

Quenches de desordem no modelo de Bose-Hubbard

Bruno Abreu¹

bricardi@ifi.unicamp.br

Colaborador: Ushnish Ray²

Orientadores: Silvio Vitiello¹, David Ceperley³

¹Instituto de Física *Gleb Wataghin* (IFGW) - Unicamp

²California Institute of Technology - Caltech

³ Institute for Condensed Matter Theory - UIUC

1. Motivação
2. O modelo de Bose-Hubbard
3. Desordem diagonal
4. Monte Carlo quântico: *Stochastic series expansion*
5. Alguns resultados

Motivação

Teoria → Predições teóricas → Experimento

← expansão da teoria guiada por evidências experimentais ←

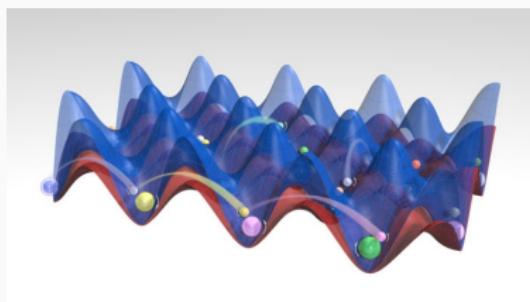
- Sistemas reais podem ser extremamente complicados: como distinguir os ingredientes chave que uma teoria deve conter?



- Construção de materiais “a partir do esboço” com apenas os atributos que supostamente contribuem (materias sintéticos)

Redes ópticas

- Física atômico-molecular óptica (AMO) pode ser usada pra estudar sistemas de matéria condensada (CM)
 - Redes artificiais que possuem as principais características de modelos da CM pode ser construídas em laboratório
 - Interações sintonizáveis, número de partículas, desordem...



- Os chamados sistemas de átomos (ultra) frios são realizações de modelos padrão da matéria condensada em redes ópticas
- Eles permitem “emular” estes modelos (incerteza experimental inerente)

Simulações

- Ferramentas computacionais permitem resolver problemas onde os métodos analíticos nem sempre são efetivos
 - Regimes não perturbativos
 - Inclusão de correlações de todas as ordens
- Supercomputadores + grande controle experimental:
simular e emular sistemas de tamanho comparável
 - Neste âmbito, métodos de Monte Carlo são largamente aplicados



O modelo de Bose-Hubbard

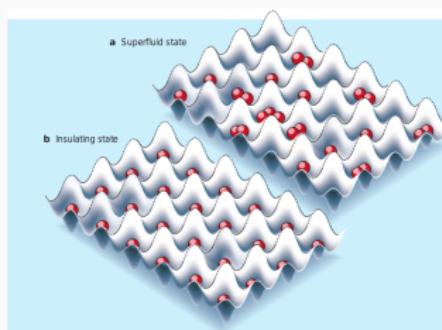
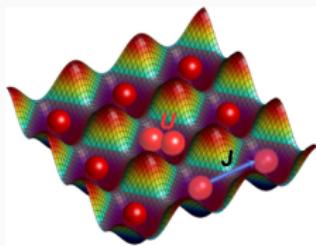
Hamiltoniano

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} [\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i] + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i$$

t : termo de hopping, difusão para sítios vizinhos

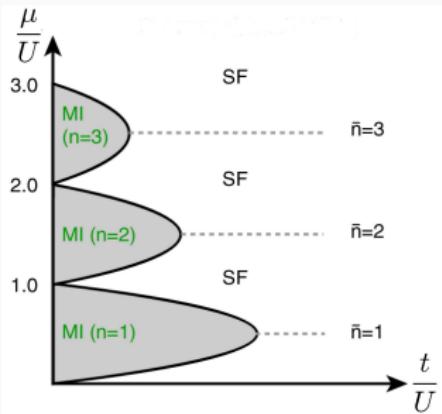
U : interação entre bôsons no mesmo sítio (contato)

μ : potencial químico

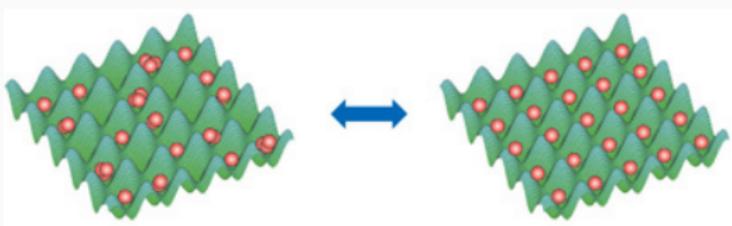


- Competição entre localização (interação) e delocalização (difusão) determina a fase do sistema

Diagrama de fases



SF: superfluido, MI: isolante de Mott



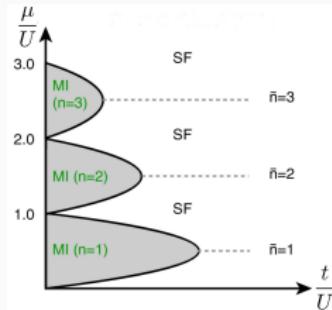
Resultado de *site-decoupled mean field theory*

Transição de fase governada pela razão entre parâmetros do modelo (t/U)

- Estamos falando do estado fundamental do modelo ($T = 0$), logo este é um exemplo de transição de fase quântica

Excitações

- Excitações do modelo são intuitivamente de aspecto partícula ou buraco (pares no ensemble canônico)
- **Fase superfluida**, limite fracamente interagente
Teoria de Hartree-Fock-Bogoliubov-Popov
Espectro de energia não possui *gap* (excitações de grande comprimento de onda)
- Indicam um dos possíveis parâmetros de ordem do sistema
- **Fase isolante**, limite fortemente interagente
Teoria de campo médio (sítios desacoplados)
Espectro de energia possui *gap*



Propriedades macroscópicas

- Compressibilidade: variação da densidade com potencial químico (flutuação do número de partículas)
Sistemas com *gap* (isolantes) são incompressíveis
- Fração de superfluido: modelo de dois fluidos
 - $\rho = \rho_S + \rho_N$, ρ_S não carrega entropia
 - Fluxo de massa sem dissipação

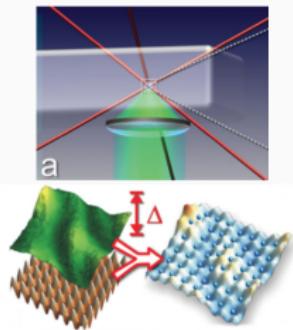
Fase	Fração de superfluido	Compressibilidade
Superfluido (SF)	finita	finita
Isolante de Mott (MI)	zero	zero

Desordem diagonal

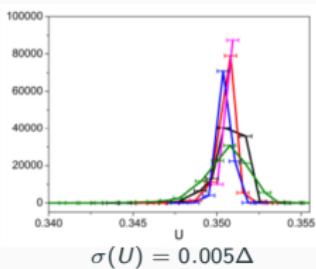
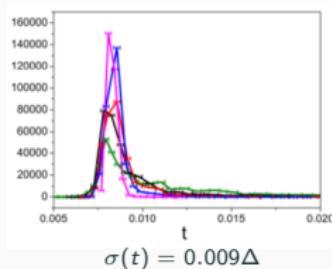
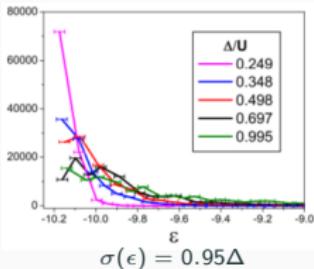
Modificações no hamiltoniano

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_i U_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i (\mu - \epsilon_i) \hat{n}_i$$

ϵ_i : energia de ocupação de cada sítio associada à desordem adicionada (potencial químico local)
→ amostrado de uma distribuição com desvio padrão Δ (*speckle field*, uniforme, gaussiana)

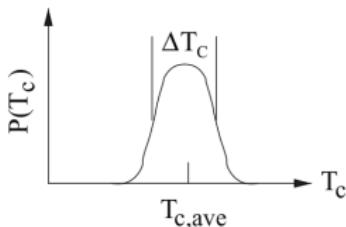
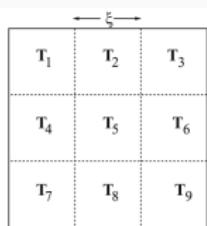


$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i (\mu - \epsilon_i) \hat{n}_i$$



Critério de Harris

- Hamiltoniano limpo com parâmetro de controle T e ponto crítico em $T = T_c$
 - O que acontece com as fases do sistema quando adicionamos desordem *fracamente*? A estabilidade da transição se altera?



largura do histograma ΔT_c

$$\Delta T_c \sim 1/\sqrt{\xi^d} = \xi^{-d/2}$$

comprimento de correlação ξ

$$\xi \sim (T - T_c)^{-\nu}$$

$$|T - T_c| \sim \xi^{-1/\nu}$$

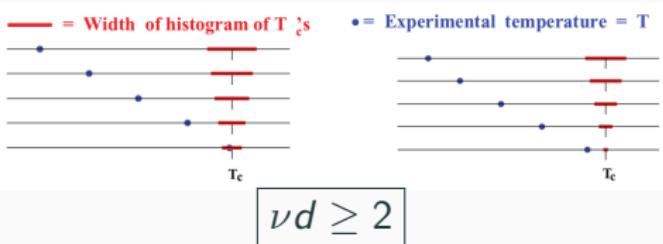
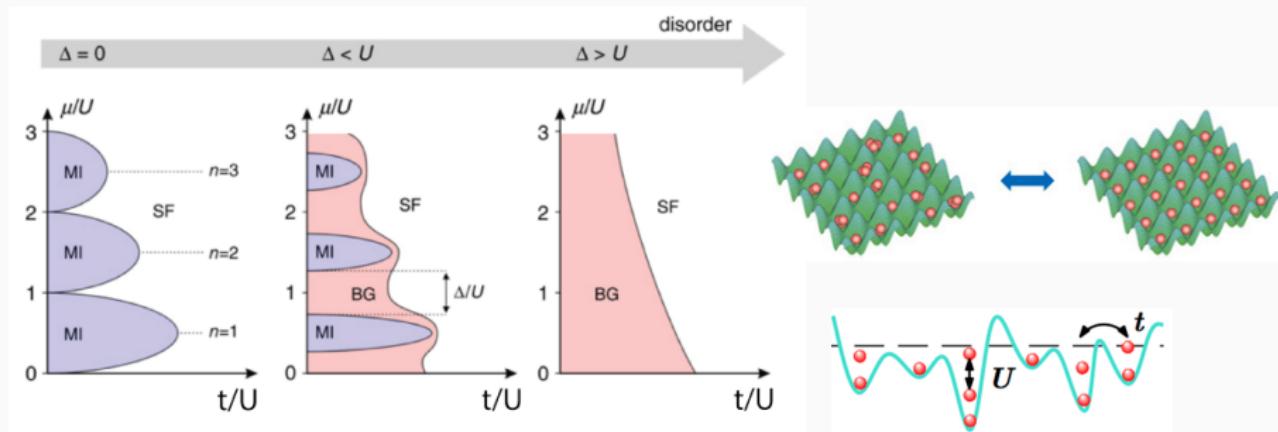


Diagrama de fases

- O modelo de Bose-Hubbard em três dimensões viola o critério de Harris ($d = 3$ e $\nu = 1/2$)
 - O ponto crítico do hamiltoniano limpo se torna instável sob adição de desordem, e uma nova fase que intervém a transição SF-MI surge: o vidro de Bose (BG)

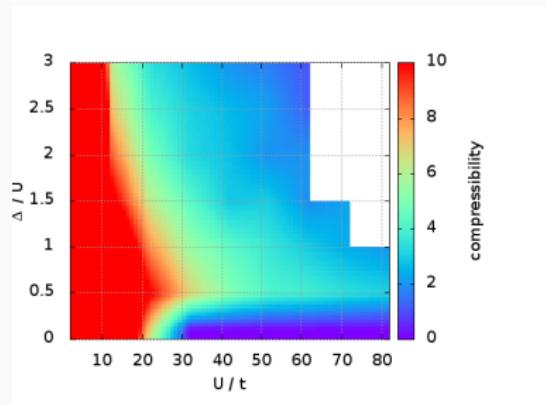
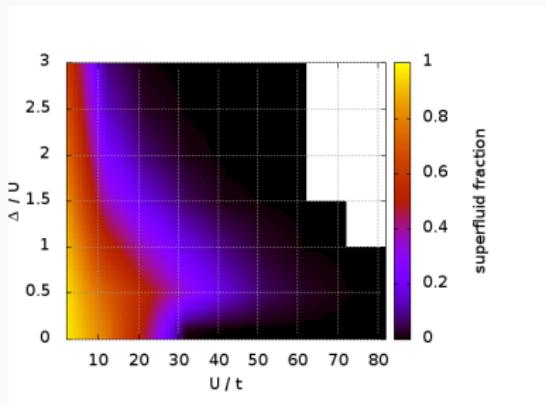


- As transições MI-BG e BG-SF obedecem o critério de Harris

Parâmetros de ordem

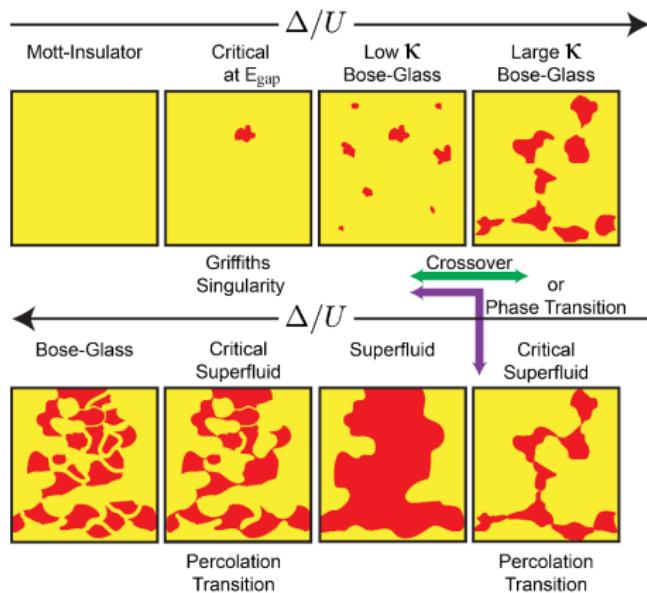
- A adição de desordem quebra o *gap* do isolante de Mott, tornando o vidro de Bose compressível

Fase	Fração de superfluido	Compressibilidade
Superfluido (SF)	finita	finita
Vidro de Bose (BG)	zero	finita
Isolante de Mott (MI)	zero	zero



Esquema de percolação e singularidades de Griffiths

- O vidro de Bose apresenta características intermediárias entre as duas fases do modelo limpo
 - A desordem entra em jogo como uma nova fonte de localização de partículas

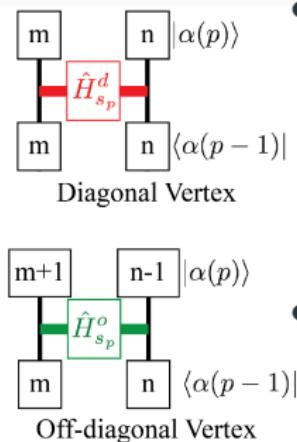
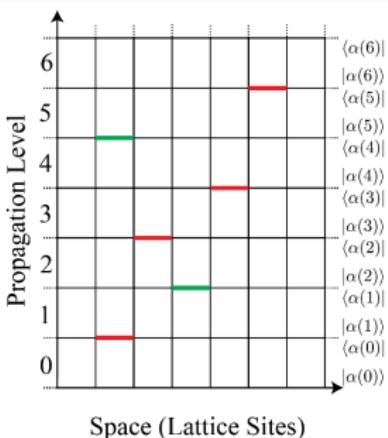


- A transição BG-SF está na classe de universalidade das percolações
- A transição BG-MI é dominada pela física das fases de Griffiths

Monte Carlo quântico: *Stochastic series expansion*

Ideia geral do método SSE

- Desenvolvido em 1992 por A. Sandvik como generalização do método de Handscomb (1962)
→ bastante poderoso para tratar modelos de rede a temperatura finita (férnions e bósons)



- Possui uma interpretação em termos de “linhas de mundo” que é relacionada com integrais de trajetória (PIMC)
- As configurações são amostradas através do algoritmo de vermes (*worm algorithm*)

Parâmetros de controle

- O código utilizado foi escrito em 2014 em *C++* e *Python* (diversas modificações), e está disponível no *github* (CSSER)
- Parâmetros de Hubbard U , t
- Dimensões de 1 a 3 (rede cúbica)
- Potencial químico μ e preenchimento
- Distribuições de desordem (box, gaussiana, laplaciana)
- Temperatura
- Sistemas homogêneos e não-homogêneos (armadilha harmônica)
- Grandezas calculadas
 - Energia e calor específico
 - Densidade e compressibilidade
 - *Winding number* (fração de superfluido global) e fração de superfluido local
 - Matriz densidade de partícula única
 - Funções de Green de partícula única no tempo imaginário

Alguns resultados

Médias sobre realizações de desordem

- Uma vez que a desordem é estática (*quenches*), realizar médias sobre diferentes realizações é imprescindível
- Entender o comportamento dessas médias longe e perto do ponto crítico é muito importante (sistemas de tamanho finito)

Propriedade física X

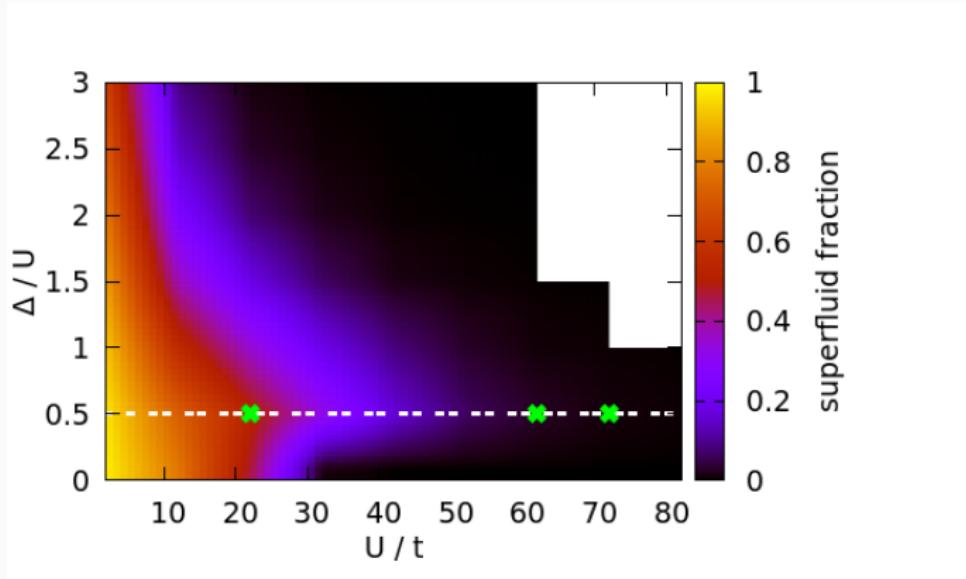
$[X]$: média sobre realizações de desordem

$(\Delta X)^2$: variância sobre realizações de desordem

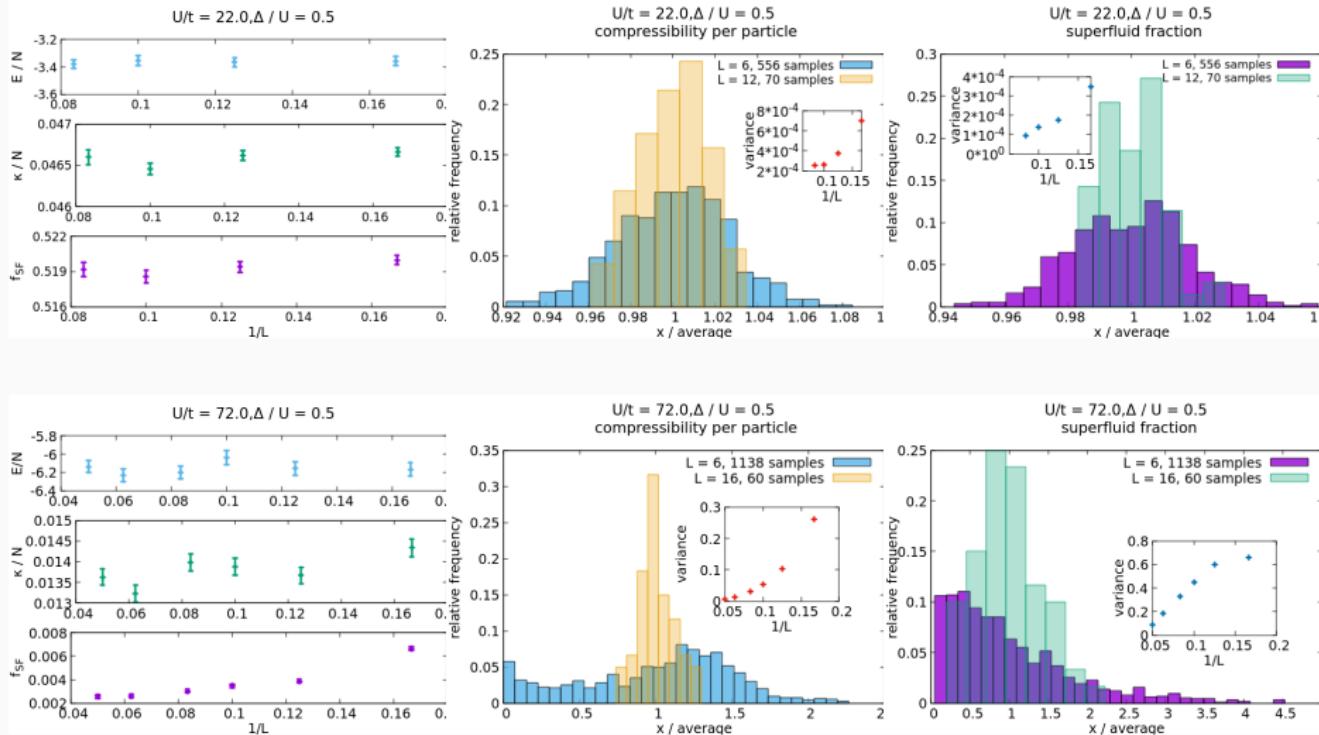
$P[X]$: distribuição de probabilidade da propriedade

Se $(\Delta X)^2/[X]^2 \rightarrow 0$ quando $L \rightarrow \infty$, diz-se que o modelo apresenta propriedade de “auto-mediação”

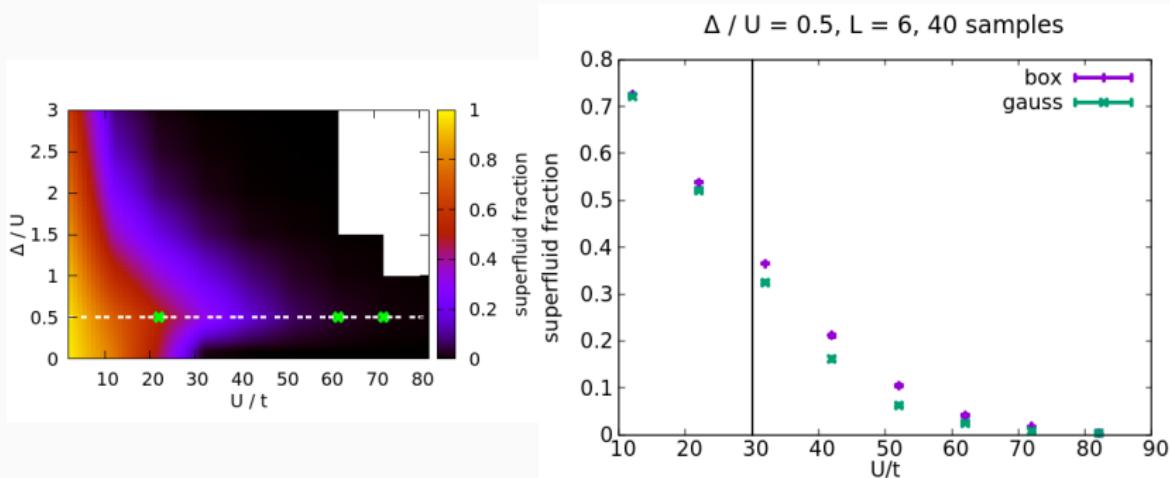
Distribuição dos parâmetros de ordem



Efeitos de tamanho



Ordem por desordem na fase superfluida



Perspectivas

- Distribuição das frações de condensado
- Entender a relação entre a realizações de desordem e as caudas da distribuição dos parâmetros de ordem
- Preenchimentos não-comensuráveis
- Efeitos de temperatura (derretimento) da fase superfluida
- Estimar tempos de relaxação na fase vidro de Bose

Sumário

- O avanço de técnicas experimentais e poder de computação recolocaram em discussão modelos de matéria condensada que consideram desordem (cuja discussão na literatura é razoavelmente antiga)
- Paralelamente a métodos analíticos e experimentais, simulações podem ajudar no entendimento de como a desordem altera correlações em sistemas a ponto de instabilizar fases e criar novas fases da matéria
- Em particular, este projeto busca e tem fornecido evidências de como a desordem pode alterar as características da fase superfluida do modelo de Bose-Hubbard e também das alterações causadas nas flutuações quânticas próximo à transição de fase SF-BG

FIM