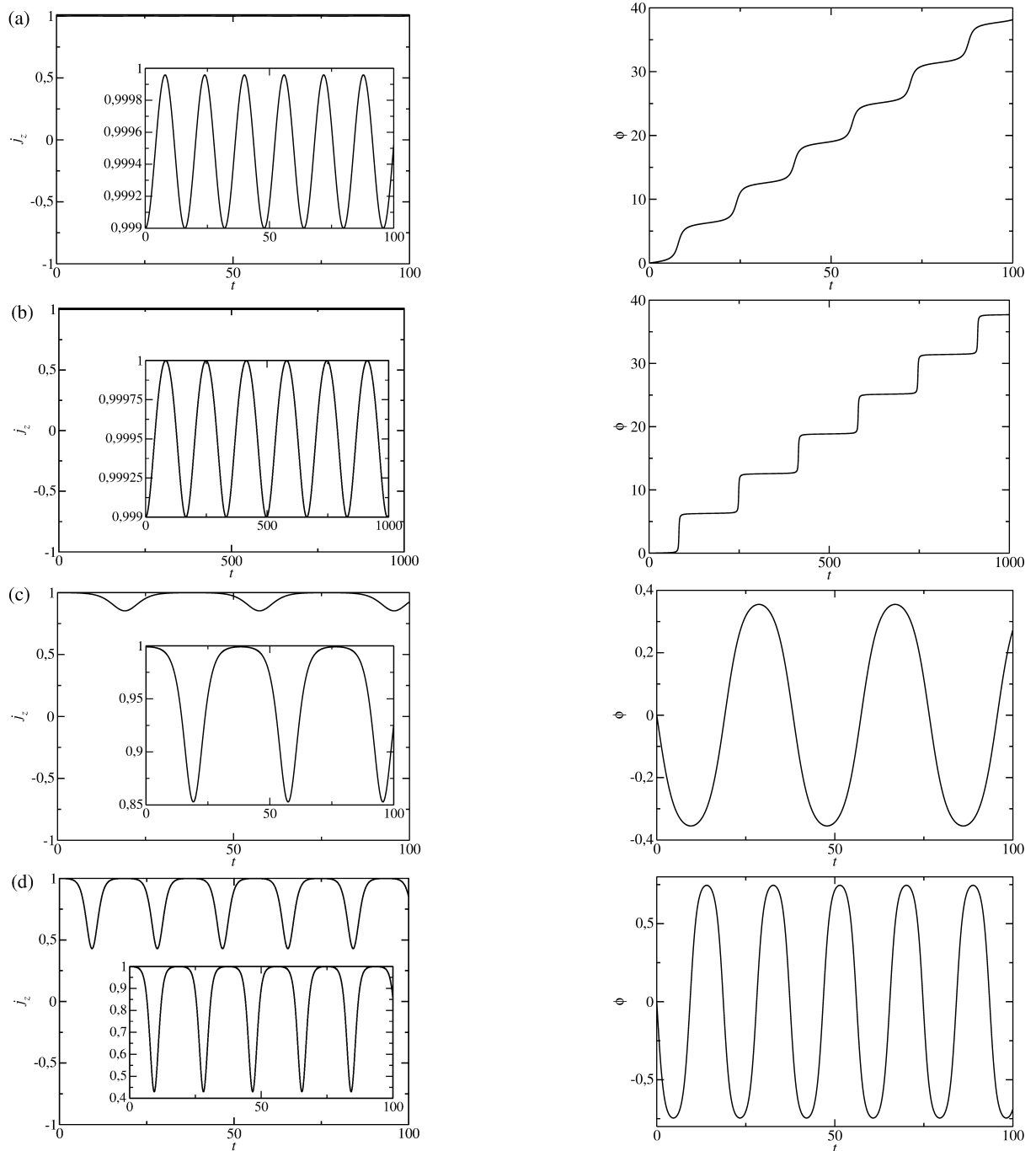


Figura 26 – Variáveis canônicas j_z e ϕ em função do tempo para a condição inicial: $j_0 = 0.999$ e $\phi_0 = 0$. Parâmetros: $g'/\delta' = 0$ e (a) $G'/\delta' = 0.115$, (b) $G'/\delta' = 0.125$, (c) $G'/\delta' = 0.135$, (d) $G'/\delta' = 0.175$.

5 Transição de fase quântica e exemplos de sistemas físicos

Nos capítulos 3 e 4, por meio das análises quântica e clássica do hamiltoniano efetivo de três modos apresentado no capítulo 2.3, deduzimos a presença de uma transição de fase quântica, determinamos os pontos críticos e caracterizamos as fases envolvidas. Neste capítulo, discutimos outras propriedades associadas à transição de fase quântica: a determinação da ordem da transição de fase e a construção de um diagrama de fases. Finalizamos o capítulo com uma aplicação de nossos resultados a dois exemplos de sistemas físicos: átomos frios em um poço de potencial triplo e *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora.

5.1 Ordem da transição de fase

Podemos, agora, discutir a respeito da ordem da transição de fase. Seguindo os critérios estabelecidos na referência [66], podemos obter essa informação a partir do comportamento da energia do estado fundamental e de suas derivadas e, ainda, associá-la ao comportamento do emaranhamento. A figura 27 (a) mostra o comportamento do mínimo da superfície de energia h_{min}/δ' em função do acoplamento entre os modos G'/δ' . Na mesma figura, observamos também a energia do estado fundamental em função do acoplamento entre os modos G'/δ' . Verificamos que existe um perfeito acordo entre as duas quantidades, uma vez que seja considerado a reescala usada no limite termodinâmico, $E_0/(N/4)$. Por conta disso, podemos identificar as duas quantidades, $h_{min}/\delta' = E_0/(N/4)$ e, tomando as derivadas da função $h_{min}(G'/\delta')$, deduzir o comportamento da energia do estado fundamental. Podemos ver, pelas figuras 27 (b) e (c), que a primeira derivada é contínua e que a segunda derivada é descontínua. Tais aspectos caracterizam uma transição de fase de **segunda ordem** [66]. Podemos deduzir essa informação também através do comportamento do emaranhamento no estado fundamental [66]. No capítulo 3, calculamos a entropia linear para o estado fundamental em função do acoplamento entre os modos G/δ (figura 11). Esta quantidade fornece-nos informação sobre o emaranhamento do estado fundamental. Calculando a primeira derivada da entropia linear em função do acoplamento G'/δ' , como mostra a figura 28, percebemos um pico que se torna cada vez mais acentuado com o aumento do número total de bósons. Portanto, no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, este pico tende a se tornar uma assíntota indicando uma divergência da primeira derivada da entropia linear para um determinado valor do acoplamento entre os modos. Esse comportamento é um indicativo de uma transição de fase de segunda ordem [66]. Assim, temos dois indicativos da ordem da transição de fase: a descontinuidade da segunda

derivada da energia do estado fundamental e a descontinuidade da primeira derivada da entropia linear¹.

Tendo determinado a ordem da transição de fase discutimos, na próxima seção, a construção de um diagrama de fase para a transição.

5.2 Diagrama de fase

No espectro obtido na análise quântica do capítulo 3, figuras 8 e 9, observamos que, para um acoplamento entre os modos $G/\delta > 0.001$, surgem autovalores de energia negativos ($E_i < 0$). Notamos, também, que, à medida que o acoplamento entre os modos G/δ cresce, mais autovalores vão se tornando negativos. Algo semelhante ocorre no topo do espectro: para o acoplamento entre os modos G/δ maior que um valor limiar ($G/\delta > 0.001$, para $g/\delta = 0$; $G/\delta > 0.0025$, para $g/\delta = 0.003$; e $G/\delta > 0$, para $g/\delta = -0.003$) surgem autovalores de energia $E_i > N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$, e o número destes autovalores aumenta à medida que o acoplamento entre os modos G/δ cresce. Tais autovalores, correspondem a energias que estão abaixo do ponto de inflexão em torno do estado fundamental ($E_i = 0$), ou acima do ponto de inflexão em torno do autovalor mais energético ($E_i = N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$). À medida que o acoplamento entre os modos G/δ cresce, mais autovalores vão surgindo abaixo do ponto de inflexão em torno do estado fundamental, e acima do ponto de inflexão em torno do autovalor mais energético. Isso quer dizer que os pontos de inflexão estão se aproximando do centro do espectro. Na análise clássica do capítulo 4, esse comportamento no espectro do surgimento de autovalores $E_i < 0$ e $E_i > N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$, corresponde ao surgimento das trajetórias fechadas em torno dos máximos ou mínimos da superfície de energia, que são determinadas pelas separatrizes. À medida que o acoplamento entre os modos cresce, aumenta a área do espaço de fase delimitada pelas separatrizes correspondente às trajetórias fechadas. Isso quer dizer que as duas separatrizes estão se aproximando e diminuindo a área correspondente às órbitas abertas. Como observamos anteriormente, podemos associar estas trajetórias fechadas à fase de oscilações (ver seção 4.3). Dessa forma, podemos associar também os autovalores $E_i < 0$ e $E_i > N/2 + (g/\delta)(N/2)^2$ à fase de oscilações. Na ausência da separatriz no espaço de fase, e dos autovalores correspondentes no espectro, devemos observar somente a fase de auto-aprisionamento macroscópico. Podemos, assim, usar essa informação para montar o diagrama de fase mostrado na figura 29. No diagrama, no eixo vertical temos um índice relativo dos autovalores do espectro quântico i/i_{max} (0 para o estado fundamental e 1 para o mais energético). No eixo horizontal, temos a variação do acoplamento entre os modos reescalado G'/δ' . A curva inferior no diagrama delimita os autovalores do espectro que estão abaixo do ponto de inflexão em torno do nível fundamental, que correspondem às trajetórias fechadas delimitadas pela

¹ Para comparação, no caso de uma transição de primeira ordem devemos ter a primeira derivada da energia do estado fundamental descontínua [1, 66].

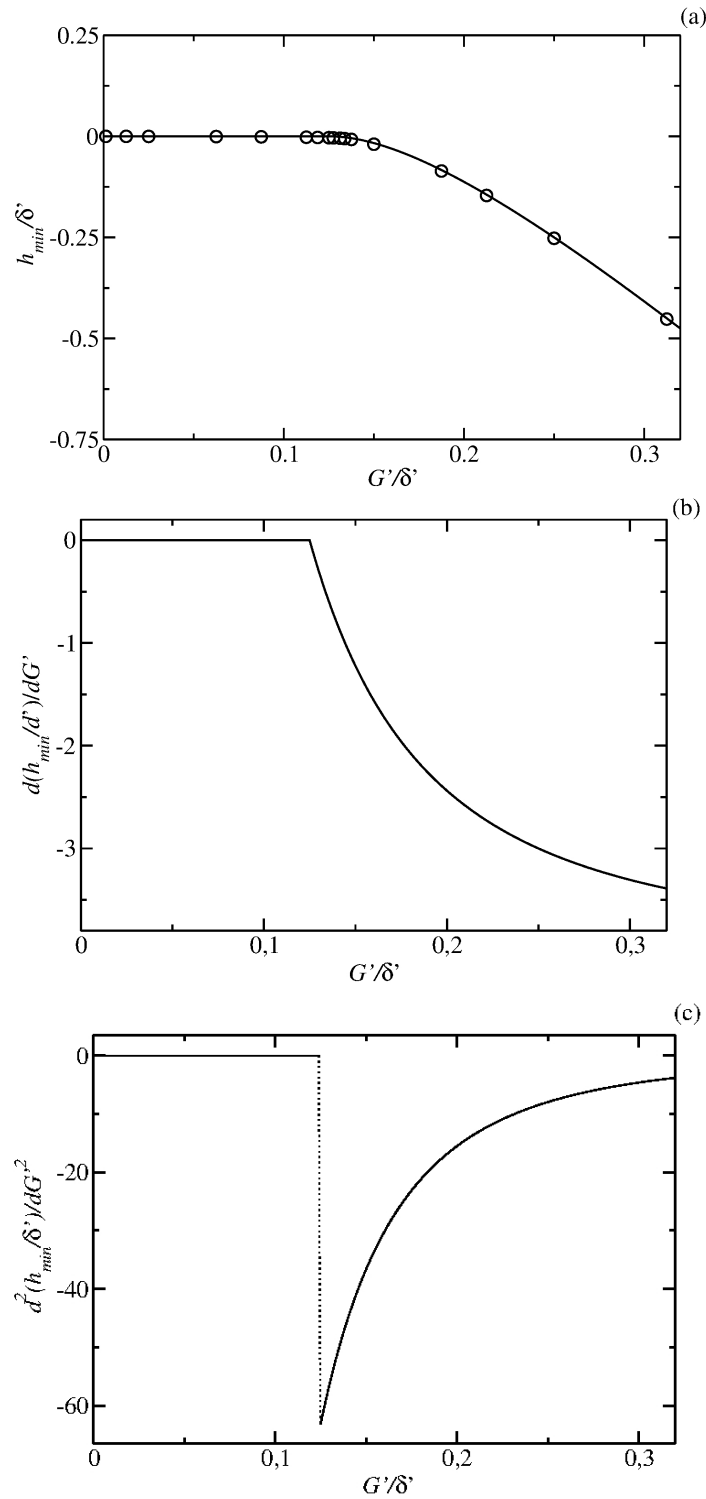


Figura 27 – (a) Mínimo da superfície de energia h_{min}/δ' e suas (b) primeira derivada e (c) segunda derivada em função do acoplamento entre os modos G'/δ' . Em (a), observamos também a energia do estado fundamental reescalada $E_0/(N/4)$ (círculos).

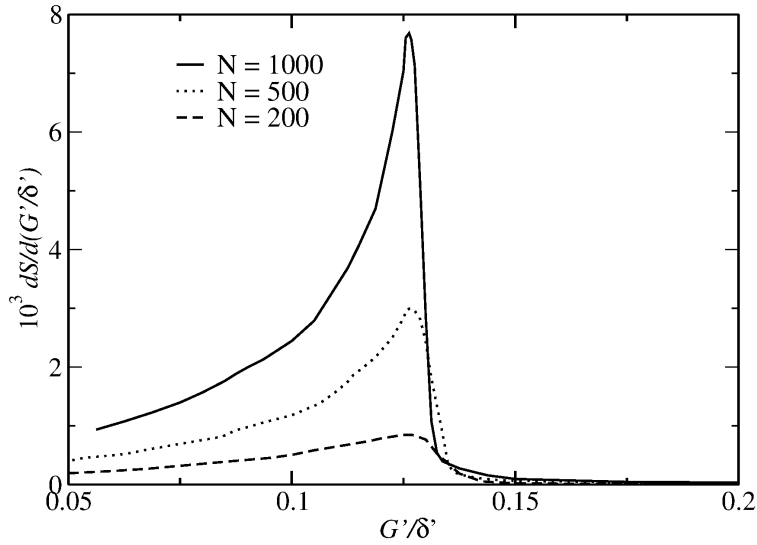


Figura 28 – Primeira derivada da entropia linear do estado fundamental em função do acoplamento entre os modos G'/δ' .

separatriz de baixas energias do espaço de fase. A curva superior no diagrama delimita os autovalores do espectro que estão acima do ponto de inflexão em torno do nível mais energético, que correspondem às trajetórias fechadas delimitadas pela separatriz de altas energias do espaço de fase. Podemos interpretar o diagrama da seguinte maneira: para um acoplamento entre os modos $G'/\delta' < 0.125$, temos a fase de auto-aprisionamento no estado fundamental, enquanto que, para um acoplamento entre os modos $G'/\delta' > 0.125$, temos a manifestação da fase de oscilações. Observamos também que a manifestação desta segunda fase para altas energias depende do valor do termo de quarta ordem g'/δ' ($G/\delta > 0.001$, para $g/\delta = 0$; $G/\delta > 0.0025$, para $g/\delta = 0.003$; e $G/\delta > 0$, para $g/\delta = -0.003$). Se considerarmos o número de níveis abaixo do ponto de inflexão como um parâmetro de ordem da transição, o diagrama de fase nos mostra que a transição é feita, em um certo sentido², de modo contínuo, o que caracteriza uma transição de fase de segunda ordem em acordo com os resultados da seção anterior. Um diagrama de fase semelhante ao da figura 29, pode ser construído para o modelo de Lipkin, como feito na referência [33]. A diferença entre o modelo de Lipkin usado na referência [33] e o hamiltoniano de três modos que estudamos é justamente a “assimetria” causada no espectro pelo termo de quarta ordem g/δ , enquanto o espectro do modelo de Lipkin é sempre simétrico.

Até aqui, em nosso trabalho, temos considerado valores para os parâmetros do acoplamento entre os modos G/δ e do termo de quarta g/δ que evidenciam a existência de uma transição de fase quântica para o hamiltoniano de três modos, mas não derivamos estes valores diretamente de um exemplo de sistema físico. Nas próximas duas seções,

² Na realidade, temos uma sequência de números discretos para a quantidade de estados abaixo do ponto de inflexão: 0, 1, 2, 3, A continuidade a que nos referimos é a ausência de saltos nesta sequência discreta.

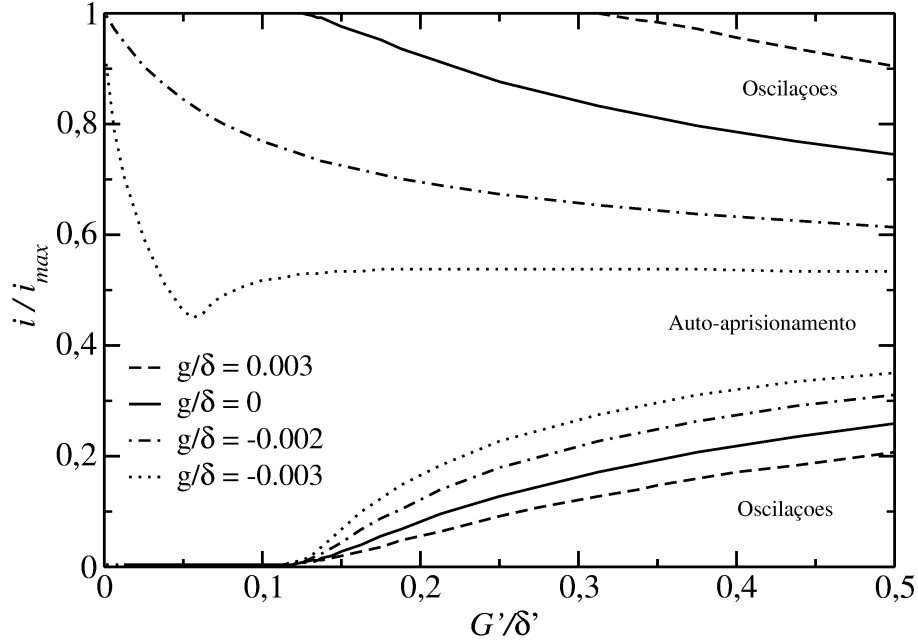


Figura 29 – Diagrama de fase para $g/\delta = 0.003, 0, -0.002$ e -0.003 . Para cada valor de g/δ temos duas linhas: os autovalores entre as linhas correspondem à fase do auto-aprisionamento macroscópico; acima e abaixo das linhas, os autovalores correspondem à fase das oscilações.

discutimos como podemos variar fisicamente estes parâmetros a partir da aplicação de nossos resultados a dois exemplos de sistemas físicos: *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora e átomos frios em um poço de potencial triplo.

5.3 Exciton-polaritons em uma microcavidade semicondutora

Como vimos na seção 2.3.1, o hamiltoniano de *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora pode ser escrito como em (2.1),

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{PP} p_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} p_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}'},$$

onde $p_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ é o operador de criação dos *exciton-polaritons* com vetor de onda no plano da cavidade \mathbf{k} e energia $E_{\mathbf{k}}$; $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{PP}$ é um coeficiente da interação de Coulomb entre os *exciton-polaritons*, dado por (2.2),

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{PP} \simeq V_0 u_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}} \cdot u_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}'}, \quad V_0 = \frac{6e^2 a_{exc}}{\epsilon_0 A},$$

onde a_{exc} é o raio de Bohr bi-dimensional dos *exciton-polaritons*, ϵ_0 é a constante dielétrica do semicondutor, A é a área de quantização macroscópica e $u_{\mathbf{k}}$ são os coeficientes Hopfield dados por (2.3),

$$u_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\Delta_{\mathbf{k}} + \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}}{2\sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}} \right)^{1/2},$$

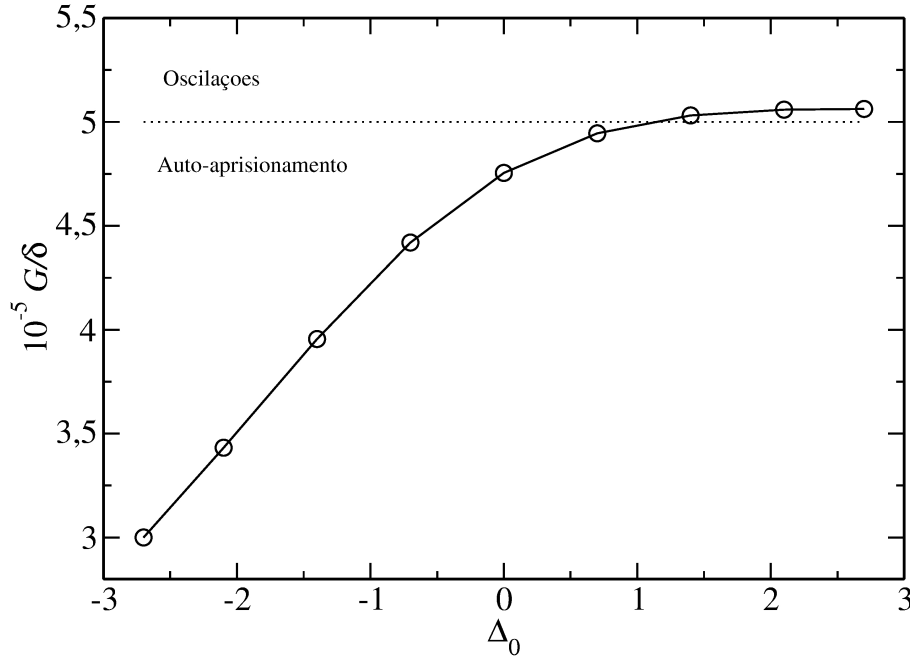


Figura 30 – Valores numéricos para G'/δ' em função do *detuning* Δ_0 calculado a partir de parâmetros experimentais de uma microcavidade semicondutora [62]. A linha tracejada horizontal marca o valor crítico $G/\delta = 5 \times 10^{-5}$ para $N = 10^4$.

onde $\Delta_k = E_{cav}(k) - E_{exc}(k)$ é o *detuning* (dessintonia) entre os fótons e os *excitons*. Na configuração do “ângulo mágico”, se \mathbf{k}_p é o vetor de onda do bombeio, o espalhamento de dois *exciton-polaritons* de vetor de onda \mathbf{k}_p resulta em outros dois *exciton-polaritons* com vetores de onda $\mathbf{0}$ e $2\mathbf{k}_p$. Supondo que nesta situação apenas estes três modos se encontrem coerente e macroscopicamente populados [8,14], podemos fazer uma aproximação no hamiltoniano acima, considerando somente os três modos que denominamos como *signal* ($\mathbf{0}$), *pump* (\mathbf{k}_p) e *idler* ($2\mathbf{k}_p$) e reescrever (2.1) como em (2.4). Considerando o hamiltoniano de três modos (2.4), podemos usar valores experimentais para os *exciton-polaritons* e testar os resultados obtidos em nosso trabalho. Nesse caso, os valores para os parâmetros do acoplamento entre os modos G/δ e do termo de quarta ordem g/δ podem ser determinados a partir dos coeficientes $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}^{PP}$, que, por sua vez, são determinados pelos coeficientes de Hopfield u_k . Variando o valor do *detuning* Δ_k podemos variar u_k , $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}^{PP}$ e, conseqüentemente, os parâmetros G/δ e g/δ . Na figura 30, observamos uma curva do acoplamento entre os modos G/δ em função do *detuning* $\Delta_0 = E_{cav}(0) - E_{exc}(0)$ numericamente calculado a partir dos valores experimentais retirados da referência [62]. Nesta figura, observamos que o aumento no acoplamento entre os modos devido à variação do *detuning* resulta na transição entre as fases de auto-aprisionamento macroscópico e de oscilações.

5.4 Átomos frios em um poço de potencial triplo

Como vimos na seção 2.3.2, a descrição de um sistema de bósons interagentes, dada pelo hamiltoniano de muitos corpos (2.5),

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}, \nabla) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}'),$$

pode ser feita por (2.11),

$$\hat{H} = \sum_i E_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j,k,l} \hbar G_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l,$$

onde a_i (a_i^\dagger) são os operadores aniquilação (criação) de uma partícula no auto-estado $|\phi_i\rangle$ de energia E_i . Os coeficientes G_{ijkl} são determinados pela equação (2.10),

$$G_{ijkl} \equiv \frac{V_0}{2\hbar} \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) \phi_k(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}).$$

Consideramos, agora, um poço de potencial triplo específico no hamiltoniano de uma partícula $H(\mathbf{r}, \nabla)$, na equação (2.5). Este potencial pode representar uma armadilha óptica contendo um gás de átomos frios bosônico (*spin* total inteiro). Escolhemos um potencial da forma usada na referência [18],

$$V_{ext}(x) = V_0 e^{-(x-2)^2/\sigma_0^2} + V_1 e^{-x^2/\sigma_1^2} + V_2 e^{-(x+2)^2/\sigma_2^2} + V_3 x^{10}, \quad (5.1)$$

onde temos $V_0 = V_2$ e $\sigma_0 = \sigma_2$ para um potencial simétrico. Os parâmetros no potencial acima devem ser ajustados para assegurar que os três primeiros níveis sejam igualmente espaçados. Resolvendo numericamente a equação de Schrödinger de uma partícula para o potencial (5.1), obtemos os autovalores E_i e as autofunções $\phi_i(x)$ dos estados estacionários. Substituímos as autofunções encontradas $\phi_i(x)$ na expressão (2.10), e obtemos, através de uma integração numérica, os coeficientes G_{ijkl} . Os valores para os parâmetros do acoplamento entre os modos G/δ e do termo de quarta ordem g/δ podem, então, ser determinados pelas equações (2.13)-(2.15) e (2.19)-(2.20). Para um dado conjunto dos parâmetros do potencial (V_1 , V_2 , V_3 , σ_0 , σ_1 e σ_2) obtemos o acoplamento G/δ como uma função de V_0 como é mostrado na figura 31. Observamos, também na figura 31, o valor da diferença de energia entre os três modos ΔE , para cada valor do acoplamento entre os modos G/δ . A partir desses valores, podemos observar que a diminuição no acoplamento entre os modos G/δ resulta em um afastamento entre os modos (aumento de ΔE) e na transição entre as fases de oscilações e de aprisionamento macroscópico, e vice-versa: o aumento no acoplamento entre os modos G/δ resulta em uma aproximação entre os modos (diminuição de ΔE) e na transição entre as fases de aprisionamento macroscópico e de oscilações.

No capítulo a seguir, concluímos este trabalho apresentando nossas conclusões.

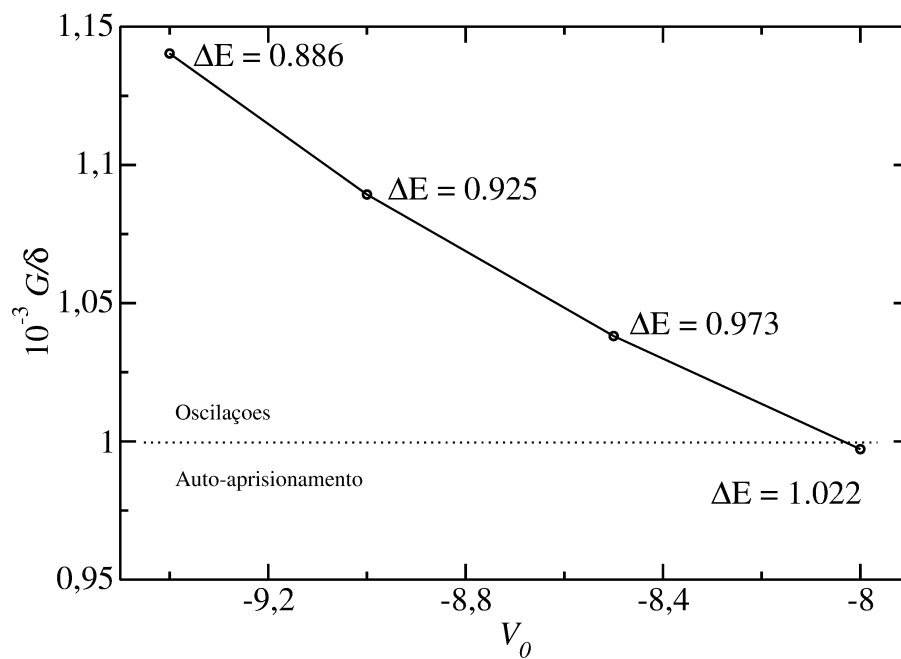


Figura 31 – Cálculo numérico de G'/δ' como função de V_0 . A linha tracejada horizontal marca o valor crítico $G/\delta = 0.001$. Usamos os valores para os parâmetros do potencial $V_1 = -9.4$, $V_2 = V_0$, $V_3 = 0.005$, $\sigma_0 = \sigma_2$ e $N = 500$. Para cada ponto no gráfico temos o valor da diferença de energia entre os modos ΔE .

6 Conclusões

Nesse trabalho, estudamos um hamiltoniano efetivo de três modos para um condensado de bósons interagentes, que podemos considerar como *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora, na configuração do ângulo mágico, ou como átomos frios armadilhados opticamente em um poço triplo, com a conservação do desequilíbrio das populações. Classificamos este hamiltoniano como pertencente a uma classe de modelos esquemáticos, denominada “Curie-Weiss”, dos quais são exemplos o modelo de Lipkin, o modelo de emparelhamento (ambos da física nuclear) e o modelo de Dicke para a superradiância, entre outros. Esta classe de modelos permite-nos definir uma função hamiltoniana clássica a partir do limite termodinâmico do operador hamiltoniano quântico. Em geral, os modelos nesta classe apresentam um ponto de inflexão (aproximação de níveis) no espectro que sinaliza uma transição de fase quântica. Esta característica é refletida na análise da função hamiltoniana clássica, através de trajetórias separatrizes no espaço de fase. O modelo de Lipkin estudado na referência [33] apresenta dois destes pontos de inflexão, mas que são simétricos em relação ao centro do espectro. O hamiltoniano de três modos que estudamos destaca-se entre outros da mesma classe por seu espectro exibir dois pontos de inflexão que não são, em geral, simétricos devido ao termo de quarta ordem no hamiltoniano ($g/\delta \neq 0$). Por meio das análises do espectro quântico e do espaço de fase clássico, podemos reconhecer a transição ocorrendo entre as fases denominadas **oscilações de Rabi (ou de Josephson)** e **auto-aprisionamento macroscópico**.

Em geral, estes sistemas de bósons interagentes são estudados em termos de funções de onda localizadas nos poços quânticos, em hamiltonianos do tipo de Bose-Hubbard. Esse procedimento gera um termo de tunelamento entre os poços como, por exemplo, no trabalho de Visconti *et al* [29], onde o hamiltoniano é dado por

$$H = \Omega \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j + \kappa \sum_i a_i^{\dagger 2} a_i^2 - 2\Lambda \sum_{i \neq j \neq k} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_k,$$

em que a_i^\dagger é o operador de criação de um bóson com função de onda localizada no poço i . O primeiro termo está relacionado ao tunelamento entre poços, o segundo à auto-interação de partículas dentro do mesmo poço e o terceiro à interação (colisões cruzadas) entre partículas de diferentes poços. No trabalho de Visconti *et al*, e em outros trabalhos [30], é destacado o papel do termo colisões cruzadas na transição de fase. No nosso trabalho, não utilizamos o *ansatz* das funções de ondas localizadas e, portanto, nosso hamiltoniano é essencialmente diferente do Bose-Hubbard. Dessa forma, em contraste aos outros trabalhos da literatura, nosso trabalho se distingue por fazer um tratamento do poço triplo por funções de onda espacialmente espalhadas. A transição de fase, nesse caso, ocorre com a variação do coeficiente de interação entre os modos.

Referências

- [1] Sachdev, S.: *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, Cambridge, 1999. Citado 5 vezes nas páginas 13, 22, 34, 35 e 58.
- [2] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini e D. Shahar: *Continuous quantum phase transitions*. Rev. Mod. Phys., 69:315, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 22.
- [3] W. H. Zurek, U. Dorner e P. Zoller: *Dynamics of a Quantum Phase Transition*. Phys. Rev. Lett., 95:105701, 2005. Citado na página 13.
- [4] Gammelmark, S. e K. Mølmer: *Phase transitions and Heisenberg limited metrology in an Ising chain interacting with a single-mode cavity field*. New J. Phys., 13:053035, 2011. Citado na página 13.
- [5] Tian, L.: *Cavity-assisted dynamical quantum phase transition at bifurcation points*. Phys. Rev. A, 93:043850, 2016. Citado na página 13.
- [6] Negele, J. W. e H. Orland: *Quantum Many-particle Systems*. Addison-Wesley, Reading, 1988. Citado 4 vezes nas páginas 13, 25, 85 e 87.
- [7] Fetter, A. L. e J. D. Walecka: *Quantum Theory of Many-particle Systems*. McGraw-Hill, New York, 1971. Citado 3 vezes nas páginas 13, 85 e 87.
- [8] Kavokin, A. V. e G. Malpuech: *Cavity Polaritons*. Thin Films and Nanostructures Series, 32, 2003. Citado 11 vezes nas páginas 13, 24, 62, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81 e 82.
- [9] A. V. Kavokin, J. K. Baumberg, G. Malpuech e F. P. Laussy: *Microcavities*. Series on Semiconductor Science and Technology, 16, 2007. Citado na página 13.
- [10] J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann A. Baas P. Jeambrun J. M. J. Keeling F. M. Marchetti M. H. Szymańska R. André J. L. Staehli V. Savona P. B. Littlewood B. Deveaud e Le Si Dang: *Bose-Einstein condensation of exciton polaritons*. Nature, 443:409, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 13, 20 e 21.
- [11] J. D. Plumhof, T. Stöferle, L. Mai U. Scherf e R. F. Mahrt: *Room-temperature Bose-Einstein condensation of cavity exciton-polaritons in a polymer*. Nature Materials, 13:247, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 20.
- [12] Keeling, J. e N. G. Berloff: *Going with the flow*. Nature, 457:273, 2009. Citado na página 13.

- [13] P. G. Savvidis, J. J. Baumberg, R. M. Stevenson M. S. Skolnick D. M. Whittaker e J. S. Roberts: *Angle-Resonant Stimulated Polariton Amplifier*. Phys. Rev. Lett., 84:1547, 2000. Citado 4 vezes nas páginas 13, 24, 81 e 82.
- [14] C. Ciuti, P. Schwendimann, B. Deveaud e A. Quattropani: *Theory of the angle-resonant polariton amplifier*. Phys. Rev. B, 62:R4825, 2000. Citado 12 vezes nas páginas 13, 24, 62, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82 e 83.
- [15] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur S. Inouye H. J. Miesner J. Stenger e W. Ketterle: *Optical confinement of a Bose-Einstein condensate*. Phys. Rev. Lett., 80:2027, 1998. Citado na página 13.
- [16] C. E. Wieman, D. E. Pritchard e D. J. Wineland: *Atom cooling, trapping, and quantum manipulation*. Rev. Mod. Phys., 71:S253, 1999. Citado na página 13.
- [17] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac C. W. Gardiner e P. Zoller: *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices*. Phys. Rev. Lett., 81:3108, 1998. Citado na página 13.
- [18] Paredes, R.: *Tunneling of ultracold Bose gases in multiple wells*. Physical Review A, 73:033616, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 63.
- [19] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews C. E. Wieman e E. A. Cornell: *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*. Science, 269:198, 1995. Citado 3 vezes nas páginas 13, 18 e 19.
- [20] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews N. J. van Druten D. S. Durfee D. M. Kurn e W. Ketterle: *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*. Phys. Rev. Lett., 75:3969, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 18.
- [21] J. Denschlag, J. E. Simsarian, D. L. Feder C. W. Clark L. A. Collins J. Cubizolles L. Deng E. W. Hagley K. Helmerson W. P. Reinhardt S. L. Rolston B. I. Schneider e W. D. Phillips: *Generating Solitons by Phase Engineering of a Bose-Einstein Condensate*. Science, 287:97, 2000. Citado na página 13.
- [22] G. Lamporesi, S. Donadello, S. Serafini F. Dalfovo e G. Ferrari: *Spontaneous creation of Kibble-Zurek solitons in a Bose-Einstein condensate*. Nature Physics, 9:656, 2013. Citado na página 13.
- [23] A. Smerzl, S. Fantoni, S. Giovanazzi e S. R. Shenoy: *Quantum Coherent Atomic Tunneling between Two Trapped Bose-Einstein Condensates*. Phys. Rev. Lett., 79:4950, 1997. Citado na página 13.
- [24] S. Levy, E. Lahoud, I. Shomroni e J. Steinhauer: *The a.c. and d.c. Josephson effects in a Bose-Einstein condensate*. Nature, 449:579, 2007. Citado na página 13.

- [25] H. Ott, E. de Mirandes, F. Ferlaino G. Roati G. Modugno e M. Inguscio: *Collisionally Induced Transport in Periodic Potentials*. Phys. Rev. Lett., 92:160601, 2004. Citado na página 13.
- [26] G. J. Milburn, J. Corney, E. M. Wright e D. F. Walls: *Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential*. Phys. Rev. A, 55:4318, 1997. Citado na página 13.
- [27] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling S. Hunsmann M. Cristiani e M. K. Oberthaler: *Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction*. Phys. Rev. Lett., 95:010402, 2005. Citado na página 13.
- [28] B. Liu, L.-B. Fu, S. P. Yang e J. Liu: *Josephson oscillation and transition to self-trapping for Bose-Einstein condensates in a triple-well trap*. Phys. Rev. A, 75:033601, 2007. Citado na página 13.
- [29] V. F. Viscondi, K. Furuya e M. C. de Oliveira: *Phase transition, entanglement and squeezing in a triple-well condensate*. Europhysics Letters, 90:10014, 2010. Citado 5 vezes nas páginas 13, 14, 35, 53 e 65.
- [30] Oliveira, M. C. de e B. R. da Cunha: *Collision-dependent atom tunneling rate - Bose-Einstein Condensates in Double and Multiple Well Traps*. Int. J. Mod. Phys. B, 23:5867, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 65.
- [31] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico e A. Kitaev: *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*. Phys. Rev. Lett., 90:227902, 2003. Citado na página 14.
- [32] Hines, A. P.: *Entanglement, Dynamical Bifurcations and Quantum Phase Transitions*. Tese de Doutorado, University of Queensland, 2005. Citado na página 14.
- [33] W. D. Heiss, F. G. Scholtz e H. B. Geyer: *The large N behaviour of the Lipkin model and exceptional points*. J. Phys. A: Math. Gen., 38:1843, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 14, 22, 60 e 65.
- [34] Reis, M.: *Relação entre Dinâmica Clássica e Transição de Fase Quântica em Modelos de Campo Médio*. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 22.
- [35] M. Reis, M. O. Terra Cunha, A. C. Oliveira e M. C. Nemes: *Relation between quantum phase transitions and classical instability points in the pairing model*. Phys. Lett. A, 344:164, 2005. Citado na página 14.
- [36] Schneider, S. e G. J. Milburn: *Entanglement in the steady state of a collective-angular-momentum (Dicke) model*. Phys. Rev. A, 65:042107, 2002. Citado na página 14.

- [37] M. C. Nemes, K. Furuya, G. Q. Pellegrino A. C. Oliveira M. Reis e L. Sanz: *Quantum entanglement and fixed point Hopf bifurcation*. Phys. Letter. A, 354:60, 2006. Citado na página 14.
- [38] T. Moreira, G. Q. Pellegrino, J. G. Peixoto de Faria M. C. Nemes F. Camargo e A. F. R. de Toledo Piza: *Entanglement and classical instabilities: Fingerprints of electron-hole-to-exciton phase transition in a simple model*. Phys. Rev. E, 77:051102, 2008. Citado na página 14.
- [39] M. C. Figueiredo, T. M. Cotta e G. Q. Pellegrino: *Classical analysis of quantum phase transitions in a bilayer model*. Phys. Rev. E, 81:012104, 2010. Citado na página 14.
- [40] Pellegrino, G. Q. e K. Furuya: *Quantal and Classical Manifestations of Symmetry Breaking in the Integral Two-Spin System*. Chaos, Solitons & Fractals, 3:327, 1993. Citado na página 14.
- [41] Chagas, E. A. e K. Furuya: *Entanglement, quantum phase transition and fixed-point bifurcation in the N-atom Jaynes-Cummings model with an additional symmetry breaking term*. Physics Letters A, 372:5564, 2008. Citado na página 14.
- [42] A. P. Hines, C. M. Dawson, R. H. McKenzie e G. J. Milburn: *Entanglement and bifurcations in Jahn-Teller models*. Phys. Rev. A, 70:022303, 2004. Citado na página 14.
- [43] Bose, S. N.: *Plancks law and light quantum hypothesis*. Z. Phys., 26:178, 1924. Citado na página 17.
- [44] Einstein, A.: *Quantum theory of ideal monoatomic gases*. Sitzber. Preuss. Akad. Wiss., 23:3, 1925. Citado na página 17.
- [45] Kapitza, P.: *Viscosity of liquid helium below the λ -point*. Nature, 141:74, 1938. Citado na página 17.
- [46] Allen, J. F. e A. D. Misener: *Flow of liquid helium II*. Nature, 141:75, 1938. Citado na página 17.
- [47] London, F.: *The lambda-phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy*. Nature, 141:643, 1938. Citado na página 18.
- [48] Bogoliubov, N. N.: *On the theory of superfluidity*. J. Phys. (USSR), 11:23, 1947. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 81.
- [49] Landau, L. D.: *The theory of superfluidity of helium II*. J. Phys. (USSR), 5:71, 1941. Citado na página 18.

- [50] Feynman, R. P.: *Atomic theory of the 2-fluid model of liquid helium*. Phys. Rev., 94:262, 1954. Citado na página 18.
- [51] Pitaevskii, L. e S. Stringari: *Bose-Einstein Condensation*. Clarendon Press, Oxford, 2003. Citado na página 18.
- [52] Hänsch, T. W. e A. Schawlow: *Cooling of Gases by Laser Radiation*. Opt. Commun., 13:68, 1975. Citado na página 18.
- [53] Wineland, D. e H. Dehmelt: *Proposed 10^{14} $Dv < v$ Laser Fluorescence Spectroscopy on Tl^+ Mono-Ion Oscillator III (side band cooling)*. Bull. Am. Phys. Soc., 20:637, 1975. Citado na página 18.
- [54] Ashkin, A.: *Trapping of Atoms by Resonance Radiation Pressure*. Phys. Rev. Lett., 40:729, 1978. Citado na página 18.
- [55] Adams, C.S. e E. Riis: *Laser Cooling and Trapping of Neutral Atoms*. Prog. Quantum Electron, 21:1, 1997. Citado na página 18.
- [56] Moskalenko, S. A.: *Reversible optico-hydrodynamic effects in nonideal exciton gas*. Fiz. Tverd. Tela, 4:276, 1962. Citado na página 18.
- [57] I. M. Blatt, W. Brandt e K. W. Boer: *Bose-Einstein condensation of excitons*. Phys. Rev., 126:1691, 1962. Citado na página 18.
- [58] L. V. Butov, C. W. Lai, A. L. Ivanov A. C. Gossard e D. S. Chemla: *Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps*. Nature, 417:47, 2002. Citado na página 18.
- [59] H. Deng, G. Weihs, C. Santori J. Bloch e Y. Yamamoto: *Condensation of semiconductor microcavity exciton polaritons*. Science, 298:199, 2002. Citado na página 20.
- [60] H. Deng, D. Press, S. Goetzinger G. Solomon H. Rudolf K. H. Ploog e Y. Yamamoto: *Quantum degenerate exciton-polaritons in thermal equilibrium*. Phys. Rev. Lett., 97:146402, 2006. Citado na página 20.
- [61] R. Balili, V. Hartwell, D. Snoke L. Pfeiffer e K. West: *Bose-Einstein condensation of microcavity polaritons in a trap*. Science, 316:1007, 2007. Citado na página 20.
- [62] Cotta, E.A.: *Bi-estabilidade óptica e condensação de Bose-Einstein de polaritons*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2008. Citado 4 vezes nas páginas 20, 21, 62 e 77.
- [63] Cotta, E.A. e F. Matinaga. *Phys. Rev. B*, 76:073308, 2007. Citado na página 20.

-
- [64] Lieb, E. H.: *The classical limit of quantum spin systems*. Commun. Math. Phys., 31:327, 1973. Citado na página 40.
- [65] W. M. Zhang, D. H. Feng e R. Gilmore: *Coherent States: Theory and some applications*. Rev. Mod. Phys., 62:867, 1990. Citado na página 40.
- [66] L. A. Wu, M. S. Sarandy e D. A. Lidar: *Quantum Phase Transitions and Bipartite Entanglement*. Phys. Rev. Lett., 93:250404, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 57 e 58.
- [67] W. H. Louisell, A. Yariv e A. E. Siegman: *Quantum Fluctuations and Noise in Parametric Processes.I*. Phys. Rev., 124:1646, 1961. Citado na página 83.

Apêndices

APÊNDICE A – Hamiltoniano de *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora

Neste apêndice, a partir da diagonalização do hamiltoniano de *excitons* e fótons numa microcavidade semicondutora, introduzimos a nova quase-partícula *exciton-polariton* e demonstramos o hamiltoniano de *exciton-polaritons* em uma microcavidade semicondutora utilizado na seção 2.3.

A.1 *Excitons* e fótons

No material semicondutor contido em um poço quântico, como o *GaAs* mostrado nas figuras 3 e 4, existem estados ligados formados por elétrons da banda de condução e buracos da banda de valência (que se comportam como partículas de carga positiva). Denominamos este par elétron-buraco, agrupado devido à atração coulombiana, *exciton*. Na configuração da microcavidade da figura 3, os *excitons* são confinados ao longo do eixo de crescimento z , mas livres para se movimentar no plano do poço. É importante observar que, devido ao confinamento, ocorre uma discretização dos níveis de energia para os elétrons confinados da banda de condução. Na formação do *exciton*, a energia do elétron é menor do que o menor destes níveis de energia, e a diferença entre estas energias corresponde à energia de ligação do *exciton*, como ilustrado na figura 4. Com o poço quântico localizado dentro da microcavidade formada por espelhos DBR, como mostrado na figura 3, os *excitons* devem entrar em interação com o campo da cavidade. Considerando a descrição quântica dos *excitons* como bósons com operadores de criação (aniquilação) b^\dagger (b), o hamiltoniano para a interação dos *excitons* com os fótons da cavidade é dado por [8, 14]

$$H = \sum_k E_{exc}(k) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + E_{cav}(k) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{\Omega_R}{2} (a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}). \quad (\text{A.1})$$

Nesta equação $a^\dagger(a)$ são os operadores de criação (aniquilação) para os fótons com um vetor de onda \mathbf{k} no plano da cavidade. Por causa da invariância translacional no plano da cavidade, os fótons podem interagir apenas com *excitons* tendo o mesmo vetor de onda \mathbf{k} . $E_{cav}(k)$ e $E_{exc}(k)$ são as energias dos fótons e dos *excitons*, respectivamente, que dependem do módulo de \mathbf{k} , e Ω_R corresponde à energia de interação de Rabi entre *excitons* e fótons.

A seguir, realizamos a diagonalização do hamiltoniano (A.1) introduzindo uma nova quase-partícula, o *exciton-polariton*.

A.2 Exciton-polaritons

Podemos diagonalizar o hamiltoniano (A.1) através da transformação

$$\begin{aligned} p_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}, \\ q_{\mathbf{k}} &= v_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ são os denominados coeficientes de Hopfield [8, 14] dados por

$$u_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\delta_{\mathbf{k}} + \sqrt{\delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}}{2\sqrt{\delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}} \right)^{1/2}, \quad (\text{A.3})$$

$$v_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\Omega_R^2}{2\sqrt{\delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}(\delta_{\mathbf{k}} + \sqrt{\delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2})} \right)^{1/2}, \quad (\text{A.4})$$

onde $\delta_{\mathbf{k}} = E_{cav}(k) - E_{exc}(k)$ é o *detuning* (dessintonia) entre fótons e *excitons*. O hamiltoniano transformado tem, então, a forma

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{low}(k) p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} + E_{up}(k) q_{\mathbf{k}}^\dagger q_{\mathbf{k}}, \quad (\text{A.5})$$

onde os operadores transformados $p_{\mathbf{k}}$ e $q_{\mathbf{k}}$ obedecem às relações de bósons

$$[q_{\mathbf{k}}, q_{\mathbf{k}}^\dagger] = 1, \quad [q_{\mathbf{k}}, q_{\mathbf{k}}] = [q_{\mathbf{k}}^\dagger, q_{\mathbf{k}}^\dagger] = 0, \quad (\text{A.6})$$

$$[p_{\mathbf{k}}, p_{\mathbf{k}}^\dagger] = 1, \quad [p_{\mathbf{k}}, p_{\mathbf{k}}] = [p_{\mathbf{k}}^\dagger, p_{\mathbf{k}}^\dagger] = 0. \quad (\text{A.7})$$

Estes operadores descrevem uma quase-partícula, que surge da interação entre *excitons* e fótons, denominada *exciton-polariton*. E_{up} e E_{low} correspondem, respectivamente, às energias dos *exciton-polaritons upper* e *lower* dadas por

$$E_{low(up)}(k) = \frac{E_{cav}(k) + E_{exc}(k)}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\delta_{\mathbf{k}}^2 + \Omega_R^2}. \quad (\text{A.8})$$

A figura 32 mostra as dispersões para estas energias (de onde surge a nomenclatura *upper* e *lower*) comparadas com a energia dos *excitons* (aproximadamente constante para k pequeno) e com a energia dos fótons (aproximadamente parabólica na mesma região). Nesta figura, a dessintonia, $\delta_{k=0} = E_{cav}(k=0) - E_{exc}(k=0)$, é considerada nula.

A interação Coulombiana existente entre elétrons e buracos leva ao surgimento de termos adicionais ao hamiltoniano (A.1): um termo de interação efetiva *exciton-exciton* e um termo de saturação do acoplamento fóton-*exciton*. O termo de interação *exciton-exciton* é dado por

$$H_{exc-exc} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_q b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}'}, \quad (\text{A.9})$$

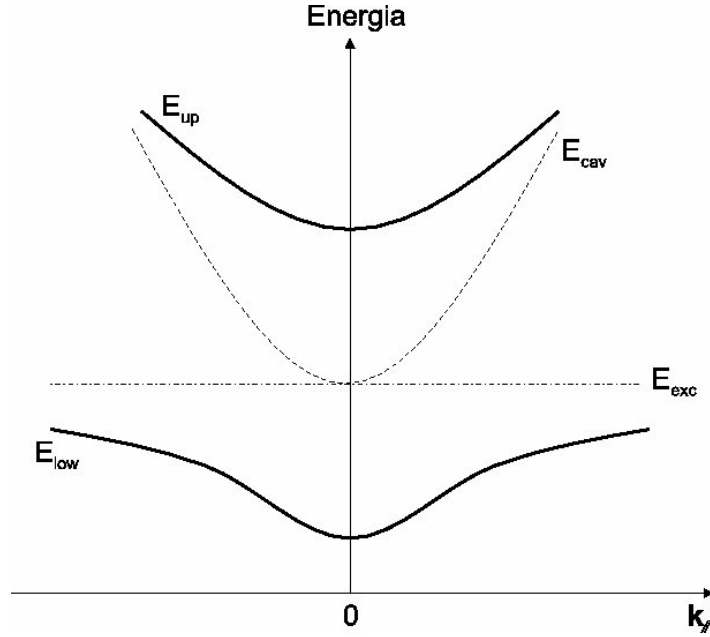


Figura 32 – Comparação entre as energias dos *excitons*, fótons e *exciton-polaritons* em função do vetor de onda na cavidade (figura retirada de [62]).

com $V_q \simeq V_0 = 6e^2 a_{exc}/\epsilon_0 A$, no caso $q a_{exc} \ll 1$, onde a_{exc} é raio de Bohr bi-dimensional do *exciton*, ϵ_0 é a constante dielétrica do poço quântico, e A a área de quantização [8, 14]. O termo de saturação é dado por

$$H_{sat} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{sat} (a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}'} + a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} b_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'}^\dagger), \quad (\text{A.10})$$

com $V_{sat} = \Omega_R/2n_{sat}A$, onde $n_{sat} = 7/(16\pi a_{exc}^2)$ é a densidade de saturação dos *excitons* [8, 14]. Usando a transformação (A.2) podemos escrever (A.10) e (A.9) em função dos polaritons $p_{\mathbf{k}}$ e $q_{\mathbf{k}}$, encontrando assim termos, adicionais ao hamiltoniano (A.5), de interação entre os polaritons. Na situação em que os coeficientes não-lineares V_0 e V_{sat} são pequenos comparados com energia de Rabi Ω_R , é possível desprezar os termos não-lineares de interação entre os *exciton-polaritons upper* e *lower*. Neste caso, os dois *exciton-polaritons* estão praticamente desacoplados e a representação do hamiltoniano em termos de $p_{\mathbf{k}}$ e $q_{\mathbf{k}}$ é mais simplificada. Se considerarmos ainda que somente o ramo *lower* de energias (veja a figura 32) é excitado pelo laser de bombeio da cavidade, então, somente a evolução temporal do *exciton-polariton lower* $p_{\mathbf{k}}$ será de interesse. Com estas considerações, o hamiltoniano em termos apenas do *exciton-polariton lower* é escrito como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{low}(k) p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{PP} p_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger p_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger p_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}'}, \quad (\text{A.11})$$

onde

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}^{PP} = V_0 u_{|\mathbf{k}'-\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}} u_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}'}$$

$$+2V_{sat}u_{|\mathbf{k}'-\mathbf{q}|}u_k(v_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}u_{k'} + v_{k'}u_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}). \quad (\text{A.12})$$

O primeiro termo de (A.11) descreve o *exciton-polariton* livre e o segundo corresponde ao termo de interação efetiva entre os *exciton-polaritons*. Para valores típicos dos parâmetros Ω_R , a_{exc} e ϵ_0 , encontramos que V_{sat}/V_0 é muito pequeno (usualmente da ordem de 10^{-2} [8, 14]), de modo que podemos desprezar o termo de saturação em comparação com o termo de interação em (A.12),

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}^{PP} \simeq V_0 u_{|\mathbf{k}'-\mathbf{q}|} u_k \cdot u_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} u_{k'}. \quad (\text{A.13})$$

Utilizamos o hamiltoniano (A.11) acima na discussão da aproximação de três modos realizada na seção 2.3.

APÊNDICE B – Amplificação paramétrica na configuração do ângulo mágico

Neste apêndice, discutimos a presença de um laser de bombeio na microcavidade, a configuração do “ângulo mágico” e a demonstração do efeito da amplificação paramétrica.

B.1 Laser de bombeio sobre a microcavidade

Podemos incluir no hamiltoniano do apêndice A, (A.11), o efeito do campo incidente de um laser sobre a microcavidade excitando um determinado modo a_p . Para isso, adicionamos um termo correspondente ao acoplamento entre o modo da cavidade e o campo externo de bombeio, de frequência ω_l , tratado como um campo clássico com amplitude E^{in}

$$V_{pump} = i\hbar\sqrt{2\lambda_l}[E^{in}e^{-i\omega_l t}a_p - H.c.], \quad (B.1)$$

onde λ_l corresponde a um coeficiente de dissipação dos espelhos da cavidade [8, 14]. Mas observe que, no termo acima, existe ainda uma dependência do *exciton-polariton upper* q_p contida no operador a_p . Tomando a transformação inversa de (A.2), temos que $a_p = u_p q_p - v_p p_p$. Substituindo isto em (B.1) e ignorando os termos em q_p , obtemos

$$V_{pump} = E_p p_p + H.c., \quad (B.2)$$

onde

$$E_p \equiv -i\hbar\sqrt{2\lambda_l}E^{in}e^{-i\omega_l t}v_p. \quad (B.3)$$

Mais adiante, utilizamos (A.11) (o mesmo hamiltoniano da seção 2.3) contendo o termo (B.2) na demonstração do efeito da amplificação paramétrica. Esse efeito ocorre na microcavidade semicondutora na situação denominada “ângulo mágico”, que discutimos a seguir.

B.2 Configuração do “ângulo mágico”

Na configuração do “ângulo mágico”, se \mathbf{k}_p é o vetor de onda do bombeio, o espalhamento de dois *exciton-polaritons* de \mathbf{k}_p resulta em outros dois *exciton-polaritons* com vetor de onda $\mathbf{0}$ e $2\mathbf{k}_p$. Supondo que nesta situação apenas estes três modos se encontram coerente e macroscopicamente populados [8, 14], faremos uma aproximação no hamiltoniano (A.11), considerando somente os três modos que denominamos como *signal*

(0), *pump* (\mathbf{k}_p) e *idler* ($2\mathbf{k}_p$). Nessa aproximação podemos reescrever (A.11) como

$$\begin{aligned}
H \approx & \hbar(\Omega_s p_s^\dagger p_s + \Omega_i p_i^\dagger p_i + \Omega_p p_p^\dagger p_p) + \\
& + \hbar[G_{si} p_s^\dagger p_s p_i^\dagger p_i + G_{pi} p_p^\dagger p_p p_i^\dagger p_i + G_{sp} p_s^\dagger p_s p_p^\dagger p_p + \\
& + G_{ss} p_s^\dagger p_s p_s^\dagger p_s + G_{ii} p_i^\dagger p_i p_i^\dagger p_i + G_{pp} p_p^\dagger p_p p_p^\dagger p_p + \\
& + G p_s^\dagger p_i^\dagger p_p^2 + G^* p_s p_i (p_p^\dagger)^2], \tag{B.4}
\end{aligned}$$

onde

$$p_s \equiv p_0, \quad p_p \equiv p_{\mathbf{k}_p}, \quad p_i \equiv p_{2\mathbf{k}_p}, \tag{B.5}$$

$$\hbar\Omega_s \equiv E_{low}(0) - V_{\mathbf{0},\mathbf{0},\mathbf{0}}^{PP}, \quad \hbar\Omega_p \equiv E_{low}(k_p) - V_{\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP},$$

$$\hbar\Omega_i \equiv E_{low}(2k_p) - V_{2\mathbf{k}_p,2\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP}, \tag{B.6}$$

$$G_{sp} \equiv \frac{1}{2} \{V_{\mathbf{k}_p,\mathbf{0},\mathbf{0}}^{PP} + V_{\mathbf{0},\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP} + V_{\mathbf{k}_p,\mathbf{0},-\mathbf{k}_p}^{PP} + V_{\mathbf{0},\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p}^{PP}\}, \tag{B.7}$$

$$G_{si} \equiv \frac{1}{2} \{V_{2\mathbf{k}_p,\mathbf{0},\mathbf{0}}^{PP} + V_{\mathbf{0},2\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP} + V_{2\mathbf{k}_p,\mathbf{0},-2\mathbf{k}_p}^{PP} + V_{\mathbf{0},2\mathbf{k}_p,2\mathbf{k}_p}^{PP}\}, \tag{B.8}$$

$$G_{pi} \equiv \frac{1}{2} \{V_{2\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP} + V_{\mathbf{k}_p,2\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP} + V_{2\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p,-\mathbf{k}_p}^{PP} + V_{\mathbf{k}_p,2\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p}^{PP}\}, \tag{B.9}$$

$$G_{ss} \equiv \frac{1}{2} V_{\mathbf{0},\mathbf{0},\mathbf{0}}^{PP}, \quad G_{pp} \equiv \frac{1}{2} V_{\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP}, \quad G_{ii} \equiv \frac{1}{2} V_{2\mathbf{k}_p,2\mathbf{k}_p,\mathbf{0}}^{PP}, \tag{B.10}$$

$$G \equiv \frac{1}{2} \{V_{2\mathbf{k}_p,\mathbf{0},-2\mathbf{k}_p}^{PP} + V_{\mathbf{0},2\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p}^{PP}\}, \quad G^* \equiv \frac{1}{2} \{V_{\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p,-\mathbf{k}_p}^{PP} + V_{\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p,\mathbf{k}_p}^{PP}\}. \tag{B.11}$$

Observamos que a aproximação de três modos (B.4) para os *exciton-polaritons* é idêntica ao hamiltoniano de três modos (2.12) deduzido na seção 2.3 - com a devida associação entre os modos: $p_s \rightarrow a_0$, $p_p \rightarrow a_1$ e $p_i \rightarrow a_2$.

B.3 Amplificação paramétrica

No hamiltoniano de três modos (2.4), podemos considerar a existência de um termo adicional relativo a um laser de bombeio, $E_p p_p$ [8, 14]. Assim, reescrevemos (2.4) como

$$H = \hbar(\Omega_s p_s^\dagger p_s + \Omega_i p_i^\dagger p_i + \Omega_p p_p^\dagger p_p)$$

$$\begin{aligned}
& +\hbar[G_{si}p_s^\dagger p_s p_i^\dagger p_i + G_{pi}p_p^\dagger p_p p_i^\dagger p_i + G_{sp}p_s^\dagger p_s p_p^\dagger p_p \\
& + G_{ss}p_s^\dagger p_s p_s^\dagger p_s + G_{ii}p_i^\dagger p_i p_i^\dagger p_i + G_{pp}p_p^\dagger p_p p_p^\dagger p_p \\
& + Gp_s^\dagger p_i^\dagger p_p^2 + G^* p_s p_i (p_p^\dagger)^2] + [E_p p_p + E_p^* p_p^\dagger].
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Nessa situação, calculando as equações de Heisenberg para os três modos obtemos

$$\frac{dp_s}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[p_s, H] = -i[\Omega_s p_s + \chi_s p_s + Gp_i^\dagger p_p p_p], \tag{B.13}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[p_i, H] = -i[\Omega_i p_i + \chi_i p_i + Gp_s^\dagger p_p p_p], \tag{B.14}$$

$$\frac{dp_p}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[p_p, H] = -i[\Omega_p p_p + \chi_p p_p + G^* p_p^\dagger p_i p_s + E_p^*], \tag{B.15}$$

onde

$$\chi_s = 2G_{ss}p_s^\dagger p_s + G_{si}p_i^\dagger p_i + G_{sp}p_p^\dagger p_p, \tag{B.16}$$

$$\chi_i = 2G_{ii}p_i^\dagger p_i + G_{si}p_s^\dagger p_s + G_{pi}p_p^\dagger p_p \tag{B.17}$$

e

$$\chi_p = 2G_{pp}p_p^\dagger p_p + G_{sp}p_s^\dagger p_s + G_{pi}p_i^\dagger p_i. \tag{B.18}$$

Seguindo as referências [8] e [14], que se baseiam no experimento da referência [13], consideramos que, na situação da amplificação paramétrica (ângulo mágico), os três estados dos *exciton-polaritons* mais importantes, nomeados como *signal*, *pump* e *idler*, se encontram coerente e macroscopicamente ocupados e, portanto, se comportam como estados coerentes clássicos. Assim podemos substituir nas equações de Heisenberg os operadores equivalentes por números complexos e desprezar as interações com os demais estados¹. Podemos, assim, considerar um estado coerente tal que $\langle p_k \rangle = P_k$ e $\langle p_k^\dagger p_{k'} \rangle = P_k^* P_{k'}$, onde $k = s, i, p$. As variáveis complexas introduzidas P_s , P_i e P_p correspondem a amplitudes a partir das quais obtemos o número médio de *exciton-polaritons* em cada nível n_k : $\langle p_k^\dagger p_k \rangle = |P_k|^2 = n_k$, $k = s, i, p$. Tomando o valor médio das equações (B.13)-(B.15) nesse estado coerente, obtemos

$$\frac{dP_s}{dt} = -i[\bar{\Omega}_s P_s + GP_i^* P_p^2], \tag{B.19}$$

¹ Como comentado por Kavokin *et al.* [8], essa solução foi proposta por Bogoliubov em 1947 para descrever superfluidos, ao diagonalizar um hamiltoniano análogo ao dos *exciton-polaritons*; considerando a existência de um estado fundamental macroscopicamente ocupado (o superfluido), assumiu que somente as interações envolvendo o estado fundamental eram importantes e que flutuações do estado fundamental eram desprezíveis [48].

$$\frac{dP_i}{dt} = -i[\bar{\Omega}_i P_i + GP_s^* P_p^2], \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{dP_p}{dt} = -i[\bar{\Omega}_p P_p + G^* P_p^* P_i P_s + E_p^*], \quad (\text{B.21})$$

onde $\bar{\Omega}_s = \Omega_s + \langle \chi_s \rangle$, $\bar{\Omega}_i = \Omega_i + \langle \chi_i \rangle$ e $\bar{\Omega}_p = \Omega_p + \langle \chi_p \rangle$. Seguindo, ainda, o procedimento das referências [8] e [14] motivado pelo experimento [13], nas expressões de $\langle \chi_i \rangle$, $\langle \chi_s \rangle$ e $\langle \chi_p \rangle$, consideramos os termos de segunda ordem $|P_s|^2$ e $|P_i|^2$ desprezíveis em relação a $|P_p|^2$ (notando que estes termos são proporcionais à intensidade emitida pela cavidade em cada modo). Assim, obtemos $\bar{\Omega}_s = \Omega_s + G_{sp}|P_p|^2$, $\bar{\Omega}_i = \Omega_i + G_{pi}|P_p|^2$ e $\bar{\Omega}_p = \Omega_p + 2G_{pp}|P_p|^2$, e observamos uma alteração das energias induzida pela intensidade de bombeio.

Podemos, também, considerar a dissipação na cavidade e acrescentar às equações (B.13)-(B.15) um termo fenomenológico da forma $-\gamma P_k$,

$$\frac{dP_s}{dt} = -i[(\bar{\Omega}_s - i\gamma)P_s + GP_i^* P_p^2], \quad (\text{B.22})$$

$$\frac{dP_i}{dt} = -i[(\bar{\Omega}_i - i\gamma)P_i + GP_s^* P_p^2], \quad (\text{B.23})$$

$$\frac{dP_p}{dt} = -i[(\bar{\Omega}_p - i\gamma)P_p + G^* P_p^* P_i P_s + E_p^*], \quad (\text{B.24})$$

onde 2γ é a largura de linha à meia altura dos *exciton-polaritons*.

Consideramos agora o caso de um estado estacionário em que um bombeio estacionário de frequência ω_p excita o sistema. Este bombeio leva o sistema ao estado estacionário em que a população do modo *pump* varia nesta mesma frequência. Nessa situação escolhemos uma amplitude estacionária da forma

$$P_p = \bar{P}_p e^{-i(\omega_p t + \phi/2)}, \quad (\text{B.25})$$

onde ϕ é uma fase arbitrária do laser de bombeio. O sistema de equações (B.22)-(B.24) se reduz a apenas duas

$$\frac{dP_s}{dt} = -i[(\bar{\Omega}_s - i\gamma)P_s + GP_i^* \bar{P}_p^2 e^{-i(2\omega_p t + \phi)}], \quad (\text{B.26})$$

$$\frac{dP_i^*}{dt} = +i[(\bar{\Omega}_i + i\gamma)P_i^* + G^* P_s \bar{P}_p^{*2} e^{+i(2\omega_p t + \phi)}], \quad (\text{B.27})$$

onde tomamos o complexo conjugado de (B.23). Fazendo as definições

$$a_1 = P_s, \quad \omega_1 = \bar{\Omega}_s - i\gamma, \quad \kappa = -G\bar{P}_p^2, \quad (\text{B.28})$$

$$a_2 = P_i, \quad \omega_2 = \bar{\Omega}_i + i\gamma, \quad \omega = 2\omega_p, \quad (\text{B.29})$$

obtemos

$$\frac{da_1}{dt} = -i\omega_1 a_1 + i\kappa a_2^* e^{-i(\omega t + \phi)}, \quad (\text{B.30})$$

$$\frac{da_2^*}{dt} = +i\omega_2 a_2^* - i\kappa a_1 e^{+i(\omega t + \phi)}. \quad (\text{B.31})$$

Na condição de ângulo mágico, onde $\omega = \omega_1 + \omega_2$ e, portanto, $2\omega_p = \bar{\Omega}_s + \bar{\Omega}_i$, esta equação é equivalente ao tratamento do oscilador paramétrico clássico estudado por Faraday e Lord Rayleigh, como mencionado por Louisell *et al* [67]. Se considerarmos os operadores quânticos ao invés de números complexos, ou seja, se não tomarmos o valor médio feito anteriormente, a equação acima corresponde à equação quântica para processos paramétricos, escrita e resolvida por Louisell *et al* [67] na representação de Heisenberg no domínio do tempo. Ciutti *et al* [14], no caso de *exciton-polaritons* em microcavidades, apresentam um conjunto análogo de equações, mas com um termo representando um laser de prova no modo *signal*. Podemos, agora, seguir a solução de Louisell *et al* [67], considerando os operadores quânticos nas equações (B.30) e (B.31),

$$\frac{d\hat{a}_1}{dt} = -i\omega_1 \hat{a}_1 + i\kappa \hat{a}_2^\dagger e^{-i(\omega t + \phi)}, \quad (\text{B.32})$$

$$\frac{d\hat{a}_2^\dagger}{dt} = +i\omega_2 \hat{a}_2^\dagger - i\kappa \hat{a}_1 e^{+i(\omega t + \phi)}, \quad (\text{B.33})$$

e, assim, obtemos

$$\hat{a}_1(t) = e^{-\omega_1 t} \{ \hat{a}_{10} \cosh \kappa t + i e^{-i\phi} \hat{a}_{20}^\dagger \sinh \kappa t \}, \quad (\text{B.34})$$

$$\hat{a}_2^\dagger(t) = e^{+\omega_2 t} \{ \hat{a}_{20}^\dagger \cosh \kappa t - i e^{+i\phi} \hat{a}_{10} \sinh \kappa t \}, \quad (\text{B.35})$$

onde $a_{10} = a_1(t=0)$ e $a_{20}^\dagger = a_2^\dagger(t=0)$. Na condição $t \gg \kappa$, em que teremos o maior ganho (amplificação), podemos escrever

$$\hat{a}_1(t \gg \kappa) = e^{-\gamma t - i\bar{\Omega}_s t} \{ \hat{a}_{10} e^{\kappa t} + i e^{-i\phi} \hat{a}_{20}^\dagger e^{\kappa t} \}, \quad (\text{B.36})$$

$$\hat{a}_2^\dagger(t \gg \kappa) = e^{-\gamma t + i\bar{\Omega}_i t} \{ \hat{a}_{20}^\dagger e^{\kappa t} - i e^{+i\phi} \hat{a}_{10} e^{\kappa t} \}, \quad (\text{B.37})$$

onde usamos as definições (B.28) e (B.29). Nessa situação, a população de *exciton-polaritons*, $n_s(t) = \langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \rangle = \langle p_s^\dagger p_s \rangle = |P_s|^2$, é dada por

$$n_s(t) = e^{2(\kappa - \gamma)t} \{ n_{s0} + n_{i0} + 1 \}, \quad (\text{B.38})$$

onde $n_{s0} = n_s(t=0)$ e $n_{i0} = n_i(t=0)$. Na expressão acima, observamos o crescimento exponencial, com um valor limiar $\kappa = \gamma$, correspondente à amplificação paramétrica.

APÊNDICE C – Hamiltoniano de bósons interagentes

Neste apêndice, demonstramos o hamiltoniano de bósons interagentes proveniente da teoria de muitos corpos [6, 7]. Nesta demonstração, empregamos os conceitos fundamentais de estados simetrizados, segunda quantização e operadores de aniquilação e criação de bósons.

C.1 Estados simetrizados e espaço de Hilbert \mathbb{H}_N

O espaço de Hilbert de um sistema de N partículas, \mathbb{H}_N , pode ser definido como o produto tensorial de N espaços de Hilbert, \mathbb{H} , correspondentes a cada partícula,

$$\mathbb{H}_N \equiv \underbrace{\mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \otimes \dots \otimes \mathbb{H}}_{N \text{ vezes}}. \quad (\text{C.1})$$

Considerando uma base ortonormal do espaço de Hilbert de uma partícula, $\{|\phi_i\rangle\}$, $i = 1, 2, \dots, d$, onde d é a dimensão do espaço \mathbb{H} , podemos definir uma base ortonormal de \mathbb{H}_N pelo produto tensorial de N estados da base de uma partícula,

$$|\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle \equiv |\phi_{i_1}\rangle \otimes |\phi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_N}\rangle, \quad (\text{C.2})$$

onde $|\phi_{i_j}\rangle$ é um estado da base da j -ésima partícula. A base definida acima é completa, com a relação de completeza dada por

$$\sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle \langle \phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}| = \mathbb{I}, \quad (\text{C.3})$$

onde \mathbb{I} é a identidade do espaço de Hilbert \mathbb{H}_N .

A princípio, poderíamos supor que todos os estados do espaço de Hilbert \mathbb{H}_N seriam possíveis para a descrição do sistema de N partículas. Mas a propriedade quântica de indistinguibilidade das partículas exige que os estados do sistema de N partículas sejam totalmente simétricos ou antissimétricos em relação à troca dos estados de qualquer par de partículas. A simetria ou antissimetria do estado, por sua vez, está associada à propriedade quântica do momento angular intrínseco das partículas, o *spin*. Pode ser demonstrado ¹ que partículas que possuem *spin* inteiro, denominadas bósons, devem ser descritas por estados simétricos, enquanto partículas de *spin* semi-inteiro, denominadas férmions, devem

¹ Utilizando a mecânica quântica relativística e as hipóteses de localidade, causalidade e invariância de Lorentz.

ser descritas por estados antissimétricos. Quando tivermos partículas compostas e energias baixas comparadas a sua energia de ligação, a soma do *spin* de seus componentes, que pode ser um número inteiro ou semi-inteiro, determinará a descrição simétrica ou antissimétrica do estado. Por exemplo, partículas compostas por um número qualquer de bósons ou por um número par de férmions são descritas como bósons (*spin* total inteiro).

Vamos, agora, determinar os estados do espaços de Hilbert \mathbb{H}_N adequados à descrição de bósons. O primeiro passo para isso é definir o operador de simetrização S , que atua em um estado da base \mathbb{H}_N , $|\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle$, dando origem a um estado totalmente simétrico $|\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle_S$,

$$|\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle_S = c_N S |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle, \quad (\text{C.4})$$

onde c_N é uma constante de normalização a ser determinada. Podemos definir o operador S por

$$S |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle \equiv \frac{1}{N!} \sum_P |\phi_{\bar{i}_1}, \phi_{\bar{i}_2}, \dots, \phi_{\bar{i}_N}\rangle, \quad (\text{C.5})$$

onde a somatória indica soma sobre todas as permutações $\{\bar{i}_1, \bar{i}_2, \dots, \bar{i}_N\}$ dos índices $\{i_1, i_2, \dots, i_N\}$. Podemos mostrar que o operador S é um projetor fazendo

$$\begin{aligned} S^2 |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle &= \frac{1}{N!} \sum_P S |\phi_{\bar{i}_1}, \phi_{\bar{i}_2}, \dots, \phi_{\bar{i}_N}\rangle = \\ &= \frac{1}{N!} N! S |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle = S |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

onde, na primeira linha, a permutação de cada termo da somatória, pela operação de S , fornece o mesmo resultado $N!$ vezes. Notando que S também é hermitiano, podemos calcular a norma do estado $S |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N} | S^2 |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle &= \langle \phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N} | S |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_P \langle \phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N} | \phi_{\bar{i}_1}, \phi_{\bar{i}_2}, \dots, \phi_{\bar{i}_N}\rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_P \langle \phi_{\bar{i}_1} | \phi_{i_1}\rangle \langle \phi_{\bar{i}_2} | \phi_{i_2}\rangle \dots \langle \phi_{\bar{i}_N} | \phi_{i_N}\rangle = \frac{1}{N!} \prod_{i=1}^d n_i! \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

onde n_i é o número de partículas que estão no i -ésimo estado da base ordenada $\{|\phi_i\rangle\}$. Com o resultado anterior, podemos determinar a constante c_N e reescrever o estado totalmente simétrico como

$$|\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle_S = \sqrt{\frac{N!}{\prod_j n_j}} S |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle. \quad (\text{C.8})$$

Os estados $\{|\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle_S\}$ formam uma base ortonormal e geram o espaço de Hilbert para N bósons, \mathbb{B}_N , dado por

$$\mathbb{B}_N = S \mathbb{H}_N, \quad (\text{C.9})$$

ou seja, a projeção de \mathbb{H}_N por S .

C.2 Espaço de Fock e operadores de aniquilação e criação de bósons

Como observamos nas expressões (C.7) e (C.8), a informação relevante sobre o estado não simetrizado, $|\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle$, para a operação de simetrização é o número de partículas n_j , ou seja, a população do j -ésimo estado da base do espaço de uma partícula \mathbb{H} . Em outras palavras, no estado simetrizado a informação relevante é “quantas partículas estão em cada estado de uma partícula $|\phi_i\rangle$ ”, e não “qual partícula está em qual estado”. Partindo disso, podemos definir a seguinte notação para os estados totalmente simétricos

$$|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle \equiv |\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \dots, \phi_{i_N}\rangle_S, \quad (\text{C.10})$$

onde, para estados de \mathbb{B}_N , devemos ter

$$n_j = 0, 1, 2, \dots, N, \quad \text{e} \quad \sum_{j=1}^d n_j = N.$$

Vamos, agora, introduzir operadores que atuam sobre os estados definidos anteriormente (C.10) criando ou aniquilando uma partícula e, em seguida, definiremos o espaço de Fock onde atuam estes operadores². Para um estado $|\phi_j\rangle \in \mathbb{H}$, definimos os operadores de **criação e aniquilação de um bóson** nesse estado, respectivamente, como

$$a_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle \equiv \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots, n_d\rangle, \quad \text{e} \quad (\text{C.11})$$

$$a_j |n_1, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle \equiv \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_d\rangle, \quad (\text{C.12})$$

onde n_j é a população do estado $|\phi_j\rangle$ antes da aplicação. Observe que os operadores a_j^\dagger e a_j atuam no espaço de N partículas, \mathbb{B}_N , resultando em um estado do espaço \mathbb{B}_{N+1} (criação) ou do espaço \mathbb{B}_{N-1} (aniquilação). Podemos definir um estado de vácuo, $|0\rangle$, representando um estado com $N = 0$. Pelas definições anteriores, temos

$$a_j^\dagger |0\rangle = |\phi_j\rangle, \quad \text{e} \quad (\text{C.13})$$

$$a_j |0\rangle = 0. \quad (\text{C.14})$$

A atuação de a_j^\dagger em $\mathbb{B}_0 = \{|0\rangle\}$ cria um estado em $\mathbb{B}_1 = \mathbb{H}$, o espaço de uma partícula, enquanto a atuação do operador de aniquilação a_j resulta no vetor nulo 0. Partindo do

² O procedimento de extensão do espaço de Hilbert para descrever um número qualquer de partículas (espaço de Fock) e de introduzir operadores de criação e aniquilação de uma partícula, é denominado *segunda quantização* [6, 7]. Tal denominação deve-se ao fato de que não tratamos diretamente com as funções de onda das partículas (*primeira quantização*), mas com a criação e aniquilação de uma partícula da mesma forma que o *quantum* de um campo.

estado de vácuo, pela atuação sucessiva dos operadores $a_1^\dagger, a_2^\dagger, \dots, a_d^\dagger$, podemos construir um estado totalmente simétrico qualquer como

$$|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_d^\dagger)^{n_d}}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_d!}} |0\rangle. \quad (\text{C.15})$$

Pela soma direta dos espaços $\mathbb{B}_0, \mathbb{B}_1, \mathbb{B}_2, \dots, \mathbb{B}_N, \dots$ podemos definir o **espaço de Fock de bósons**, \mathbb{B} , como

$$\mathbb{B} \equiv \mathbb{B}_0 \oplus \mathbb{B}_1 \oplus \mathbb{B}_2 \oplus \dots = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathbb{B}_N. \quad (\text{C.16})$$

Os operadores criação e aniquilação a_j^\dagger e a_j atuam dentro deste espaço e os estados totalmente simétricos (C.15) formam uma base cuja relação de completude é dada por

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_d=0}^{\infty} |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_d| = \mathbb{I}. \quad (\text{C.17})$$

Veremos, agora, algumas propriedades dos operadores aniquilação e criação. Primeiro, observamos que as definições (C.11) e (C.12), onde o operador aniquilação é apresentado como conjugado hermitiano do operador criação, são consistentes. Podemos comprovar isso calculando os elementos de matriz entre dois estados,

$$\begin{aligned} & \langle n_1, \dots, n_j, \dots, n_d | a_j^\dagger | \bar{n}_1, \dots, \bar{n}_j, \dots, \bar{n}_d \rangle = \\ & = \sqrt{\bar{n}_j + 1} \langle n_1, \dots, n_j, \dots, n_d | \bar{n}_1, \dots, \bar{n}_j + 1, \dots, \bar{n}_d \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

$$\begin{aligned} & \langle n_1, \dots, n_j, \dots, n_d | a_j | \bar{n}_1, \dots, \bar{n}_j, \dots, \bar{n}_d \rangle = \\ & = \sqrt{\bar{n}_j} \langle n_1, \dots, n_j, \dots, n_d | \bar{n}_1, \dots, \bar{n}_j - 1, \dots, \bar{n}_d \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

As duas expressões acima serão não nulas somente quando $n_j = \bar{n}_j + 1$ ou $n_j = \bar{n}_j - 1$, e nesses casos, (C.18) torna-se exatamente o conjugado complexo de (C.19). As propriedades de comutação dos operadores aniquilação e criação podem ser determinadas pela atuação destes operadores em estados distintos, $|\phi_j\rangle$ e $|\phi_k\rangle$,

$$a_j a_k |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_d\rangle = \sqrt{n_j} \sqrt{n_k} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_k - 1, \dots, n_d\rangle,$$

$$a_k a_j |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_d\rangle = \sqrt{n_k} \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_k - 1, \dots, n_d\rangle,$$

$$a_j^\dagger a_k^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_d\rangle = \sqrt{n_j + 1} \sqrt{n_k + 1} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots, n_k + 1, \dots, n_d\rangle,$$

$$a_k^\dagger a_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_d\rangle = \sqrt{n_k + 1} \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots, n_k + 1, \dots, n_d\rangle,$$

$$a_j a_k^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_d\rangle = \sqrt{n_j} \sqrt{n_k + 1} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_k + 1, \dots, n_d\rangle,$$

$$a_k^\dagger a_j |n_1, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_d\rangle = \sqrt{n_k + 1} \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_k + 1, \dots, n_d\rangle.$$

Podemos deduzir, pelas expressões acima, os comutadores

$$[a_j, a_k] = [a_j^\dagger, a_k^\dagger] = [a_j, a_k^\dagger] = 0, \text{ para } j \neq k. \quad (\text{C.20})$$

Pela atuação de a_j^\dagger e a_j em um mesmo estado $|\phi_j\rangle$,

$$a_j a_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle = (n_j + 1) |n_1, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle, \quad (\text{C.21})$$

$$a_j^\dagger a_j |n_1, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle = n_j |n_1, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle, \quad (\text{C.22})$$

podemos deduzir o comutador

$$[a_j, a_j^\dagger] = 1. \quad (\text{C.23})$$

Considerando os resultados (C.20) e (C.23), podemos escrever

$$[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}. \quad (\text{C.24})$$

Pela expressão (C.22), podemos definir $a_j^\dagger a_j$ como o operador **número de partículas** do estado de uma partícula $|\phi_j\rangle$,

$$\hat{n}_j = a_j^\dagger a_j, \quad (\text{C.25})$$

e, conseqüentemente, o operador **número total de partículas**,

$$\hat{N} = \sum_{j=1}^d a_j^\dagger a_j. \quad (\text{C.26})$$

Finalmente, para encerrar esta seção, consideramos a transformação de base para os operadores criação e aniquilação. Podemos considerar a transformação entre as bases $\{|\phi_j\rangle\}$ e $\{|\omega_j\rangle\}$ do espaço de uma partícula \mathbb{H} , dada por

$$|\omega_j\rangle = \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | \omega_j \rangle |\phi_i\rangle. \quad (\text{C.27})$$

Pela definição (C.11), para o operador criação $a_{\omega_j}^\dagger$ na base $|\omega_j\rangle$, devemos ter

$$a_{\omega_j}^\dagger |n_{\omega_1}, \dots, n_{\omega_j}, \dots, n_{\omega_d}\rangle = \sqrt{n_{\omega_j} + 1} |n_{\omega_1}, \dots, n_{\omega_j} + 1, \dots, n_{\omega_d}\rangle. \quad (\text{C.28})$$

Considerando a definição do estado totalmente simétrico (C.8), obtemos

$$a_{\omega_j}^\dagger c_N S |\omega_1, \dots, \omega_N\rangle = \sqrt{n_{\omega_j} + 1} c_{N+1} S |\omega_1, \dots, \omega_N, \omega_{N+1}\rangle. \quad (\text{C.29})$$

Verificando que $\sqrt{n_{\omega_j} + 1}c_{N+1} = \sqrt{N + 1}c_N$, podemos escrever

$$a_{\omega_j}^\dagger S|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle = \sqrt{N + 1}S|\omega_1, \dots, \omega_N, \omega_{N+1}\rangle. \quad (\text{C.30})$$

Agora, aplicando a transformação de base somente ao estado $N + 1$ à direita,

$$\begin{aligned} a_{\omega_j}^\dagger S|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle &= \sqrt{N + 1}S[|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle \otimes |\omega_{N+1}\rangle] = \\ &= \sqrt{N + 1} \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | \omega_j \rangle S[|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle \otimes |\phi_i\rangle]. \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

Pela equação (C.30), podemos verificar que $\sqrt{N + 1}S[|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle \otimes |\phi_i\rangle] = a_i^\dagger S|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle$, e com isso,

$$a_{\omega_j}^\dagger S|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle = \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | \omega_j \rangle a_i^\dagger S|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle.$$

Como o estado $S|\omega_1, \dots, \omega_N\rangle$ é arbitrário, podemos identificar,

$$a_{\omega_j}^\dagger = \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | \omega_j \rangle a_i^\dagger, \quad (\text{C.32})$$

e, tomando o conjugado,

$$a_{\omega_j} = \sum_{i=1}^d \langle \omega_j | \phi_i \rangle a_i. \quad (\text{C.33})$$

Partindo da expressão anterior, podemos determinar a relação de comutação na nova base,

$$\begin{aligned} [a_{\omega_j}, a_{\omega_k}^\dagger] &= \sum_{i,l} \langle \phi_i | \omega_k \rangle \langle \omega_j | \phi_l \rangle \underbrace{[a_i, a_l^\dagger]}_{=\delta_{il}} = \\ &= \sum_i \langle \omega_j | \underbrace{\phi_i}_{\mathbb{I}} \rangle \langle \phi_i | \omega_k \rangle = \langle \omega_j | \omega_k \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

Para uma base $\{|\omega_j\rangle\}$ ortonormal recuperamos o resultado (C.24). Uma base importante no espaço de uma partícula \mathbb{H} é a base das posições $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, pois nessa base os operadores de criação e aniquilação são denominados **operadores de campo**, $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ e $\hat{\psi}(\mathbf{r})^\dagger$, respectivamente. Na base das posições, a relação de comutação (C.34) se torna

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')^\dagger] = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{C.35})$$

Para os operadores de campo, as relações de transformação (C.32) e (C.33) se tornam

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^d \langle \mathbf{r} | \phi_i \rangle a_i = \sum_{i=1}^d \phi_i(\mathbf{r}) a_i, \quad \text{e} \quad (\text{C.36})$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | \mathbf{r} \rangle a_i^\dagger = \sum_{i=1}^d \phi_i^*(\mathbf{r}) a_i^\dagger. \quad (\text{C.37})$$

A seguir, discutimos a expressão de outros operadores atuando no espaço de Fock para bósons.

C.3 Operadores de um corpo, dois corpos ou n corpos

Um operador adequado para a descrição de bósons, por conta da propriedade quântica da indistinguibilidade, deve ter seus elementos de matriz invariantes sob a permutação de quaisquer partículas. Um operador \hat{O} do espaço de Hilbert de N partículas, \mathbb{H}_N , com esta característica pode ser representado no espaço de Hilbert de estados totalmente simétrico, \mathbb{B}_N , pela aplicação do projetor S ,

$$\hat{O}_S = S\hat{O}S. \quad (\text{C.38})$$

Discutimos, agora, esta classe de operadores que possuem, ainda, a característica adicional de atuar somente sobre uma partícula, duas partículas ou n partículas.

Denominamos **operador de um corpo**, um operador \hat{K} tal que a sua aplicação sobre um estado de N partículas, $|\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle$, é igual à soma da aplicação de \hat{K} sobre cada partícula,

$$\hat{K}|\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle = \sum_{i=1}^N \hat{K}_i|\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle, \quad (\text{C.39})$$

onde \hat{K}_i é o operador que atua apenas no espaço da i -ésima partícula. Como exemplo, temos o operador da energia cinética total do sistema que consiste na soma da energia cinética de cada partícula. Supondo que a base $\{|\phi_i\rangle\}$ diagonaliza o operador \hat{K} , temos

$$\hat{K}|\phi_i\rangle = K_i|\phi_i\rangle, \quad (\text{C.40})$$

onde K_i é o autovalor de \hat{K} no estado $|\phi_i\rangle$. Dessa forma, para um estado totalmente simétrico obtemos

$$\hat{K}|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle = \sum_{i=1}^d K_i n_i |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle = \sum_{i=1}^d K_i \hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle. \quad (\text{C.41})$$

Como $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle$ é um estado arbitrário da base de \mathbb{B}_N , podemos escrever

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^d K_i \hat{n}_i = \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | \hat{K} | \phi_i \rangle a_i^\dagger a_i. \quad (\text{C.42})$$

Considerando a transformação para outra base $\{|\omega_j\rangle\}$, dada pelas expressões (C.32) e (C.33), obtemos

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \sum_i K_i a_i^\dagger a_i = \sum_{i,j,k} K_i \langle \omega_j | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \omega_k \rangle a_{\omega_j}^\dagger a_{\omega_k} = \\ &= \sum_{j,k} \langle \omega_j | \left\{ \sum_i K_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \right\} | \omega_k \rangle a_{\omega_j}^\dagger a_{\omega_k} = \\ &= \sum_{j,k} \langle \omega_j | \hat{K} | \omega_k \rangle a_{\omega_j}^\dagger a_{\omega_k}, \end{aligned} \quad (\text{C.43})$$

onde usamos a decomposição no espaço de uma partícula \mathbb{H} , $\hat{K} = \sum_i K_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$. Usando a base das posições $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, a expressão anterior assume a forma

$$\hat{K} = \int d^3r d^3r' \langle\mathbf{r}|\hat{K}|\mathbf{r}'\rangle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}'). \quad (\text{C.44})$$

Denominamos **operador de dois corpos** um operador \hat{V} cuja aplicação sobre um estado de N partículas é igual a soma da aplicação sobre cada par distinto de partículas,

$$\begin{aligned} \hat{V}|\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle &= \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{V}_{ij}|\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} \hat{V}_{ij}|\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.45})$$

onde \hat{V}_{ij} é o operador que atua apenas nas partículas i e j e, na segunda linha, o fator $1/2$ foi usado para compensar a contagem dupla quando $\hat{V}_{ij} = \hat{V}_{ji}$. Como exemplo, temos o operador da energia potencial total do sistema quando as interações entre as partículas ocorrem somente aos pares. Supondo que a base $\{|\phi_i, \phi_j\rangle\}$, para o espaço de duas partículas \mathbb{H}_2 , diagonaliza \hat{V} temos

$$\hat{V}|\phi_i, \phi_j\rangle = V_{ij}|\phi_i, \phi_j\rangle. \quad (\text{C.46})$$

Dessa forma, para um estado totalmente simétrico obtemos

$$\hat{V}|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \hat{n}_i (\hat{n}_j - \delta_{ij}) |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle, \quad (\text{C.47})$$

onde $\hat{n}_i (\hat{n}_j - \delta_{ij})$ é o operador que fornece o número de pares de partículas nos estados $|\phi_i\rangle$ e $|\phi_j\rangle$. Usando as relações de comutação, podemos reescrever em termos dos operadores de criação e aniquilação,

$$\hat{n}_i (\hat{n}_j - \delta_{ij}) = a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \delta_{ij} a_i a_i^\dagger a_j = a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i, \quad (\text{C.48})$$

e, então,

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle\phi_i, \phi_j|\hat{V}|\phi_i, \phi_j\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i. \quad (\text{C.49})$$

Considerando uma transformação de base, como feito na expressão (C.43), podemos demonstrar que

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle\omega_i, \omega_j|\hat{V}|\omega_k, \omega_l\rangle a_{\omega_i}^\dagger a_{\omega_k}^\dagger a_{\omega_j} a_{\omega_l}. \quad (\text{C.50})$$

Na bases da posições, para uma interação pontual, obtemos

$$\langle\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\hat{V}|\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''\rangle = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''), \quad (\text{C.51})$$

e, então,

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}'). \quad (\text{C.52})$$

Denominamos **operador de n corpos**, um operador \hat{U} cuja aplicação sobre um estado de N partículas é igual a aplicação sobre cada conjunto distinto de n partículas,

$$\hat{U}|\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle = \frac{1}{n!} \sum_{1 \leq i_1 \neq \dots \neq i_n \leq N} \hat{U}_{i_1 \dots i_n} |\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\rangle, \quad (\text{C.53})$$

onde $\hat{U}_{i_1 \dots i_n}$ é o operador sobre o conjunto de partículas i_1, i_2, \dots, i_n . Podemos generalizar os procedimentos anteriores e escrever

$$\hat{U} = \frac{1}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n} \sum_{j_1 \dots j_n} \langle \phi_{i_1}, \dots, \phi_{i_n} | \hat{U} | \omega_{j_1}, \dots, \omega_{j_n} \rangle a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_n}^\dagger a_{\omega_{j_1}} \dots a_{\omega_{j_n}}. \quad (\text{C.54})$$

A seguir, utilizamos os resultados desta seção no operador hamiltoniano descrevendo um sistema de bósons interagentes.

C.4 Hamiltoniano de bósons interagentes

Considere um sistema de N bósons não interagentes. Nessa situação, a energia total do sistema será dada pela adição da energia cada partícula e, conseqüentemente, o operador hamiltoniano será determinado por um operador de um corpo. Assim, pela expressão (C.43), podemos escrever

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}, \nabla) \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (\text{C.55})$$

onde $H(\mathbf{r}, \nabla)$ é a representação na base das posições do operador hamiltoniano de uma partícula. Consideremos, agora, a situação em que as partículas podem interagir somente aos pares como, por exemplo, em um gás. Nessa situação, o operador da energia potencial total do sistema é determinado por um operador de dois corpos. Na descrição do sistema de bósons, dada pela equação (C.55), devemos adicionar o termo referente à energia potencial na forma da expressão (C.52),

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}, \nabla) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}'), \quad (\text{C.56})$$

onde $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é o potencial de interação de partículas aos pares. Utilizamos este hamiltoniano na dedução da aproximação de três modos realizada na seção 2.3.

Anexos

ANEXO A – Artigo publicado

Segue anexo o artigo com os resultados apresentados neste trabalho, publicado em *Physical Review E* **96**, pág. 062146-1 (2017).