Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Condensados de Bose-Einstein em redes óticas:
a transição superfluido-isolante de Mott em redes hexagonais e
a classe de universalidade superfluido-vidro de Bose em 3D

Karine Piacentini Coelho da Costa

Orientador: Prof. Dr. Arnaldo Gammal

Tese apresentada ao Instituto de Física da
Universidade de São Paulo para a obtenção
do título de Doutora em Ciências.

Comissão examinadora:

Prof. Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP)

Prof. Dr. Antonio F. R. de Toledo Piza (IFUSP)

Prof. Dr. Luis Gregório G. de Vasconcellos D. da Silva (IFUSP)

Prof. Dr. Eduardo Miranda (UNICAMP)

Prof. Dr. Silvio A. Sachetto Vitiello (UNICAMP)

São Paulo
2016

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Costa, Karine Piacentini Coelho da

Condensados de Bose-Einstein em redes óticas: a transição superfluido-isolante de Mott em redes hexagonais e a classe de universalidade superfluido-vidro de Bose em 3D. São Paulo, 2016.

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física.
Depto. de Física Experimental

Orientador: Prof. Dr. Arnaldo Gammal

Área de Concentração: Condensado de Bose-Einstein.

Unitermos: 1. Condensado de Bose-Einstein; 2. Mudança de fase;
3. Física computacional; 4. Vidro de Bose.

USP/IF/SBI-018/2016

À Leandro.

Agradecimentos

Meu doutorado foi uma época de grande crescimento pessoal e profissional. Muitas pessoas que fizeram parte desse período contribuíram para que tudo isso fosse possível. Gostaria de aproveitar esse espaço para agradecer a todas estas pessoas.

Ao meu orientador Arnaldo Gammal, agradeço pelos ensinamentos, as revisões desse texto, a paciência e por acreditar em mim. Também agradeço por vibrar comigo minhas vitórias e pelas oportunidades que tive durante meu doutorado.

Agradeço aos meus colegas de grupo Eduardo, Hedhio, Henrique e Kishor pelo companheirismo e amizade. Também a todos que fizeram parte e ajudaram a construir nosso Journal Club, tão importante na minha formação. Agradeço em especial aos professores Emerson Passos e Antônio de Toledo Piza pelos ensinamentos, questionamentos certos, dedicação e pela inspiração.

Também sou grata aos amigos que me deram o apoio e a força necessária para que eu conseguisse chegar até aqui. Durante esse período, conheci muitas pessoas que fizeram com que minhas memórias de São Paulo sejam tão queridas pra mim. Hoje, muitas delas estão espalhadas pelo mundo, mas eu gostaria de reuni-las aqui.

A angústia de procurar uma casa em São Paulo é uma porção considerável da angústia do doutorado, mas felizmente tive comigo Jaqueline, Pâmella, Nayara e Nubia, e considero que tive muita sorte de encontrá-las. No IFUSP, entre um bandeijão e um café, tive muitos bons momentos em companhia de Nayara, Jorgivan, Antônio, Tiago, Lucas e Ana. Pelas conversas francas, valiosos conselhos e pizzas na Kadalora, agradeço a Paula e Pedro, que repetidas vezes transformaram rebosteio em risadas.

As amigadas de longa data foram de valor inestimável. Agradeço a Amanda, Maíra, Thaís e Nauana pelo apoio, conselhos e amizade.

Alguns amigos tiveram uma participação mais direta nesta tese. Gostaria de agradecer a Lucas e Ana, pelo tempo doado e apoio em momentos cruciais do meu doutoramento. Aprendi muito com vocês. Por todas as discussões, agradeço à Fernanda, que foi também uma fonte de inspiração. Pela leitura da tese e ajuda com burocracias da tese na reta final agradeço em especial ao Henrique.

I would like to thank professor Nikolay Prokof'ev for the opportunity of learning so much and for all the challenges, discussions and teaching. My time at UMass was only a quarter of my PhD, but extremely important. It was a time when I learnt a lot of physics and of continuous personal growth.

I would like also to thank Zhiyuan for the discussions, help, and for sharing his notes and opinions about scientific literature.

I'm grateful for all the friends I made in Amherst that were essential at that time of great challenge. In special, I would like to thank Lucia and Andrés, for the friendship and company. I didn't expect to find such a valuable friends so far from home, their friendship and support was very important to me.

This time in UMass, however, was particularly enhanced by a previous one month long experience working at University of Oklahoma with professor Barbara Capogrosso-Sansone, to whom I'm deeply indebted for all the help with the Worm code, for the opportunity and attention.

Chegar ao fim de tão árdua jornada não seria possível sem o apoio de minha família. A meus pais, Rosvelter e Suilane, agradeço pelo que sou, por todo amor, dedicação e apoio. Aos meus irmãos, Chamili, Meline e Igor, de quem me orgulho muito, obrigada por estarem tão presentes na minha formação, por todas as confidências, incentivo e companheirismo. Também à Maria Rosa, que ainda tão pequenina já possui uma luz forte que alegrou e uniu nossa família.

Dedico o começo, o fim e o meio desta tese a Leandro, não consigo me imaginar fazendo o doutorado sem o teu apoio. Não agradeço apenas pelo suporte e pela força nos momentos mais críticos, mas também por tudo que aprendi contigo, por todas as revisões dos meus textos e desta tese, por assistir as minhas apresentações (inúmeras vezes!), seus comentários e críticas foram o que me fizeram crescer o suficiente para conseguir terminar essa jornada. Também agradeço pela compreensão e companheirismo, e quase agradeço as companhias aéreas que fizeram parte desse relacionamento, ajudando a mitigar os momentos de muita saudade...

Pelo apoio financeiro, agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

Resumo

Estudamos transições de fases quânticas em gases bosônicos ultrafrios aprisionados em redes óticas. A física desses sistemas é capturada por um modelo do tipo Bose-Hubbard que, no caso de um sistema sem desordem, em que os átomos têm interação de curto alcance e o tunelamento é apenas entre sítios primeiros vizinhos, prevê a transição de fases quântica superfluido-isolante de Mott (SF-MI) quando a profundidade do potencial da rede ótica é variado. Num primeiro estudo, verificamos como o diagrama de fases dessa transição muda quando passamos de uma rede quadrada para uma hexagonal. Num segundo, investigamos como a desordem modifica essa transição.

No estudo com rede hexagonal, apresentamos o diagrama de fases da transição SF-MI e uma estimativa para o ponto crítico do primeiro lobo de Mott. Esses resultados foram obtidos usando o algoritmo de Monte Carlo quântico denominado Worm. Comparamos nossos resultados com os obtidos a partir de uma aproximação de campo médio e com os de um sistema com uma rede ótica quadrada.

Ao introduzir desordem no sistema, uma nova fase emerge no diagrama de fases do estado fundamental intermediando a fase superfluida e a isolante de Mott. Essa nova fase é conhecida como vidro de Bose (BG) e a transição de fases quântica SF-BG que ocorre nesse sistema gerou muitas controvérsias desde seus primeiros estudos iniciados no fim dos anos 80. Apesar dos avanços em direção ao entendimento completo desta transição, a caracterização básica das suas propriedades críticas ainda é debatida. O que motivou nosso estudo, foi a publicação de resultados experimentais e numéricos em sistemas tridimensionais [Yu *et al.* Nature **489**, 379 (2012), Yu *et al.* PRB **86**, 134421 (2012)] que violam a lei de escala $\phi = \nu z$, em que ϕ é o expoente da temperatura crítica, z é o expoente crítico dinâmico e ν é o expoente do comprimento de correlação. Abordamos essa controvérsia numericamente fazendo uma análise de escalonamento finito usando o algoritmo Worm nas suas versões quântica e clássica. Nossos resultados demonstram que trabalhos anteriores sobre a dependência da temperatura de transição superfluido-líquido normal com o potencial químico (ou campo magnético, em sistemas de spin), $T_c \propto (\mu - \mu_c)^\phi$, estavam equivocados na interpretação de um comportamento transiente na aproximação da região crítica genuína. Quando os parâmetros do modelo são modificados de maneira a ampliar a região crítica quântica, simulações com ambos os modelos clássico e quântico revelam que a lei de escala $\phi = \nu z$ [com $\phi = 2.7(2)$, $z = 3$ e $\nu = 0.88(5)$] é válida. Também estimamos o expoente crítico do parâmetro de ordem, encontrando $\beta = 1.5(2)$.

Abstract

In this thesis, we have studied phase transitions in ultracold atoms trapped in optical lattices. The physics of these systems is captured by Bose-Hubbard-like models, which predicts a quantum phase transition (the so called superfluid - Mott insulator, or SF-MI) when varying the potential depth of the optical lattice in a system without disorder, where atoms have short range interactions, and tunneling is allowed only between nearest neighbors. Our studies followed two directions, one is concerned with the influence of the geometry of the lattice namely, we study the changes in the phase diagram of the SF-MI phase transition when the optical lattice is hexagonal. A second direction is to include disorder in the original system.

In our study of the hexagonal lattice, we obtain the phase diagram for the SF-MI transition and give an approximation for the critical point of the first Mott lobe, using a quantum Monte Carlo algorithm called Worm. We also compare our results with the ones from the squared lattice and obtained using mean-field approximation.

When disorder is included in the system, a new phase emerge in the ground-state phase diagram intermediating the superfluid and Mott-insulator phases. This new phase is called Bose-glass (BG) and the quantum phase transition SF-BG was the subject of many controversies since its first studies in the late 80s. Though many progress towards its thorough understanding were made, basics characterization of critical properties are still under debate. Our study was motivated by the publication of recent experimental and numerical studies in three-dimensional systems [Yu *et al.* Nature **489**, 379 (2012), Yu *et al.* PRB **86**, 134421 (2012)] reporting strong violations of the key quantum critical relation, $\phi = \nu z$, where ϕ is the critical-temperature exponent, z and ν are the dynamic and correlation length critical exponents, respectively. We addressed this controversy numerically performing finite-size scaling analysis using the Worm algorithm, both in its quantum and classical scheme. Our results demonstrate that previous work on the superfluid-to-normal fluid transition-temperature dependence on chemical potential (or magnetic field, in spin systems), $T_c \propto (\mu - \mu_c)^\phi$, was misinterpreting transient behavior on approach to the fluctuation region with the genuine critical law. When the model parameters are modified to have a broad quantum critical region, simulations of both quantum and classical models reveal that the $\phi = \nu z$ law [with $\phi = 2.7(2)$, $z = 3$, and $\nu = 0.88(5)$] holds true. We also estimate the order parameter exponent, finding $\beta = 1.5(2)$.

Lista de abreviações

BH $\rightarrow$ Bose-Hubbard

BG $\rightarrow$ Vidro de Bose^(*)

CF $\rightarrow$ Caminho fechado

CF_G $\rightarrow$ Caminho aberto (no qual G denota a ligação com a função de Green)

CM $\rightarrow$ Campo médio

DBH $\rightarrow$ Bose-Hubbard desordenado^(*)

FSS $\rightarrow$ Escalonamento de tamanho finito^(*)

hc-DBH $\rightarrow$ Bose-Hubbard desordenado no limite de caroço-duro ^(*)

MI $\rightarrow$ Isolante de Mott^(*)

NL $\rightarrow$ Líquido normal^(*)

QMC $\rightarrow$ Monte Carlo Quântico^(*)

SF $\rightarrow$ Superfluido

^(*) Abreviações adotadas como usado na literatura, isto é, referentes ao termo correspondente em inglês.

Sumário

Agradecimentos	iii
Resumo	v
Abstract	vii
Lista de abreviações	ix
1 Introdução	3
2 Gases bosônicos ultrafrios em redes óticas	7
2.1 O modelo de Bose-Hubbard	7
2.2 As fases do estado fundamental do modelo de Bose-Hubbard	8
3 O algoritmo Worm	15
3.1 O algoritmo Worm para o modelo de Bose-Hubbard	15
3.1.1 Procedimentos de atualização	22
3.1.2 Diagrama de fluxos	30
3.1.3 Cálculo dos observáveis	32
3.2 Delimitando a fronteira do lobo de Mott utilizando funções de Green .	34
3.3 Análise de escalonamento de tamanho finito	38
3.4 O modelo de correntes- J	40
4 Átomos bosônicos ultrafrios em uma rede hexagonal	43
4.1 O modelo de Bose-Hubbard em redes hexagonais	43
4.2 Resultados – A transição superfluido–isolante de Mott em redes hexagonais	48
4.2.1 Obtenção do diagrama de fases utilizando a função de Green . .	48
4.2.2 Comparação com outros diagramas de fases	53
5 Sistemas bosônicos desordenados	57
5.1 O modelo de Bose-Hubbard desordenado	57
5.2 A controvérsia na classe de universalidade superfluido–vidro de Bose . .	63
5.3 Resultados – A classe de universalidade superfluido–vidro de Bose em 3D	65
5.3.1 Revisitando resultados anteriores	67
5.3.2 Estimativa da intensidade de desordem crítica e do expoente crítico do comprimento de correlação	69
5.3.3 Estimativa do expoente crítico da temperatura crítica	71

<i>SUMÁRIO</i>	2
5.3.4 Exponente crítico do parâmetro de ordem	73
6 Conclusão	75

Capítulo 1

Introdução

O fenômeno conhecido como condensação de Bose-Einstein, se manifesta ao se resfriar um gás de bósons até uma certa temperatura crítica em que há uma ocupação macroscópica de um mesmo estado quântico [1, 2]. Foi concebido teoricamente em meados da década de 20 e sua primeira realização experimental em gases atômicos diluídos aconteceu apenas em 1995 [3–5], onde pôde-se constatar a transição de fases pelo pico na distribuição de velocidades em armadilhas atômicas, uma assinatura do fenômeno.¹ Desde então, o novo campo de pesquisa que se desenvolveu tornou-se mais abrangente, hoje denominado átomos frios, englobando não apenas o estudo de átomos bosônicos, mas também de átomos fermiônicos. Gases quânticos ultrafrios são sistemas versáteis e robustos que podem ser utilizados para investigar problemas fundamentais da física da matéria condensada, assim como da física atômica e molecular, e também visando aplicações em ótica quântica e em processamento de informações quânticas [7].

Um dos ramos de pesquisa desta área que vem se desenvolvendo nos últimos anos é o estudo de gases ultrafrios aprisionados em redes óticas. Podemos construir uma rede ótica cúbica, por exemplo, com a sobreposição de ondas estacionárias, resultantes da interferência de feixes de lasers contrapropagantes, perpendiculares entre si. A interação resultante entre o campo elétrico do laser com o momento de dipolo induzido pela luz no átomo é responsável pelo confinamento dos átomos na rede. Variando a frequência do laser, podemos atrair ou repelir os átomos das regiões de intensidade máxima do laser. Além disso, mudando a intensidade do laser, variamos a profundidade do potencial ótico confinante [8]. Por realizar modelos do estado sólido e pelo alto grau de controle que os experimentos alcançaram, esses sistemas são de grande interesse para a comunidade científica.

Nosso objeto de estudo será gases ultrafrios de átomos bosônicos diluídos e aprisionados em redes óticas. A temperatura típica desses sistemas é em torno da temperatura de condensação ($T \sim 10^{-7}$ K) e a densidade máxima é em torno de $\sim 10^{15}$ cm⁻³, o que em relação a densidade de outros sistemas é bastante diluído: a densidade de moléculas no ar à temperatura ambiente, por exemplo, é tipicamente 10^{19} cm⁻³, já

¹Embora a primeira manifestação de condensação de Bose-Einstein verificada experimentalmente foi em ⁴He [6].

líquidos e sólidos têm uma densidade de átomos em torno de 10^{22} cm^{-3} [9].

Esse sistema realiza o modelo de Bose-Hubbard (BH) [10, 11], com o qual podemos estudar a transição de fases quântica, conhecida como transição de superfluido-isolante de Mott (SF-MI²). Experimentalmente, podemos induzir essa transição no sistema variando a intensidade dos lasers que formam a rede ótica. Sua confirmação experimental foi feita em 2002, sendo inferida a transição pela forma como ocorre a expansão do sistema após o desligamento das armadilhas [12, 13].

Diferentes aspectos de sistemas envolvendo gases bosônicos ultrafrios aprisionados em redes óticas vem sendo explorados, seja com a esperança de obter avanços na área de informação quântica ou melhorar o entendimento de alguma de suas características. A maioria dos trabalhos com esses gases estudam sistemas considerando redes óticas cúbicas, como as referências [12, 14–19]. No entanto, há um crescente interesse em estudar sistemas com redes com outras simetrias motivado pela experiência em sistemas de estado sólido, em que propriedades estáticas, de transporte e magnéticas são influenciadas dramaticamente pela simetria.

Experimentos recentes realizaram redes óticas triangulares e hexagonais, nas quais observam a transição SF-MI [20]. Muitos trabalhos são dedicados ao estudo de sistemas com rede triangular, por exemplo [21–24], porém há um número menor de artigos que estudam sistemas com rede hexagonal [25–28]. No contexto da matéria condensada, estruturas hexagonais têm um papel extremamente importante como observado em nanotubos de carbono e grafeno. Também é interessante estudar a influência da dimensionalidade no diagrama de fases do sistema. Em redes unidimensionais, cada átomo tem dois vizinhos, enquanto que em redes bidimensionais quadradas, cada átomo tem quatro vizinhos. No caso de redes hexagonais, cada átomo tem apenas três vizinhos, o que sugere uma dimensão intermediária.

Por possuírem muitos graus de liberdade, dificilmente resolvemos sistemas de muitos corpos exatamente e técnicas computacionais são necessárias para obtenção de resultados mais realísticos. Algoritmos de Monte Carlo são ferramentas numéricas bastante poderosas nesse caso e são amplamente utilizados. Utilizamos para obtenção dos nossos resultados o algoritmo Worm [29, 30], que faz parte de uma classe de Monte Carlo Quântico (QMC) conhecida como Monte Carlo de Integral de Caminho (PIMC).

Apresentamos resultados para o modelo de Bose-Hubbard usual (i.e., com bósons sem spin, sem considerar interações de longo alcance, nem a influência da armadilha harmônica externa, utilizada nos experimentos para evitar a depleção do condensado), mas considerando o gás aprisionado em uma rede ótica hexagonal. Utilizamos o algoritmo Worm para construir o diagrama de fases da transição SF-MI nesse sistema e fazemos uma estimativa do ponto crítico da transição. Comparamos o diagrama de fases final com um diagrama de fases obtido a partir de uma aproximação de campo médio baseada nas referências [15, 17], e também com um diagrama de fases do modelo de Bose-Hubbard com uma rede quadrada [14]. Nos restringimos a análise do lobo de Mott com fator de preenchimento um.

²Algumas siglas seguem o padrão em inglês. Veja na página ix a lista de abreviações.

Na natureza, todo sistema está sujeito a algum grau de desordem. A desordem em sólidos pode se apresentar na forma de vacâncias, impurezas atômicas ou deslocamentos. Esta pode ou não influenciar uma transição de fases e, quando influencia, pode mudar o comportamento da transição ou ainda as fases presentes no estado fundamental do sistema, destruindo uma fase ou induzindo o surgimento de uma nova fase.

O trabalho de Anderson de 1958 [31] foi o primeiro relato de localização quântica. Ele estudou a condutividade de metais com um modelo de *tight-binding* [32] para elétrons livres, em que o potencial iônico é aproximado por um potencial periódico e a mobilidade dos elétrons fica restrita a tunelamentos entre primeiros vizinhos. No caso limpo (ou sem desordem), a solução deste modelo é uma função de onda eletrônica estendida por toda a rede. Ao introduzir desordem, através de deslocamentos aleatórios da energia dos sítios caracterizados por uma distribuição com largura Δ , a mobilidade dos elétrons diminui ohmicamente até que, como previsto por Anderson, para uma intensidade de desordem crítica Δ_c , a função de onda dos elétrons fica espacialmente localizada, decaindo exponencialmente [33]. Antes desse trabalho, havia apenas o entendimento de que a desordem impunha obstáculos a condutividade, diminuindo-a, no entanto ninguém havia previsto um cancelamento total e repentino da condutividade dessa forma. Desde a descoberta de Anderson, o campo de pesquisa em sistemas quânticos desordenados tem sido bastante ativo.

A grande vantagem de estudar desordem em átomos frios é o alto grau de controle experimental e a variedade de ferramentas que nos permitem acessar diferentes regimes nesses sistemas que, na maioria dos sistemas da matéria condensada, não são facilmente acessíveis. Por exemplo, como a interação e o grau de desordem são facilmente manipuláveis nesses sistemas, a relação entre desordem e interação pode ser investigada experimentalmente em diferentes regimes, inclusive no limite não interagente. A dimensionalidade também é facilmente manipulável, basta mudar o arranjo dos lasers que formam a armadilha ótica. Além disso, podemos escolher entre átomos fermiônicos ou bosônicos, o que torna esses sistemas ainda mais ricos, já que poucos são os sistemas da matéria condensada que permitem o estudo dos efeitos da estatística bosônica. Isso permitiu, por exemplo, a verificação direta da assinatura da localização de Anderson: a localização espacial exponencial da função de onda, como medido em [34], usando luz fluorescente para obter imagens da densidade atômica, ao contrário de sistemas da matéria condensada, em que a maioria das evidências da localização de Anderson são indiretas e baseadas em medidas de condutividade [33].

Estudamos na segunda parte deste trabalho condensados de Bose-Einstein aprisionados em redes óticas na presença de desordem. Uma terceira fase se estabelece no diagrama de fases desse sistema devido os efeitos de localização da desordem, a fase conhecida como vidro de Bose (BG) [11]. O modelo de Bose-Hubbard desordenado (DBH) com desordem no potencial químico [35], descreve bem esse sistema. O entendimento da transição de fases quântica superfluido-isolante que acontece em um sistema desordenado bosônico é relevante para uma variedade de sistemas como, ^4He em meio poroso, supercondutores em filmes finos e átomos frios em redes desordenadas [36–39].

Há muitos pontos ainda em discussão neste campo de pesquisa. Em dimensões $d > 1$, há uma controvérsia envolvendo a teoria de escala estabelecida em [11], em particular as leis de escala $\phi = \nu z$ e $z = d$, onde z e ν são os expoentes críticos dinâmico e do comprimento de correlação, respectivamente, e ϕ é o expoente da temperatura crítica da transição superfluido-líquido normal, foram questionadas nas referências [39–41]. Nesta tese abordamos essa última questão com um estudo numérico da classe de universalidade da transição superfluido-vidro de Bose (SF-BG) para o caso $d = 3$. Especificamente, estudos experimental e numérico recentes [39, 40] sobre a dependência da temperatura de transição superfluido-líquido normal com o potencial químico (ou campo magnético, em sistemas com spin, como os estudados por essas referências), $T_c \propto (\mu - \mu_c)^\phi$, em sistemas tridimensionais reportam uma forte violação da lei de escala $\phi = \nu z$. Abordamos essa controvérsia numericamente também fazendo o uso do algoritmo Worm, nas suas versões quântica e clássica (que simulam o modelo DBH e de correntes- J desordenado, respectivamente), esses resultados foram publicados em [42].

Essa tese está organizada da forma como segue. No capítulo 2, começamos pela revisão dos aspectos gerais do modelo de Bose-Hubbard e da transição de fases superfluido-isolante de Mott. Seguimos no capítulo 3, revisando o algoritmo Worm aplicado ao modelo de Bose-Hubbard, em que detalhamos os procedimentos de atualização e especificidades. Apresentamos os métodos utilizados para levantar o diagrama de fases do sistema puro (i.e., sem desordem) com rede hexagonal e estudar a classe de universalidade SF-BG no sistema desordenado. Também apresentamos o algoritmo Worm para o modelo de correntes- J , utilizado na estimativa de alguns expoentes críticos no segundo trabalho. No capítulo 4, mostramos os resultados obtidos com a simulação do algoritmo Worm no caso puro com uma rede hexagonal. Comparamos o diagrama de fases final com outros diagramas e com a literatura. Passamos para os resultados com desordem no capítulo 5, em que revisitamos os resultados dos estudos que geraram a controvérsia e propomos uma mudança de abordagem. Em seguida, estimamos os expoentes críticos com essa nova abordagem [42]. Por fim, no capítulo 6, listamos nossos resultados e perspectivas de continuação.

Capítulo 2

Gases bosônicos ultrafrios em redes óticas

Neste capítulo, revisamos o modelo de Bose-Hubbard (BH) que descreve gases bosônicos ultrafrios aprisionados em uma rede ótica e a transição de fases prevista pelo modelo conhecida como transição superfluido-isolante de Mott (SF-MI).

2.1 O modelo de Bose-Hubbard

Um bom modelo para descrever gases bosônicos ultrafrios aprisionados em redes óticas é o chamado modelo de Bose-Hubbard (BH) [11] que, apesar de simples, consegue captar as características essenciais desse sistema. As principais aproximações feitas pelo modelo são: (i) pelo gás ser diluído e a interação entre átomos neutros ser de curto alcance, supõe uma interação de contato, ou seja, considera apenas interações de dois corpos e a aproxima por um potencial efetivo

$$V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a_S}{m} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.1)$$

em que m é a massa de um átomo e a_S é o comprimento de espalhamento da onda-s, que é positivo (negativo) para uma interação repulsiva (atrativa); (ii) pelas partículas tenderem a estar localizadas nos sítios, considera que apenas partículas num mesmo sítio interagem e o tunelamento de partículas entre sítios é apenas entre primeiros vizinhos; (iii) pelas energias envolvidas na dinâmica do sistema serem baixas comparadas com a energia de excitação da segunda banda, considera apenas a ocupação da primeira banda de energia [10].

A hamiltoniana do modelo de Bose-Hubbard no formalismo da segunda quantização é

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (2.2)$$

sendo $b_i^\dagger$ e b_i os operadores de criação e aniquilação num sítio i da rede, $\hat{n}_i = b_i^\dagger b_i$ o operador número e o símbolo $\langle i, j \rangle$ indica que a soma é apenas entre sítios vizinhos. A intensidade do termo de tunelamento da hamiltoniana é caracterizada pelo elemento de matriz de tunelamento entre sítios vizinhos i, j dado por

$$t_{ij} = - \int d^3r w^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.3)$$

em que V_{ext} é o potencial de aprisionamento, no caso a rede ótica, e $w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ são funções de Wannier [32] centralizadas no sítio i . Consideramos que o tunelamento é o mesmo em todas as direções, por isso omitimos o subscrito (ij) em (2.2). Já a intensidade da repulsão entre partículas num mesmo sítio é quantificada pelo elemento de matriz de interação de um único sítio

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a_S}{m} \int d^3r |w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^4. \quad (2.4)$$

O potencial químico μ foi introduzido como um multiplicador de Lagrange que mantém o número médio de partículas no sistema fixo, para o caso de trabalhar com o *ensemble* Grande Canônico. Note que, por simplicidade, não consideramos os efeitos da armadilha harmônica confinante utilizada experimentalmente para evitar a perda de átomos do gás que, no entanto, deforma a rede ótica. Para mais detalhes deste modelo, veja a referência [43].

Um triunfo do modelo é a previsão de uma transição de fases no sistema conhecida como superfluido-isolante de Mott (SF-MI). Essa transição é uma transição de fases quântica, pois o mecanismo que leva o sistema de uma fase a outra não é térmico como nas transições de fases clássicas, mas são as flutuações quânticas do sistema que induzem a mudança de fase, ou seja, a transição ocorre mesmo à $T = 0$ [12].

2.2 As fases do estado fundamental do modelo de Bose-Hubbard

A competição entre os parâmetros U e t da hamiltoniana de Bose-Hubbard (2.2) leva à transição de fases conhecida como superfluido-isolante de Mott (SF-MI) [11, 18]. No caso em que $t \gg U$, as partículas tunelam facilmente de um sítio a outro, portanto o estado fundamental do sistema é caracterizado pela deslocalização das partículas na rede. Esta fase é denominada de superfluido (SF). No limite oposto, em que $U \ll t$, o preço energético para mover uma partícula de um sítio a outro é alto e o sistema encontra-se na fase isolante de Mott (MI). Experimentalmente, variando a intensidade dos lasers que formam a rede ótica, variamos a profundidade dos sítios da rede e assim, mudamos a razão entre U e t e, portanto, podemos induzir a transição de fases SF-MI no sistema [10]. A confirmação experimental de tal transição foi feita em 2002, sendo essa inferida pela mudança no padrão de interferência após a expansão livre dos átomos ao se desligar a armadilha [12, 13].

Essas duas fases estão ilustradas na figura 2.1. À esquerda da figura 2.1(a), temos a representação da fase superfluida, com os átomos deslocalizados na rede, e à esquerda da figura 2.1(b), temos a fase Mott, com um número inteiro de partículas localizadas em cada sítio. Se desligarmos a rede ótica do sistema e deixarmos o gás expandir livremente, o padrão de interferência resultante dependerá de qual fase o sistema se encontra. Isto pode ser visto na figura 2.1, onde à direita da representação de cada uma das fases há sua respectiva imagem de interferência. Observe que na fase superfluida temos picos de interferência bem definidos, enquanto que na fase isolante de Mott não há nenhum padrão de interferência. Os picos são devido a periodicidade da rede e exigem uma fase macroscópica constante ao longo dos sítios da rede, o que indica que na fase SF há uma coerência através da rede que desaparece na fase MI [12].

Figura 2.1: Uma ilustração das fases superfluida (SF) em (a) e isolante de Mott (MI) em (b). Na fase SF o termo de tunelamento é dominante favorecendo um estado deslocalizado. Já na fase MI, o termo de interação é dominante desfavorecendo a movimentação de partículas e, portanto, temos um estado localizado. À direita, temos as imagens de interferência das respectivas fases. (Figura retirada da referência [7].)

É instrutivo estudar os casos limites da hamiltoniana (2.2) em que $U = 0$ e $t = 0$, pois nestes casos o estado fundamental do sistema tem solução analítica e também por serem casos bastante ilustrativos nos quais as características de cada fase podem ser melhor entendidas.

Começando com o caso em que $U = 0$, temos que as partículas tunelam entre os sítios sem penalidade energética, portanto tenderão a estar deslocalizadas, e o estado fundamental do sistema é a fase superfluida. A hamiltoniana do sistema neste limite pode ser diagonalizada no espaço de momentos k , sendo assim, podemos escrever seu autoestado como $\prod_{i=1}^N b_{k_i}^\dagger |0\rangle$, com N o número de átomos na rede. Já que não há interação entre os átomos, esperamos que todos os N átomos do sistema estejam no estado de menor energia ($k_i = 0$), de modo que o estado fundamental do sistema

será [12]

$$|\Psi_{SF}\rangle^{U=0} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{i=1}^{N_s} b_i^\dagger \right)^N |0\rangle, \quad (2.5)$$

com N_s o número de sítios da rede, que é um condensado de Bose-Einstein puro. Podemos visualizar como os átomos se distribuem na rede analisando este estado fundamental. De fato, fatorando o termo elevado a potência N do lado direito da equação, vemos que, em cada termo, um átomo terá uma probabilidade independente dos outros átomos da rede de estar em um sítio. Sendo assim, podemos escrever a probabilidade de n átomos estarem em um dos N_s sítios da rede como [8, 44]

$$P = \binom{N}{n} \left(\frac{1}{N_s} \right)^n \left(1 - \frac{1}{N_s} \right)^{N-n}, \quad (2.6)$$

que é uma distribuição binomial com probabilidade $1/N_s$ e número de tentativas N . No limite em que N e N_s são grandes, o número de átomos em cada sítio da rede é uma distribuição de Poisson. Em outras palavras, o número de átomos em cada sítio flutua, no entanto a fase da onda de matéria coerente é bem definida em cada sítio.

Se considerarmos agora o caso em que $t = 0$, os átomos ficarão localizados nos sítios, portanto o sistema estará na fase Mott. Neste regime o preço energético para se ter dois átomos no mesmo sítio é alto e o sistema tende a evitar essa situação. Sendo assim, considerando uma rede com N_s sítios, ao adicionarmos duas partículas nesta rede, o estado de menor energia será qualquer configuração em que as partículas estão em sítios diferentes. Adicionando sucessivamente uma partícula por vez nesse sistema de modo a mantê-lo no estado de mínima energia, devemos ir preenchendo um sítio de cada vez. Ao chegar a N_s partículas na rede, o estado fundamental do sistema será uma rede em que cada sítio tem uma partícula. Dizemos que essa rede tem um fator de preenchimento ρ igual a um, que é definido como

$$\rho = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{N_s} = \frac{1}{N_s} \left\langle \sum_{i=1}^{N_s} \hat{n}_i \right\rangle. \quad (2.7)$$

O autoestado da hamiltoniana neste caso é igual a um produto de estados de Fock locais para cada sítio da rede. Em particular, considerando uma rede com N_s sítios e fator de preenchimento ρ , o estado fundamental será

$$|\Psi_{MI}\rangle^{t=0} = \prod_{i=1}^{N_s} \frac{(b_i^\dagger)^\rho}{\sqrt{\rho!}} |0\rangle. \quad (2.8)$$

Note que para colocar uma partícula em um sítio do sistema o ganho de energia é $\bar{\Delta}^{(p)}|_{t=0} = U n_i - \mu$ e para se retirar é $\bar{\Delta}^{(b)}|_{t=0} = -[U(n_i - 1) - \mu]$, sendo assim temos um *gap* de energia no espectro da fase Mott. Portanto, ao variar o potencial químico

entre os valores $U(n_i - 1)$ e Un_i , a densidade por sítio não muda, o que pode ser escrito como $\kappa = \partial\rho/\partial\mu = 0$. Esta propriedade é conhecida como incompressibilidade e, na verdade, é esta a propriedade que define a fase MI e não a existência de estados de Fock locais, já que esses existem apenas em $t = 0$ [8]. Como a fase superfluida não possui um *gap* de energia no espectro de excitação, a fase é compressível, i.e. $\kappa \neq 0$. Note que uma partícula (ou um buraco) excedente na fase Mott, estará livre para tunelar pela rede sem penalidade energética, já que a energia de interação intrassítio será a mesma para qualquer sítio, e, portanto esse sistema estará na fase superfluida.

O diagrama de fases da transição superfluido-isolante de Mott corresponde ao plano $(t/U, \mu/U)$ em que a fronteira entre as fases SF e MI é desenhada (veja a figura 2.2). Podemos fazer uma descrição qualitativa desse diagrama a partir das conclusões acima, argumentando o que podemos esperar para regiões intermediárias.

Na análise do caso $t = 0$ feita acima, identificamos que no eixo das ordenadas do diagrama a fase Mott está localizada nos intervalos

$$(n - 1) < \mu/U < n, \quad (2.9)$$

sendo $n = 1, 2, 3, \dots$. Ainda neste eixo, mas nos pontos em que μ/U é inteiro, como as energias dos estados com n_i e $n_i + 1$ partículas em um sítio são degeneradas, não há preço energético para a introdução (ou remoção) de uma partícula no sítio, além disso, qualquer valor positivo de t leva a deslocalização das partículas. Por isso, identificamos esses pontos como estando na fase superfluida.

Mantendo μ/U fixo num valor intermediário do intervalo (2.9) e aumentando lentamente o parâmetro de tunelamento t , temos que inicialmente a energia cinética ganha por adicionar uma partícula (ou um buraco) e deixá-la tunelar pela rede livremente não vai compensar a energia potencial necessária para a adição dessa partícula (ou desse buraco). No entanto, a partir de um certo valor de t/U , o balanço de energia favorecerá a adição de partículas (ou buracos) e passamos para a fase superfluida. Do mesmo modo, se fixarmos t/U e aumentarmos o potencial químico lentamente (a partir de um ponto dentro da fase Mott), o custo $\bar{\Delta}^{(p)}$ da adição de uma partícula diminui, até que teremos um ponto em que a energia cinética ganha compensará este custo, delimitando a transição SF-MI. No caso de diminuirmos μ/U , também teremos um ponto em que é energeticamente favorável remover uma partícula da rede e este buraco estará livre para tunelar pela rede. Quanto maior t/U , menor é o valor de μ/U que levará a adição de uma partícula ser favorável energeticamente e menor será a largura em μ/U em que o isolante de Mott se estabelece. Esta largura é o *gap* de energia do isolante, que diminui à medida que o termo de tunelamento aumenta até desaparecer na transição para a fase SF pelo ponto mais extremo do lobo de Mott.

Assim, concluímos que as regiões em que ocorre a fase Mott têm um formato alongado como na figura 2.2. Essas regiões são conhecidas como *lobos de Mott*, sendo que a densidade por sítio inteira ρ de cada lobo aumenta com μ , como indicado na figura. Contornando os lobos de Mott, temos linhas de densidade constante semi-inteira, indicadas na figura como linhas pontilhadas. Como já argumentamos, essas linhas devem

estar localizadas na fase superfluida já que, neste caso, sempre teremos partículas extras que podem tunelar pela rede sem custo energético.

Figura 2.2: Diagrama de fases à $T = 0$ do modelo de Bose-Hubbard feito a partir de uma aproximação de campo médio. Duas fases se estabelecem nesse diagrama: a fase isolante de Mott (MI) e a fase superfluida (SF). A primeira é caracterizada pela localização das partículas na rede e pela presença de um *gap* de energia. Esta fase se estabelece em regiões de densidade por sítio ρ inteira chamadas de *lobos de Mott*. Já a fase SF, é caracterizada pela deslocalização das partículas na rede. Algumas linhas de densidade constante semi-inteira estão desenhadas em linha pontilhada (em vermelho). Três caminhos (flechas (a)-(c)) que podem ser feitos para induzir a transição SF-MI estão destacados. Uma transição de fases genérica acontece se atravessarmos os caminhos (a) e (b), essa transição é descrita pela física de um gás de Bose fracamente interagente. Já se atravessarmos o caminho (c), a transição pertence a classe de universalidade do modelo XY com dimensão $(d+1)$. (O algoritmo utilizado e a aproximação feita para obter essa figura estão descritos na referência [43].)

O *gap* de energia em qualquer ponto do diagrama dentro do lobo de Mott, que é dado pela menor excitação que conserva o número de partículas do sistema, pode ser mensurado como

$$\bar{\Delta}|_{t/U} = \mu_+ - \mu_-, \quad (2.10)$$

com μ_+ e μ_- sendo o valor do potencial químico na fronteira superior e inferior da transição SF-MI, respectivamente, para um mesmo valor de t/U (indicado na fórmula pela barra vertical com t subscrito). Já no caso do número de partículas flutuar (no caso de trabalharmos no *ensemble* Grande Canônico), as energias para excitar uma partícula (p) ou buraco (b) são

$$\begin{aligned}\bar{\Delta}^{(p)}|_{t/U} &= \mu_+ - \mu, \\ \bar{\Delta}^{(b)}|_{t/U} &= \mu_- - \mu.\end{aligned}\tag{2.11}$$

Para diferenciar as fases na construção de um diagrama, à medida que mudamos um parâmetro externo que induz a transição, examinamos um parâmetro de ordem da transição, que é igual a zero numa fase e tem um valor diferente de zero para a outra fase. O fator de preenchimento, a compressibilidade, o valor esperado do operador aniquilação $\langle b_i \rangle$ e a densidade de superfluido podem ser examinados para diferenciar as fases do sistema. Além disso, através da função de Green podemos determinar o *gap* da fase Mott e utilizar esta informação para construir o diagrama de fases.

A transição superfluido-isolante de Mott é uma transição de fases quântica contínua e seu comportamento crítico foi caracterizado no artigo seminal de Fisher *et al.* [11]. Dois tipos de transições de fases SF-MI podem ser induzidas nesses sistemas: a genérica e a que acontece à densidade constante, que é um ponto multicrítico [11]. A transição de fases genérica é induzida pela adição/remoção de um pequeno número de partículas, onde a densidade por sítio muda continuamente de um valor inteiro para um semi-inteiro. Pode ser induzida por dois caminhos diferentes: pela variação de μ , com t fixo, ou pela variação de t , com μ fixo (caminhos (a) e (b), respectivamente, na figura 2.2). Esta transição pode ser completamente caracterizada pela física de um gás de Bose fracamente interagente. Já na transição que ocorre no ponto multicrítico (caminho (c) na figura 2.2), o *gap* do isolante desaparece a medida que variamos t , com μ fixo e densidade constante. Esta transição tem um comportamento crítico diferente da transição genérica, fazendo parte da classe de universalidade do modelo XY com $(d+1)$ dimensões.¹ As dimensões críticas superior e inferior da transição de fases genérica são, respectivamente, $d_c^+ = 2$ e $d_c^- = 1$. Portanto, os expoentes críticos a partir de $d = 2$ são os mesmos da teoria de campo médio [11]. Já no caso da transição que ocorre à densidade constante, as dimensões críticas superior e inferior são, respectivamente, $d_c^+ = 3$ e $d_c^- = 1$. Então, para caracterizar o comportamento crítico dessa transição em $d = 2$ usamos os expoentes críticos da classe de universalidade do modelo XY em 3D [46] e a partir de $d = 3$ são os mesmos da teoria de campo médio.

Nesta tese, estudamos a transição de fases superfluido-isolante de Mott quando a rede ótica do sistema tem simetria hexagonal. Esta mudança não muda o

¹A hamiltoniana de Bose-Hubbard a densidade constante pode ser mapeada, usando integrais de caminho, na hamiltoniana do modelo XY com uma dimensão a mais [45].

comportamento crítico da transição, já que não introduz frustração² e detalhes microscópicos como a simetria da rede não devem afetar o comportamento crítico da transição, mas muda a fronteira entre as fases da transição SF-MI. Além disso, estudamos os efeitos da presença de desordem no sistema. Consideramos que a rede ótica está sujeita a um potencial desordenado ϵ_i , definido em cada sítio i da rede, uniformemente distribuído em um intervalo $[-\Delta, \Delta]$, que é não correlacionado espacialmente e afetando apenas o potencial químico. Isso introduz uma desordem estática na rede em que o grau de desordem no sistema é determinado pelo valor deste limite Δ , denominado de intensidade de desordem. Este problema também foi estudado no artigo de Fisher *et al.* [11], onde previram o surgimento de uma terceira fase, a fase conhecida como vidro de Bose (BG), que se estabelece entre as fases superfluido e isolante de Mott no diagrama de fases, e desenvolveram a teoria de escala da transição superfluido-vidro de Bose. Estudamos essa transição no caso de uma rede ótica tridimensional. Ambos os sistemas são descritos por uma hamiltoniana de Bose-Hubbard com algumas modificações, mas discutiremos as especificidades de cada sistema mais adiante.

²Frustração aparece quando todas as restrições impostas pela hamiltoniana não podem ser simultaneamente cumpridas e é uma propriedade inerente de alguns sistemas fortemente correlacionados [35]. Um exemplo é um sistema de spins com acoplamento antiferromagnético do tipo Ising em uma rede triangular. Um dos spins da célula unitária da rede ficará frustrado, pois sempre estará antiparalelo a um de seus vizinhos, mas paralelo ao outro.

Capítulo 3

O algoritmo Worm

Iniciamos o capítulo com uma revisão do algoritmo Worm aplicado ao modelo de Bose-Hubbard.¹ Em seguida, introduzimos as técnicas que foram utilizadas para a obtenção dos resultados desta tese, primeiramente descrevemos como podemos obter o *gap* de energia de um isolante de Mott a partir da função de Green estimada com o algoritmo e depois descrevemos como fazemos uma análise de escalonamento de tamanho finito (FSS), um procedimento utilizado para obtenção do comportamento crítico do sistema nas proximidades de uma transição. Por fim, apresentamos o algoritmo Worm aplicado ao modelo de correntes- J , que também foi utilizado no estudo da classe de universalidade SF-BG no capítulo final.

3.1 O algoritmo Worm para o modelo de Bose-Hubbard

O algoritmo Worm faz parte de uma classe de algoritmos de Monte Carlo Quântico (QMC), conhecida por Monte Carlo de integral de caminho (PIMC), que se utiliza da expansão por integrais de caminho para fazer uma amostragem estocástica da ação de um sistema de muitos corpos. Esse algoritmo foi originalmente desenvolvido para modelos quânticos estatísticos por N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov e I. S. Tupitsyn [29, 30, 47] e mais tarde adaptado para modelos clássicos [48]. Em suma, é feito um mapeamento de um problema quântico d -dimensional em um problema clássico com $(d+1)$ -dimensões fazendo uso de integrais de caminho, então técnicas padrões de Monte Carlo são implementadas para amostrar o espaço de configurações do sistema.

As propriedades de um sistema termodinâmico em equilíbrio a uma temperatura T são determinadas pela função de partição $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$, em que $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann. Para fazer uma expansão em integrais de caminho em um sistema dependente da temperatura é mais conveniente utilizar o formalismo do *tempo imaginário* em que escrevemos $t = -i\tau$, sendo τ uma variável auxiliar real com

¹Uma apresentação complementar desse algoritmo pode ser encontrada em [43].

dimensão de tempo. Escrevendo a hamiltoniana do sistema na forma $H = H_0 + H_1$, onde H_0 é diagonal numa base de autoestados $|\alpha\rangle$ com autovalores E_α e H_1 é não diagonal nesta base, e utilizando a *descrição da interação* [49], podemos escrever o operador de densidade $\hat{\rho} = e^{-\beta H}/Z$ no formalismo do tempo imaginário naturalmente em função do operador de evolução temporal $U(\beta, 0)$ na descrição da interação², pois

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} e^{\beta H_0} e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} U(\beta, 0) = e^{-\beta H_0} \mathcal{T}_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau' H_1(\tau')}. \quad (3.1)$$

Na última igualdade, $U(\beta, 0)$ foi escrito na sua forma mais usual, em que representa a expansão

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau H_1(\tau)} &= 1 - \int_0^\beta d\tau_1 H_1(\tau_1) + \int_0^\beta d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 H_1(\tau_2) H_1(\tau_1) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 H_1(\tau_n) H_1(\tau_{n-1}) \dots H_1(\tau_1), \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $H_1(\tau) = e^{\tau H_0} H_1 e^{-\tau H_0}$ é a parte não-diagonal da hamiltoniana na descrição da interação, $\mathcal{T}_\tau$ é o *operador de ordenação temporal*, cuja função é ordenar temporalmente todos os $H_1(\tau)$, de maneira que estes operadores sejam escritos na ordem crescente de seus argumentos, da direita para a esquerda, por exemplo,

$$\mathcal{T}_\tau [\hat{O}(\tau_1) \hat{O}'(\tau_2)] = \begin{cases} \hat{O}(\tau_1) \hat{O}'(\tau_2), & \text{se } \tau_1 > \tau_2 \\ \hat{O}'(\tau_2) \hat{O}(\tau_1), & \text{se } \tau_2 > \tau_1. \end{cases} \quad (3.3)$$

Note que na equação (3.2) existe uma ordenação temporal definida pelos limites de integração de maneira que $\tau_1 < \dots < \tau_n < \beta$.

Assim, podemos escrever a função de partição em termos de integrais de caminho utilizando a expansão (3.1)

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta H_0} \mathcal{T}_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau H_1(\tau)} | \alpha \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta H_0} H_1(\tau_n) H_1(\tau_{n-1}) \dots H_1(\tau_1) | \alpha \rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Fazendo uso da completeza da base $\{|\alpha\rangle\}$, inserimos $n - 1$ conjuntos completos $\mathbb{1} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|$ entre os produtos de $H_1(\tau)$, obtendo

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \times \\ &\quad \times \sum_{\alpha, \alpha_{n-1} \dots \alpha_1} e^{-\beta E_\alpha} H_1^{\alpha \alpha_{n-1}}(\tau_n) H_1^{\alpha_{n-1} \alpha_{n-2}}(\tau_{n-1}) \dots H_1^{\alpha_1 \alpha}(\tau_1), \end{aligned} \quad (3.5)$$

²Utilizamos unidades em que $\hbar = 1$.

com os elementos de matriz sendo

$$H_1^{\alpha'\alpha}(\tau) = e^{\tau E_{\alpha'}} H_1^{\alpha'\alpha} e^{-\tau E_{\alpha}} = \langle \alpha' | H_1 | \alpha \rangle e^{-\tau(E_{\alpha} - E_{\alpha'})}. \quad (3.6)$$

Note que, sendo a função de partição Z definida por um traço, temos a condição de que a sequência dos elemento de matriz da soma em (3.5) deve iniciar e terminar no mesmo estado $|\alpha\rangle$. Essa expressão para a função de partição encontra-se na chamada representação de integrais de caminho [47]. Veja que não estamos mais trabalhando com operadores e passamos a um problema clássico com uma dimensão adicional, que é a direção do tempo imaginário, cujo tamanho é β .

Podemos construir diagramas que representam termos da expansão (3.5). Para exemplificar essa relação, reescrevemos (3.4) explicitando a dependência temporal e colocamos os estados que definem o traço no formalismo da segunda quantização, isto é, $|\alpha\rangle = |\{n_i\}\rangle \equiv |\{n_1, n_2, \dots\}\rangle$, em que n_i é o número de ocupação do estado i , como

$$\begin{aligned} Z = \sum_{\{n_i\}} \left\langle \{n_i\} \right| & \left[e^{-\beta H_0} - \int_0^{\beta} d\tau_1 e^{-(\beta-\tau_1)H_0} H_1 e^{-(\tau_1-0)H_0} + \right. \\ & \left. + \int_0^{\beta} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 e^{-(\beta-\tau_2)H_0} H_1 e^{-(\tau_2-\tau_1)H_0} H_1 e^{-(\tau_1-0)H_0} + \dots + \right. \\ & \left. + (-1)^n \int_0^{\beta} d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \times \right. \\ & \left. \times e^{-(\beta-\tau_n)H_0} H_1 e^{-(\tau_n-\tau_{n-1})H_0} H_1 e^{-(\tau_{n-1}-\tau_{n-2})H_0} \dots e^{-(\tau_2-\tau_1)H_0} H_1 e^{-(\tau_1-0)H_0} + \dots \right] \left| \{n_i\} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Nessa equação, o estado inicial $|\{n_i\}\rangle$ passa por sucessivos operadores de evolução temporal no tempo imaginário $e^{-\tau H_0}$, em que os números de ocupação se modificam pela ação de H_1 . Assim, no primeiro termo, o estado inicial permanece o mesmo no intervalo de 0 a β , o segundo termo é zero, pois H_1 é não-diagonal na base $\{|\alpha\rangle\}$,

já o terceiro termo, evolui o estado do sistema ao longo de três intervalos de tempo diferentes: 0 a τ_1 , τ_1 a τ_2 e τ_2 a β , modificando os números de ocupação de $|\{n_i\}\rangle_{\tau=0}$ para $H_1|\{n_i\}\rangle_{\tau=\tau_1} = |\{n_i\}'\rangle_{\tau=\tau_1}$ e, por fim, para $H_1|\{n_i\}'\rangle_{\tau=\tau_2} = |\{n_i\}''\rangle_{\tau=\tau_2}$ e permanecendo ali até que $\tau = \beta$. Este último termo será não-nulo apenas se retornar a configuração inicial, isto é, se $|\{n_i\}''\rangle = |\{n_i\}\rangle$. No termo de ordem n , teremos n modificações do estado do sistema e, da mesma forma, este termo contribuirá para a expansão apenas se, na ação do n -ésimo operador H_1 , retornar ao estado inicial.

Assim, cada sequência

$$\alpha(\tau) \equiv \alpha_0 = \{n_i\}_0, \alpha_1 = \{n_i\}_1, \alpha_2 = \{n_i\}_2, \dots, \alpha_{n-1} = \{n_i\}_{n-1}, \alpha_n = \{n_i\}_n \quad (3.8)$$

é uma trajetória no espaço- α . Tendo em vista que a evolução temporal nos leva de volta ao estado inicial, i.e., $\alpha_0 = \alpha_n$, cada termo desta expansão será um caminho fechado neste espaço e Z é a soma de todos os caminhos fechados possíveis. Podemos escrever isso como

$$Z_{BH} = \sum_{\nu} \mathcal{W}_{\nu}, \quad (3.9)$$

em que $\mathcal{W}_{\nu}$ é o peso estatístico de cada caminho fechado definido por uma configuração $\nu = \{n, \alpha(\tau)\}$. Nos referimos a esse espaço de configurações por espaço CF, que é representado por uma coleção de caminhos fechados (CF), onde é permitido interseções e sobreposições, a única restrição é que não haja caminhos abertos. Como veremos, podemos implementar técnicas padrões de Monte Carlo para amostrar os caminhos fechados possíveis e assim calcular a função de partição do sistema.

Antes de entrar em maiores detalhes a respeito do algoritmo, vamos especificar a hamiltoniana de interesse simulada com o algoritmo Worm e precisar o espaço de configurações do sistema. Considere novamente a hamiltoniana de Bose-Hubbard (2.2), que reescrevemos aqui por conveniência:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^{\dagger} b_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i,$$

e lembre-se de que estamos descrevendo um sistema de bósons sem spin em uma rede ótica, com uma interação intrassítio U e um tunelamento t apenas entre sítios primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$. Podemos separar essa hamiltoniana da seguinte forma

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \\ H_1 &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^{\dagger} b_j. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Neste caso, a base $\{|\alpha\rangle\}$ de autoestados do operador H_0 pode ser representada no espaço de Fock como $\{|\alpha\rangle\} = \{\prod_{i=1}^{N_s} |n_i\rangle\}$, com N_s o número de sítios da rede ótica

e n_i o número de átomos ocupando o sítio i . Assim, os autovalores da hamiltoniana diagonal são

$$E_\alpha = \frac{U}{2} \sum_i n_i^\alpha (n_i^\alpha - 1) - \mu \sum_i n_i^\alpha, \quad (3.11)$$

enquanto que os elementos de matriz não diagonais são

$$H_1^{\alpha'\alpha} = -t \langle n_i + 1, n_j - 1 | b_i^\dagger b_j | n_i, n_j \rangle = -t \sqrt{(n_i^\alpha + 1) n_j^\alpha}, \quad (3.12)$$

com i e j denotando sítios vizinhos e n_i^α o número de partículas no sítio i no estado inicial $|\alpha\rangle$. Incluindo esses valores em (3.5), obtemos a função de partição usada na simulação

$$Z_{BH} = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_n \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \sum_{\{\alpha\}} (t)^n h_n^{\alpha(\tau)} \exp \left\{ - \sum_{k=1}^n E_{\alpha_{k-1}} (\tau_k - \tau_{k-1}) \right\}, \quad (3.13)$$

em que

$$h_n^{\alpha(\tau)} = (-t)^{-n} \prod_{k=1}^n \langle \{n_i\}'_{\tau_k+0} | H_1 | \{n_i\}_{\tau_k-0} \rangle \quad (3.14)$$

é o produtório de fatores de raízes quadradas vindos dos elementos de matriz não diagonais (3.12), em que τ_{k-0} e τ_{k+0} denotam os instantes imediatamente antes e depois, respectivamente, da ação de H_1 e o índice $\alpha(\tau)$ indica que os números de ocupação mudam ao longo da trajetória no espaço de configurações. Também, para manter a escrita compacta, reescrevemos o produtório dos termos vindos dos autovalores diagonais (3.11), em que reordenamos o expoente como

$$\begin{aligned} -\beta E_{\alpha_0} - \sum_{m=1}^n \tau_{\alpha_m} (E_{\alpha_{m-1}} - E_{\alpha_m}) &= -E_{\alpha_0} \tau_1 + E_{\alpha_n} \tau_n - E_{\alpha_1} (\tau_2 - \tau_1) - \\ &- \dots - E_{\alpha_{n-1}} (\tau_n - \tau_{n-1}) = - \sum_{k=1}^n E_{\alpha_{k-1}} (\tau_k - \tau_{k-1}). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Acima, usamos que $\alpha_0 = \alpha_n$ e $\tau_0 = \tau_n$, devido às condições periódicas de contorno na direção temporal, e renomeamos os índices $m = k - 1$. Os pesos das trajetórias terão sinal positivo se t é positivo.

Um exemplo de configuração no espaço CF no contexto do modelo de Bose-Hubbard para uma rede 1D pode ser observando na figura 3.1. No esquema, o eixo das ordenadas é o tempo imaginário e o eixo das abscissas representa os sítios do sistema. O número de partículas em cada sítio é proporcional a largura de cada linha e o tempo obedece condições periódicas de contorno como consequência do traço em Z . Chamamos de

kinks os pontos no tempo em que o sistema muda de estado (por exemplo, o ponto τ_k destacado na figura). Tendo em mente a equação (3.13), associamos a cada *kink* à ação dos operadores H_1 e a cada intervalo contínuo do caminho à ação do operador de evolução temporal $e^{-\tau H_0}$. No sistema em questão, $H_1 \propto b_i^\dagger b_j$, portanto *kinks* são tune-lamentos entre sítios primeiros vizinhos. Cada trajetória de uma partícula propagando no tempo imaginário é usualmente conhecida como linha-mundo. Procedimentos de atualização neste espaço de configurações consistem em deslocar *kinks* e criar novos pares destes a partir de uma região sem *kinks*.

Figura 3.1: Espaço de configuração de caminhos fechados (ou espaço CF) no contexto do modelo de Bose-Hubbard para uma rede 1D. Cada caminho é conhecido pelo nome de linha-mundo. O eixo das ordenadas representa a evolução no tempo imaginário e o eixo das abscissas representa sítios com um número de ocupação proporcional a sua espessura. As linhas tracejadas têm ocupação zero, as sólidas que são mais finas, possuem ocupação um e as mais grossas, ocupação dois. Nesta imagem, t é o peso de um *kink*. (Figura da referência [50].)

A função de Green do sistema também tem uma representação por integrais de caminho. Em sistemas com temperatura finita, usamos a função de Green de Matsubara

$$G(j, \tau) = - \left\langle \mathcal{T}_\tau b_{i+j}(\tau_0 + \tau) b_i^\dagger(\tau_0) \right\rangle. \quad (3.16)$$

Em que o operador $b_i^\dagger(\tau_0)$ cria uma partícula no sítio i no tempo imaginário τ_0 , cujo elemento de matriz é $\sqrt{n_i(\tau_0) + 1}$, e $b_{i+j}(\tau_0 + \tau)$ aniquila uma partícula no sítio $i + j$ no tempo $\tau_0 + \tau$ com elemento de matriz $\sqrt{n_{i+j}(\tau_0 + \tau)}$. O símbolo $\langle . \rangle$ indica a média estatística do valor esperado de um operador. Note que estamos usando nessa definição a propriedade de invariância translacional do sistema. A diferença entre o espaço CF e o espaço de configurações de G , que denominamos de CF_G , é que, por conta dos operadores de criação e aniquilação, temos caminhos abertos, i.e., trajetórias em que $\alpha_0 \neq \alpha_n$.

O algoritmo Worm trabalha num espaço de configurações aumentado, onde acumulamos estatísticas com caminhos fechados (espaço CF) e abertos (espaço CF_G , ver um exemplo de uma configuração neste espaço na figura 3.2) [51]. Os mecanismos de atualização do algoritmo são locais e podem ser feitos a partir de uma configuração do espaço CF ou CF_G . Pictoricamente, podemos ver essas atualizações como sendo feitas por mecanismos de “desenha” e “apaga”, onde conseguimos construir diferentes configurações a partir dos extremos do caminho aberto. O movimento dos extremos desse caminho ao fazer as atualizações é o que motiva o nome Worm (que significa verme, em inglês) atribuído ao algoritmo, por isso denominamos esse caminho aberto de verme, sendo suas extremidades apelidadas de *ira* ($b_{i_I}(\tau_I)$, a cabeça do verme) e *masha* ($b_{i_M}^\dagger(\tau_M)$, a cauda).³

Figura 3.2: Espaço de configurações de caminhos abertos (ou espaço CF_G) no contexto do modelo de Bose-Hubbard para uma rede 1D. Neste exemplo, $\{n_i\}_{\tau=0} = 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1$. Os pontos indicados por I e M na figura são respectivamente, *ira* e *masha*, os extremos do verme. (Imagem extraída da referência [50].)

Devido a conservação do número de partículas, as trajetórias de muitos corpos podem ser decompostas no conjunto de trajetórias de partícula-única fechadas, ou linhas-mundo. Ou seja, podemos decompor a figura 3.1 em linhas-mundo e o número de linhas-mundo é igual ao número de partículas do sistema. Faz-se necessária a observação que uma restrição natural a um algoritmo que trabalhe apenas no espaço CF é que o número de partículas do sistema é fixo e, portanto, a hamiltoniana simulada não contém o termo $-\mu \sum_i \hat{n}_i$ presente em (3.10). No entanto, com o algoritmo Worm, como o verme é uma linha-mundo adicionada ao espaço CF que quando se fecha em si adiciona ou remove uma partícula do sistema, podemos trabalhar no *ensemble* Grande Canônico. Ademais, linhas-mundo podem se enrolar ao redor do círculo- β várias vezes

³São os nomes das irmãs de B. V. Svistunov [47] e variáveis iniciando com i e m correspondem implicitamente a inteiros em Fortran.

antes de fechar-se em si mesma ou, havendo condições periódicas de contorno no espaço, podem também se enrolar na direção espacial. O número inteiro de vezes que a linha-mundo se enrola na direção espacial define o que chamamos de *winding numbers* e são diretamente responsáveis por propriedades de superfluidez do sistema [52], como veremos na seção 3.1.3.

Sendo assim, a medida que os extremos do verme se movimentam no espaço CF_G , modificam a configuração do espaço e, a cada movimento, acumulam estatísticas para o histograma da função de Green $G(\tau_M - \tau_I, i_M - i_I)$, sendo (i_I, τ_I) e (i_M, τ_M) as posições espaço-temporal de *ira* e *masha*, respectivamente. As atualizações do espaço CF são feitas quando, de tempos em tempos, os dois extremos do verme se encontram, situação na qual recuperamos uma configuração de caminhos fechados e coletamos estatísticas para Z . O algoritmo Worm é um algoritmo com procedimentos locais de atualização que segue a prescrição de Metrópolis. Este algoritmo não sofre de *critical slowing down*⁴, não tem problema em produzir caminhos com *winding number* diferente de zero e permite a simulação eficiente de correlações não diagonais, do *ensemble* Grande Canônico ou de sistemas desordenados [51]. Seguimos detalhando os procedimentos de atualização do algoritmo que permitem transformações entre configurações arbitrárias.

3.1.1 Procedimentos de atualização

Como discutimos em (3.9), após o mapeamento em $(d + 1)$ dimensões, podemos interpretar cada termo da equação (3.5) (que para o modelo de BH é escrita como a equação (3.13)) como o peso estatístico $\mathcal{W}_\nu$ de cada configuração ν possível no espaço de fase do sistema. Sendo assim, as somas e integrais da equação (3.13) são vistas, a menos de um fator de normalização, como uma média estatística sobre diferentes configurações [29]. O processo de Monte Carlo deve examinar essas estatísticas gerando configurações de acordo com seus pesos. Cada configuração é definida por um determinado número de *kinks*, suas associações espaciais e posições específicas no tempo imaginário. O processo estocástico que calcula a equação (3.13) deve então ter um conjunto de procedimentos de atualização que modificam essas configurações, modificando o número de *kinks* e suas posições, de maneira a garantir a ergodicidade⁵, além de obedecerem a equação de balanço detalhado [53], o que, em outras palavras, significa que os processos de atualização “desenha” e “apaga” do algoritmo Worm são balanceados e complementares entre si. Descrevemos nesta seção esses mecanismos.

Para especificar uma configuração genérica, precisamos definir o conjunto de variáveis $\nu = (y, K, \xi_K, \{\tau_i\})$, sendo y os parâmetros da hamiltoniana, K o número de *kinks*

⁴Nas proximidades de uma transição de fases crítica, o sistema desenvolve correlações de longo alcance que divergem no ponto crítico, fazendo com que a simulação de Monte Carlo tenha uma amostragem ineficiente do espaço de fase do sistema [53]. Por ter procedimentos de atualização eficientes, o algoritmo Worm consegue gerar eficientemente configurações independentes.

⁵Exigência de que deve ser possível aos mecanismos estocásticos de geração de configurações do algoritmo alcançar todas as configurações possíveis do sistema, a partir de uma configuração inicial qualquer, após um tempo finito de simulação [47].

dessa configuração, com ξ_K especificando a localização espacial e a direção dos *kinks* e também guardando a informação dos números de ocupação inicial de todos os sítios e, por último, $\{\tau_i\}$ é o conjunto das posições temporais dos *kinks*.

A equação de balanço detalhado que garante que, após um número finito de atualizações, o algoritmo passe a gerar configurações com o peso estatístico definido pela equação (3.13) é dada por

$$\mathcal{W}_\nu p_a P_a^{act}(\nu \rightarrow \nu') = \mathcal{W}_{\nu'} p_{\bar{a}} P_{\bar{a}}^{act}(\nu' \rightarrow \nu), \quad (3.17)$$

em que $\mathcal{W}_\nu$ é o peso estatístico de uma determinada configuração ν , p_a é a probabilidade de selecionar a atualização a , $P_a^{act}(\nu \rightarrow \nu')$ é a probabilidade de aceitar a modificação sugerida por a , transformando ν em ν' e $\bar{a}$ é a atualização que desfaz a modificação feita por a , transformando ν' em ν . Assim, a taxa de aceite de um par de atualizações balanceado é

$$R = \frac{P_a^{act}(\nu \rightarrow \nu')}{P_{\bar{a}}^{act}(\nu' \rightarrow \nu)} = \frac{p_{\bar{a}} \mathcal{W}_{\nu'}}{p_a \mathcal{W}_\nu}. \quad (3.18)$$

A taxa de aceite utilizada pelo Worm segue a prescrição de Metrópolis [53], em que temos

$$\begin{aligned} P_a^{act}(\nu \rightarrow \nu') &= \begin{cases} R & \text{se } R < 1 \\ 1 & \text{se } R \geq 1, \end{cases} \\ P_{\bar{a}}^{act}(\nu' \rightarrow \nu) &= \begin{cases} 1 & \text{se } R \leq 1 \\ 1/R & \text{se } R > 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Vale salientar que nos procedimentos de atualização que modificam o número de *kinks*, temos uma diferencial $d\tau$ extra entrando no peso da configuração, já que temos um grau de liberdade contínuo adicional entre as configurações conectadas por esses procedimentos. No entanto, como veremos, quando determinamos a taxa de aceite, a diferencial extra é compensada por uma diferencial que vem da distribuição de probabilidade da variável extra presente na configuração⁶, deixando a taxa de aceite finita no limite em que tomamos τ contínuo (i.e. $d\tau \rightarrow 0$) [54], ou seja,

$$R \sim \frac{\widetilde{\mathcal{W}}_{\nu'}}{\widetilde{\mathcal{W}}_\nu}, \quad (3.20)$$

em que os pesos $\widetilde{\mathcal{W}}_\nu$ não contém nenhuma diferencial e as probabilidades de propor uma determinada atualização e de sugerir um conjunto particular de variáveis não foram explicitamente mencionados. Desta forma, dada uma certa configuração ν , seu peso $\widetilde{\mathcal{W}}_\nu$ pode ser imediatamente obtido a partir da equação (3.13) (deixando de fora as diferenciais).

⁶Para mais detalhes veja [47].

Em linhas gerais, a partir de uma configuração qualquer ν o algoritmo seleciona aleatoriamente um dos quatro tipos de atualizações do algoritmo: a criação ou a destruição do verme, ou um deslocamento temporal ou espacial do verme. Os dois primeiros tipos de atualização nos permitem transitar entre o espaço CF e CF_G . Já os dois outros tipos garantem a ergodicidade do algoritmo, sendo que a movimentação temporal muda o tamanho do verme na direção temporal e a movimentação espacial altera o número de *kinks* e o tamanho do verme na direção espacial. Vale ressaltar que essas atualizações são locais, no sentido que mudam apenas variáveis ao redor de um ponto deixando o resto da configuração intacta, e também que o algoritmo trabalha no *ensemble* Grande Canônico, uma vez que a movimentação temporal do verme no espaço de configurações do sistema muda o número de partículas dos sítios. Determinamos a seguir, a taxa de aceite R de cada tipo de atualização após uma descrição do movimento.

Criação e destruição do verme

São as atualizações que fazem a transição do espaço CF para o CF_G (criação do verme), ou vice-versa (destruição do verme). Quando ambos os extremos do verme estão no mesmo sítio e não estão separados por nenhum *kinks*, então o verme pode ser removido do espaço de configurações, fechando sua linha-mundo (i.e., passando para o espaço CF, veja a figura 3.3 da direita para a esquerda). Se o verme não está presente, então podemos fazer a atualização de criação do verme, em que criamos uma descontinuidade e passamos para o espaço CF_G . Isto é feito selecionando aleatoriamente um intervalo de um caminho não interrompido por nenhum *kink* (que no código é designado por um nome⁷) e então temos duas possibilidades: criar uma nova linha-mundo ou deletar o trecho de uma já existente, como mostrado na figura 3.3 indo da esquerda para a direita.

⁷Quando implementamos o algoritmo, atribuímos um nome a cada intervalo contínuo que guarda as associações entre primeiros vizinhos (no espaço e tempo).

Figura 3.3: Procedimento de atualização de criação do verme num sítio i . À esquerda, temos uma configuração inicial em que um trecho entre *kinks* (τ_{min}, τ_{max}) foi selecionado e à direita, temos a criação do verme com ira b_i (a cabeça) e masha $b_i^\dagger$ (a cauda) nas posições τ_I e τ_M , respectivamente. Sendo que na figura acima houve a remoção de um trecho de uma linha-mundo e na abaixo a inserção de uma nova linha-mundo. Na atualização oposta, destrói o verme, passamos de uma configuração como uma das duas mostradas à direita, para uma como a da esquerda. As diferentes espessuras das linhas representam números de ocupação diferentes e o tempo imaginário cresce da esquerda para a direita.

A equação de balanço para a atualização cria verme para o caso retratado em baixo na figura 3.3 é

$$p_c \mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_K) (d\tau)^K p(\tau_I, \tau_M) (d\tau)^2 P_c^{act}(\nu_K \rightarrow \nu'_{K+2}) = \\ = p_d \mathcal{W}(y, K+2, \xi_{K+2}; \tau_1, \dots, \tau_M, \tau_I, \dots, \tau_{K+2}) (d\tau)^{K+2} P_d^{act}(\nu'_{K+2} \rightarrow \nu_K), \quad (3.21)$$

em que c denota a atualização cria o verme e d a atualização destrói o verme, sendo $p(\tau_I, \tau_M)$ a distribuição de probabilidades das posições de ira e masha, com $\tau_M < \tau_I$, normalizada no intervalo selecionado para a criação do verme (τ_{min}, τ_{max}) . Formalmente, essa função de distribuição é arbitrária, e esta liberdade deve ser usada para otimizar a taxa de aceite. Em nosso código, escolhemos a distribuição mais simples possível, uma distribuição uniforme

$$p(\tau_I, \tau_M) = \frac{2}{(\tau_{max} - \tau_{min})^2}. \quad (3.22)$$

Definindo a taxa de aceite

$$R = \frac{P_c^{act}(\nu_K \rightarrow \nu'_{K+2})}{P_d^{act}(\nu'_{K+2} \rightarrow \nu_K)} = \frac{p_d}{p_c} \frac{\mathcal{W}(y, K+2, \xi_{K+2}; \tau_1, \dots, \tau_M, \tau_I, \dots, \tau_{K+2})}{\mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_K) p(\tau_I, \tau_M)}. \quad (3.23)$$

A probabilidade de aplicação da atualização c é

$$p_c = 1 \cdot \frac{1}{N_l} \cdot \frac{1}{2}, \quad (3.24)$$

que é a probabilidade de selecionar a atualização cria o verme, que é igual a 1 no espaço CF e zero no espaço CF_G , vezes a probabilidade de selecionar o intervalo entre *kinks* em

que o verme será posicionado, em que N_l é o número de intervalos não interrompidos por *kinks* da configuração atual, vezes um fator meio devido a chance do verme ser criado adicionando uma nova linha-mundo ou removendo um trecho de uma (casos retratados em baixo e em cima, respectivamente, na figura 3.3). Já a probabilidade de aplicação da atualização d é

$$p_d = (caso)_\nu \cdot w_d, \quad (3.25)$$

com $(caso)_\nu$ sendo igual a 1 ou 2 dependendo se não houver nenhum outro *kink* vizinho a ira ou masha (i.e., o intervalo à esquerda de ira é masha e o à esquerda de masha é ira), pois neste caso $w_d \rightarrow 2w_d$, sendo w_d a probabilidade de selecionar a atualização destrói o verme. Já razão entre os pesos das duas configurações é

$$\begin{aligned} & \frac{\mathcal{W}(y, K+2, \xi_{K+2}; \tau_1, \dots, \tau_M, \tau_I, \dots, \tau_{K+2})}{\mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_K) p(\tau_I, \tau_M)} = \\ & = |\eta|^2 \cdot \sqrt{n_1 + 1} \cdot \sqrt{n_1 + 1} \cdot \frac{(\tau_{max} - \tau_{min})^2}{2} \cdot e^{-(\tau_I - \tau_M)(H_0(\{n\}_{\nu'_{K+2}}) - H_0(\{n\}_{\nu_K}))}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

em que η é uma constante introduzida nos operadores $b_i \rightarrow \eta^* b_i$ e $b_j^\dagger \rightarrow \eta b_j^\dagger$ para ajustar o tempo que o algoritmo passa nos espaço CF e CF_G , vezes o elemento de matriz de masha, vezes o de ira, sobre a probabilidade de selecionar as posições de ira e masha em τ_I e τ_M , respectivamente, vezes a diferença de energia diagonal entre as duas configurações.

Desta forma a taxa de aceite fica

$$R = N_l(\tau_{max} - \tau_{min})^2 w_d |\eta|^2 (caso)_\nu (n_1 + 1) e^{-(\tau_I - \tau_M)(H_0(\{n_2\}) - H_0(\{n_1\}))}, \quad (3.27)$$

em que usamos a notação

$$H_0(\{n_i\}) = \frac{U}{2} n_i(n_i - 1) - \mu n_i. \quad (3.28)$$

A taxa de aceite para a atualização remove verme, em que passamos de uma configuração ν_K para uma configuração ν_{K-2} , é obtida de maneira análoga.

Deslocamento temporal

Procedimento no qual é escolhido uma nova posição temporal para um dos extremos do verme (cabeça ou cauda), sem mudar de sítio, dentro de um intervalo (τ_{min}, τ_{max}) entre dois *kinks* (veja a figura 3.4). Deslocamentos temporais mudam o número de ocupação de um sítio proporcionalmente ao intervalo de tempo acrescentado ou removido. Assim, partículas extras são inseridas ou removidas do sistema quando $b_i^\dagger(\tau_M)$ dá uma volta completa na direção temporal (relativamente a $b_i(\tau_I)$).

Figura 3.4: Procedimento de atualização com deslocamento temporal do verme. O trecho entre *kinks* (τ_{min}, τ_{max}) no entorno do operador de aniquilação b_i (ira) é selecionado e uma nova posição τ'_I é sorteada para b_i . Nesta figura, o tempo imaginário cresce da esquerda para a direita.

A equação de balanço dessa atualização é

$$\begin{aligned} p_{dt} \mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_I, \dots, \tau_K) (d\tau)^K p(\tau_I) (d\tau) P_{dt}^{act}(\nu_K \rightarrow \nu'_K) = \\ = p_{\bar{dt}} \mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau'_I, \dots, \tau_K) (d\tau)^K p(\tau'_I) (d\tau) P_{\bar{dt}}^{act}(\nu'_K \rightarrow \nu_K), \end{aligned} \quad (3.29)$$

em que dt é a atualização deslocamento temporal, com $\bar{dt}$ sendo a atualização que desfaz o movimento proposto por dt e $p(\tau)$ a distribuição de probabilidades utilizada para selecionar a nova posição de ira. Definindo a taxa de aceite

$$R = \frac{P_{dt}^{act}(\nu_K \rightarrow \nu'_K)}{P_{\bar{dt}}^{act}(\nu'_K \rightarrow \nu_K)} = \frac{p_{\bar{dt}} \mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau'_I, \dots, \tau_K) p(\tau'_I)}{p_{dt} \mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_I, \dots, \tau_K) p(\tau_I)}. \quad (3.30)$$

Tanto no movimento de τ_I a τ'_I como na atualização oposta temos que a probabilidade de aplicar a atualização é

$$p_{\bar{dt}} p(\tau'_I) = p_{dt} p(\tau_I) = w_{dt} \cdot \frac{1}{\tau_{max} - \tau_{min}}, \quad (3.31)$$

i.e., a probabilidade de selecionar a atualização move verme temporalmente w_{dt} , vezes a probabilidade de escolher a nova posição τ' (que escolhemos ser uniforme). Portanto, a taxa de aceite é simplesmente

$$R = \frac{\mathcal{W}_{\nu'}}{\mathcal{W}_{\nu}} = e^{-(\tau'_I - \tau_I)(H_0(\{n_1\}) - H_0(\{n_2\}))}, \quad (3.32)$$

em que usamos novamente (3.28).

Deslocamento espacial

Deslocamentos espaciais alteram o número de *kinks* do espaço de configurações, mudando a posição espacial da cabeça ou cauda do verme, mas mantendo sua posição temporal. Separamos os deslocamentos espaciais em dois tipos: “pulos” e “reconexões”. Tecnicamente são movimentos idênticos, mas fazemos uma distinção entre eles porque na “reconexão” trechos de linhas-mundo envolvidas na atualização trocam de lugar de maneira não trivial. (Compare a figura 3.5 com a figura 3.6.)

O “pulo” consiste no movimento de um dos extremos do verme em que um *kink* é adicionado (ou removido, no caso da atualização oposta, que denominamos “anti-pulo”) à esquerda da cabeça (ira, o operador b_i) ou à direita da cauda (masha, o operador $b_i^\dagger$). Este procedimento está ilustrado na figura 3.5.

Figura 3.5: Procedimento de atualização com deslocamento espacial do verme do tipo “pulo” para o operador de aniquilação b_i . À esquerda, temos uma configuração inicial, em que selecionamos o sítio em que o *kink* será inserido e o intervalo (τ_{min}, τ_{max}) , sem interrupções de *kinks*, no qual sua posição temporal será sorteada. À direita, o *kink* é inserido no sítio j na posição $\tau_n \in (\tau_{min}, \tau_{max})$ sorteada. (O movimento “anti-pulo” vai da configuração da direita para a da esquerda.) Note que o tempo cresce da esquerda para a direita.

Já a “reconexão” é o movimento em que é adicionado um *kink* à direita da cabeça (operador b_i) ou à esquerda da cauda (operador $b_i^\dagger$). No movimento oposto, chamado de “anti-reconexão”, esse *kink* é removido. Este procedimento está ilustrado na figura 3.6, em que fica evidenciado que efetivamente reconectamos segmentos de linha-mundo de caminhos diferentes.

Figura 3.6: Procedimento de atualização com deslocamento espacial do verme do tipo “reconexão” para o operador de aniquilação b_i . À esquerda, temos uma configuração inicial e à direita a modificação sugerida. (O movimento “anti-reconexão” vai da configuração da direita para a da esquerda.) O tempo cresce da esquerda para a direita na figura.

A equação de balanço da atualização que insere um *kink* à esquerda de ira (atualização do tipo “pulo” da figura 3.5) é dada por

$$\begin{aligned} p_{ie} \mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_K) (d\tau)^K p(\tau_n) (d\tau) P_{ie}^{act}(\nu_K \rightarrow \nu'_{K+1}) = \\ = p_{re} \mathcal{W}(y, K+1, \xi_{K+1}; \tau_1, \dots, \tau_n, \dots, \tau_{K+1}) (d\tau)^{K+1} P_{re}^{act}(\nu'_{K+1} \rightarrow \nu_K), \quad (3.33) \end{aligned}$$

em que *ie* é a atualização que insere um *kink* à esquerda do extremo (ou seja, é um “pulo” para ira, mas a mesma taxa de aceite pode ser usada para o movimento “re-conexão” para masha), *re* é a atualização que remove o *kink* à esquerda, $p(\tau_n)$ é a distribuição de probabilidades da posição do *kink* inserido τ_n , normalizada no intervalo (τ_{min}, τ_{max}) . Escolhemos uma distribuição uniforme aqui também

$$p(\tau_n) = \frac{1}{(\tau_{max} - \tau_{min})}. \quad (3.34)$$

Definindo a taxa de aceite

$$R = \frac{P_{ie}^{act}(\nu_K \rightarrow \nu'_{K+1})}{P_{re}^{act}(\nu'_{K+1} \rightarrow \nu_K)} = \frac{p_{re}}{p_{ie}} \frac{\mathcal{W}(y, K+1, \xi_{K+1}; \tau_1, \dots, \tau_n, \dots, \tau_{K+1})}{\mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_K) p(\tau_n)}. \quad (3.35)$$

A probabilidade de aplicação da atualização *ie* é

$$p_{ie} = w_{ie} \cdot \frac{1}{z}, \quad (3.36)$$

ou seja, a probabilidade de selecionar a atualização insere um *kink* à esquerda w_{ie} , multiplicado pela probabilidade de selecionar a direção espacial do *kink*, em que z é o número de primeiros vizinhos de um sítio. Já na atualização oposta, temos que a probabilidade de selecionar a atualização remove o *kink* à esquerda *re* é

$$p_{re} = w_{re}, \quad (3.37)$$

i.e. é igual a probabilidade de selecionar essa atualização e escolhemos $w_{re} = w_{ie}$. A razão entre os pesos das duas configurações neste caso é

$$\begin{aligned} & \frac{\mathcal{W}(y, K+1, \xi_{K+1}; \tau_1, \dots, \tau_n, \dots, \tau_{K+1})}{\mathcal{W}(y, K, \xi_K; \tau_1, \dots, \tau_K) p(\tau_n)} = \\ & = t \sqrt{n_1(n_3+1)} \cdot \frac{\sqrt{n_3+1}}{\sqrt{n_1}} \cdot (\tau_{max} - \tau_{min}) \cdot e^{-(\tau_n - \tau_I)(H_0(\{n\}_{\nu'_{K+1}}) - H_0(\{n\}_{\nu_K}))}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

ou seja, é igual ao elemento de matriz do *kink* inserido, vezes a razão entre os elementos de matriz de ira nas configurações ν'_{K+1} e ν_K , sobre a probabilidade de escolher a nova posição τ_n para o *kink*, vezes a diferença de energia diagonal entre as duas configurações.

Então a taxa de aceite é

$$R = tz(\tau_{max} - \tau_{min})(n_3 + 1)e^{-(\tau_n - \tau_I)(H_0(\{n_1\}) - H_0(\{n_2\}) + H_0(\{n_3\}) - H_0(\{n_4\}))}, \quad (3.39)$$

lembrando que aqui $H_0(\{n_i\})$ é dado por (3.28). A taxa de aceite para a atualização que remove um *kink* à esquerda *re*, em que passamos de uma configuração ν_K para uma configuração ν_{K-1} , é $1/R$.

Já a taxa de aceite para a atualização insere um *kink* à direita *id* é obtida de maneira análoga, em que a taxa de aceite da atualização oposta, remove um *kink* à direita *rd*, é o inverso da taxa de aceite de *id*.

3.1.2 Diagrama de fluxos

O diagrama de fluxos do algoritmo segue nas figuras 3.7 e 3.8, sendo a última figura um detalhamento da primeira.

Figura 3.7: Fluxograma do algoritmo Worm. Na figura, C_i significa a configuração inicial e os parâmetros iniciais são, por exemplo, U , t , μ e Δ (interação intrassítio, tunelamento, potencial químico e intensidade de desordem, respectivamente). Detalhamos como alguns observáveis são obtidos a partir de Z e G na seção 3.1.3. O bloco “move verme” (em laranja) foi expandido na figura 3.8.

Figura 3.8: Detalhamos neste fluxograma o bloco “move verme” presente na figura 3.7. Aqui, $rnd()$ representa um gerador de números aleatórios, w_1 a w_5 são as probabilidades de um dos procedimentos de atualização no espaço CF_G ser proposto, sendo fixos $w_1 = w_d$, $w_2 = w_1 + w_{ie}$, $w_3 = w_2 + w_{re}$, $w_4 = w_3 + w_{id}$, $w_5 = w_4 + w_{rd}$ e $w_5 + w_{dt} = 1$, e P^{act} é a probabilidade de aceitar a atualização proposta, que é diferente para cada atualização (veja a descrição na seção 3.1.1), mas para simplificar este diagrama condensamos esta informação. Também omitimos que as atualizações feitas no espaço CF_G podem ser feitas a partir de ira ou masha.

3.1.3 Cálculo dos observáveis

Nesta seção, descrevemos como o cálculo de observáveis é feito pelo Worm. Observáveis como o número de partículas do sistema, a energia e a compressibilidade podem ser estimados a partir da função de partição [50]. Winding numbers fornecem a densidade de superfluido e através da função de Green podemos calcular a densidade de condensado e o *gap* da fase Mott. Podemos usar este último para construir o diagrama de fases da transição SF-MI, o que será descrito em mais detalhes na seção 3.2.

Número médio de partículas e compressibilidade

O valor médio de partículas do sistema $\langle N \rangle$ e a compressibilidade κ podem ser estimados a partir de Z_{BH} , que na simulação é obtida pela equação (3.13). Estimamos o valor médio de partículas como

$$\begin{aligned}
 \langle N \rangle &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_{BH} \\
 &= \frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_{BH}} \sum_{n=0}^{\infty} (t)^n \int_0^{\beta} d\tau_n \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \sum_{\{\alpha\}} h_n^{\alpha(\tau)} \exp \left\{ - \sum_{m=0}^n E_{\alpha_m} (\tau_{m+1} - \tau_m) \right\} \times \\
 &\quad \times \left(- \sum_{m=0}^n (\tau_{m+1} - \tau_m) \frac{\partial E_{\alpha_m}}{\partial \mu} \right) \\
 &= \frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_{BH}} \sum_{\nu} \mathcal{W}_{\nu} \left(\sum_{m=0}^n (\tau_{m+1} - \tau_m) \sum_i n_i^{\alpha_m} \right) = \frac{1}{\beta} \left\langle \int_0^{\beta} \sum_i n_i(\tau) d\tau \right\rangle, \quad (3.40)
 \end{aligned}$$

em que $\beta = 1/k_B T$, μ é o potencial químico e utilizamos a equação (3.11).

A estimativa da compressibilidade κ é similar, já que

$$\kappa = \frac{\partial \rho}{\partial \mu} = (\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2) \frac{\beta}{L^d}, \quad (3.41)$$

com $\beta = 1/k_B T$, L^d o volume do sistema d -dimensional e ρ é o fator de preenchimento, definido na equação (2.7). Sendo

$$\begin{aligned}
 \langle N^2 \rangle &= \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{Z_{BH}} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} Z_{BH} = \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{Z_{BH}} \sum_{\nu} \mathcal{W}_{\nu} \left(\sum_{m=0}^n (\tau_{m+1} - \tau_m) \sum_i n_i^{\alpha_m} \right)^2 \\
 &= \frac{1}{\beta^2} \left\langle \left(\int_0^{\beta} \sum_i n_i(\tau) d\tau \right)^2 \right\rangle. \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Energia média

Para calcular a energia usamos a equação (3.13), mas como há uma derivada em β , precisamos fazer a seguinte mudança de variáveis: $\tau = \beta s$. Em função desta nova variável a função de partição fica

$$Z_{BH} = \sum_{n=0}^{\infty} (t)^n \int_0^1 ds_n \dots \int_0^{s_2} ds_1 (\beta)^n \sum_{\{\alpha\}} h_n^{\alpha(s)} \exp \left\{ -\beta \sum_{m=0}^n E_{\alpha_m} (s_{m+1} - s_m) \right\}. \quad (3.43)$$

Assim, estimamos o valor médio da energia como

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{\partial \ln Z_{BH}}{\partial \beta} \\ &= \frac{1}{Z_{BH}} \sum_{n=0}^{\infty} (t\beta)^n \int_0^1 ds_n \dots \int_0^{s_2} ds_1 \sum_{\{\alpha\}} h_n^{\alpha(s)} \exp \left\{ -\beta \sum_{m=0}^n E_{\alpha_m} (s_{m+1} - s_m) \right\} \times \\ &\quad \times \left(\sum_{m=0}^n E_{\alpha_m} (s_{m+1} - s_m) - \frac{n}{\beta} \right) \\ &= \frac{1}{Z_{BH}} \sum_{\nu} \mathcal{W}_{\nu} \left(\sum_{m=0}^n E_{\alpha_m} (s_{m+1} - s_m) - \frac{n}{\beta} \right) \\ &= \frac{1}{\beta} \left\langle \sum_{m=0}^n E_{\alpha_m} (\tau_{m+1} - \tau_m) - n \right\rangle = \frac{1}{\beta} \left\langle \int_0^{\beta} E_{\alpha(\tau)} d\tau - n \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Winding number

Winding numbers se relacionam com a densidade do superfluido pela fórmula [52]

$$\rho_s = \frac{1}{d} \frac{\langle W^2 \rangle}{\beta L^{d-2}}, \quad (3.45)$$

com L o tamanho linear do sistema, d a dimensão e a média do quadrado do *winding number* é dado por

$$\langle W^2 \rangle = \sum_{\alpha=1}^d \langle W_{\alpha}^2 \rangle, \quad (3.46)$$

onde W_{α} é o *winding number* na direção α , definido como o número de voltas inteiras realizadas pelo verme ao longo de uma direção espacial durante a simulação do programa (veja os exemplos na figura 3.9). Para obter essa relação calculamos a mudança na energia livre do sistema em resposta a uma transformação de Gauge conhecida como *twisted boundary condition* (para mais detalhes veja a referência [47]).

Figura 3.9: Configurações com *winding numbers* espaciais iguais a zero, um e dois, respectivamente, da esquerda para a direita, para uma rede unidimensional obedecendo condições periódicas de contorno.

Densidade de condensado

Obtemos a densidade de condensado através da função de Green pela fórmula

$$n_0 = \langle \hat{n}_{k=0} \rangle = \frac{1}{L^d} \sum_{r_{IM}} G(r_{IM}, 0), \quad (3.47)$$

em que L^d é o volume do sistema d -dimensional e $G(r_{IM}, 0)$ é a função de Green em tempos iguais, com r_{IM} a distância espacial entre ira e masha.

3.2 Delimitando a fronteira do lobo de Mott utilizando funções de Green

Para construir o diagrama de fases da transição superfluido-isolante de Mott, utilizamos um parâmetro de ordem da transição, que é zero numa fase e diferente de zero na outra. Exemplos de parâmetros de ordem que podem ser utilizados para este fim são: a densidade de superfluido e o *gap* de energia. Também podemos utilizar o fator de preenchimento para diferenciar essas fases, já que este é inteiro na fase Mott e semi-inteiro na fase superfluida. Com o algoritmo Worm podemos calcular essas quantidades. Já descrevemos como estimamos o fator de preenchimento (a partir da equação (3.40)) e as densidades de superfluido e condensado (equações (3.45) e (3.47)). Nesta seção, descreveremos como obtemos o *gap* da fase de Mott.

Um método preciso de determinar a fronteira de transição entre as fases superfluida e isolante de Mott é o descrito na referência [16], que utiliza a função de Green de momento zero $G(\mathbf{p} = 0, \tau)$ para encontrar o diagrama de fases do estado fundamental da hamiltoniana de Bose-Hubbard com uma rede cúbica. Utilizamos a função de Green para determinar a relação de dispersão para excitações do tipo partícula-buraco com

momentos pequenos que nos fornece diretamente o *gap* de energia da fase isolante de Mott, uma de suas características mais importantes.

Reescrevendo a função de Green (3.16) utilizando a representação de Lehman e extrapolando para o limite em que $\tau \rightarrow \pm\infty$ encontramos que a função de Green de momento zero se comporta como

$$G(\mathbf{p} = 0, \tau) \rightarrow \begin{cases} Z_+ e^{-\tau\epsilon_+(\mu,t)}, & \tau \rightarrow +\infty \\ Z_- e^{\tau\epsilon_-(\mu,t)}, & \tau \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (3.48)$$

onde $\epsilon_+(\mu, t)$ e $\epsilon_-(\mu, t)$ são as energias de excitação de uma única partícula e um único buraco, respectivamente, para um dado valor de μ e t dentro do lobo e $Z_{\pm}$ são os pesos espectrais. A partir da variação da função de Green de momento zero em função do tempo imaginário obtemos o valor de $\epsilon_{\pm}(\mu, t)$ e, com ele, determinamos o potencial químico $\mu_{\pm}$ para o qual o *gap* de energia para excitar uma partícula/buraco desaparece. Assim, as fronteiras dos lobos de Mott são definidas pelo conjunto de pontos $(\mu_{\pm}/U, t/U)$, com o *gap* do isolante definido como $\bar{\Delta} = \mu_+ - \mu_-$, para um valor de t/U fixo [11]. (Veja a figura 3.10.)

Figura 3.10: Esquema explicativo da obtenção do *gap* do isolante de Mott a partir da função de Green. O decaimento do logaritmo da função de Green com τ , mostrado à direita, nos fornece o *gap* de energia ϵ_+ , assim podemos estimar o ponto da fronteira entre as fases SF-MI como $\mu_+ = \mu + \epsilon_+$, sendo μ o potencial químico da simulação. Obtemos analogamente a estimativa da fronteira inferior μ_- e assim determinamos o *gap* do isolante de Mott como $\bar{\Delta} = \mu_+ - \mu_-$ para um valor de t/U fixo.

Para obter uma boa estatística para a função de Green temos que escolher um valor de μ próximo o suficiente do valor de fronteira $\mu_{\pm}$ e uma temperatura T finita, mas efetivamente zero, de maneira que [16]

$$|\mu - \mu_{\pm}| \ll t \quad e \quad |\mu - \mu_{\pm}| \gg T. \quad (3.49)$$

Assim, garantimos que o *gap* de energia é grande o suficiente de maneira a suprimir flutuações térmicas, mas que ainda possamos verificar flutuações quânticas, permitindo a medida da energia de excitação partícula-buraco.

Para exemplificar esse procedimento, estimamos $\epsilon_{\pm}(\mathbf{p} = 0)$ para um ponto $(\mu/U, t/U)$ do diagrama de fases, medindo a inclinação do gráfico de $\ln(G(\mathbf{p} = 0, \tau))$ por τ na figura 3.11. No gráfico de cima dessa figura, temos uma função de Green de um sistema com uma rede quadrada para uma simulação com os parâmetros $\mu/U = 0.0227$, $t/U = 0.005$ e $T/t = 0.05$, que é um ponto do diagrama de fases dentro do primeiro lobo de Mott próximo a fronteira inferior da transição SF-MI. No canto inferior esquerdo do gráfico, apresentamos o resultado do ajuste linear da função $\ln(G(\mathbf{p} = 0, \tau))$, a primeira linha fornece a inclinação, que é $\epsilon_{-}(\mathbf{p} = 0) = -0.4953$, e a segunda linha fornece a previsão do potencial químico da fronteira em unidades de U , ou seja, $\mu_{-}/U = \mu/U + \epsilon_{-}/U \approx 0.02$.⁸

Como a função de Green em uma rede hexagonal é descrita por uma matriz (veja a equação (4.12)), devemos traçar no gráfico os elementos de matriz G_{AA} , G_{BB} , G_{AB} e G_{BA} . Apresentamos na figura 3.12 um exemplo de função de Green considerando a rede do sistema hexagonal no ponto $(t/U = 0.005, \mu/U = 0.0175, T/t = 0.05)$, que também é próximo a fronteira de transição, mas ainda no lobo de Mott. Como o sistema é homogêneo esperamos que as curvas G_{AB} e G_{BA} coincidam, assim como as curvas G_{AA} e G_{BB} , o que é verificado na figura. Ademais, a inclinação de todas as curvas é a mesma havendo apenas a não coincidência do peso espectral de G_{AA} com o de G_{AB} . Verificamos esse mesmo comportamento na função de Green de um sistema com uma rede quadrada falso bipartite, como pode ser visto no gráfico inferior de 3.11, que fora obtido com os mesmos parâmetros do sistema com uma rede quadrada (gráfico localizado acima na figura 3.11).

⁸Escolhemos $t = 1$.

Figura 3.11: Função de Green no ponto do diagrama de fases ($\mu/U = 0.0227, t/U = 0.005, T/t = 0.05$) do primeiro lobo de Mott próximo a fronteira da transição SF-MI, considerando uma rede quadrada (acima) e uma rede quadrada falso bipartite (abaixo). Em ambos os casos o *gap* medido é $\epsilon_- = -0.4953$ e a fronteira da transição foi localizada em $\mu_-/U = 0.02022$.

Figura 3.12: Função de Green considerando uma rede hexagonal do ponto do diagrama de fases ($t/U = 0.005$, $\mu/U = 0.0175$, $T/t = 0.05$) localizado no primeiro lobo de Mott próximo a fronteira da transição SF-MI. O *gap* medido é $\epsilon_- = -0.501$ e a fronteira da transição foi localizada em $\mu_-/U = 0.01499$.

3.3 Análise de escalonamento de tamanho finito

Uma técnica bastante empregada para determinar o comportamento crítico de uma transição de fases contínua é a análise de escalonamento de tamanho finito (FSS) [55, 56]. Essa técnica utiliza os efeitos de tamanho finito do sistema, presentes devido a proximidade de um ponto crítico, para estimar a localização do ponto crítico g_c e os expoentes críticos que caracterizam o comportamento nesta região. Utilizamos FSS no capítulo 5 no estudo da classe de universalidade da transição superfluido-vidro de Bose (SF-BG).

Numa transição de fases contínua, os comprimentos de correlação espacial ξ e temporal ξ_τ divergem no ponto crítico da transição. Quando ξ e ξ_τ são finitos, efeitos de tamanho finito do sistema são superados aumentando o tamanho do sistema até que não se note mais diferença entre as estimativas das quantidades físicas de interesse. Já próximo de um ponto crítico, a divergência de ξ e ξ_τ no ponto crítico faz com que muitas propriedades se tornem dependentes do tamanho do sistema [55].

Como vimos, a estatística de *winding numbers* se relaciona com a densidade do superfluido pela fórmula (3.45). Assim, podemos utilizar *winding numbers* para determinar o ponto de crítico das transições superfluido-vidro de Bose e superfluido-líquido normal. Ademais, são bastante convenientes para um estudo de FSS já que são inva-

riantes de escala, i.e. podem ser escritos como

$$\langle W^2 \rangle = f(L/\xi, L_\tau/\xi_\tau), \quad (3.50)$$

em que L e L_τ são os tamanhos lineares espacial e temporal da rede, respectivamente, e f é uma função de escala.

Se um pequeno desvio do ponto crítico for caracterizado por $\delta = (g - g_c)/g_c$, em que g é um parâmetro de controle utilizado para induzir a transição de fases no sistema, então o comprimento de correlação espacial ξ e temporal ξ_τ divergem como [55]

$$\xi_\tau \propto \xi^z \propto |\delta|^{-z\nu}, \quad (3.51)$$

com z sendo o expoente crítico dinâmico e ν o expoente crítico do comprimento de correlação. Deste modo, podemos reescrever a equação (3.50) numa forma mais conveniente:

$$\langle W^2 \rangle = \tilde{f}(L^{1/\nu}\delta, L_\tau/L^z), \quad (3.52)$$

em que removemos a dependência com os comprimentos de correlação, variáveis que não conseguimos estimar com facilidade, escrevendo-a em função da distância até o ponto crítico e dos tamanhos lineares do sistema, parâmetros facilmente ajustáveis numa simulação. Plotando $\langle W^2 \rangle$ para diferentes tamanhos de sistema e fixando a razão L_τ/L^z , podemos determinar o parâmetro crítico g_c pelo cruzamento das curvas $\tilde{f}$ (se z foi previsto corretamente), já que em $\delta = 0$ o lado direito da equação (3.52) é constante para qualquer tamanho de sistema. Na figura 3.13, mostramos um esboço de uma análise de FSS que estima g_c .

Figura 3.13: Esquema de uma análise de escalonamento de tamanho finito para a média do quadrado de *winding numbers* $\langle W^2 \rangle$. Na figura, os tamanhos dos sistemas em cada curva crescem da direita para a esquerda, i.e., $L_1 < \dots < L_4$, e g é o parâmetro de controle usado para induzir a transição de fases no sistema. Inferimos o valor do ponto crítico g_c pelo cruzamento das curvas.

Além disso, a partir da (3.52) segue que no ponto crítico vale

$$(\partial \langle W^2 \rangle / \partial g)|_{g_c} = \text{const} \times L^{1/\nu}, \quad (3.53)$$

o que nos permite determinar o expoente crítico do comprimento de correlação ν . Plotando o logaritmo da inclinação de cada curva da figura 3.13 no ponto de cruzamento g_c versus o logaritmo de L , estimamos $1/\nu$ medindo a inclinação do gráfico resultante.

3.4 O modelo de correntes- J

A estimativa de expoentes críticos é bastante exigente computacionalmente, especialmente em 3D e em sistemas desordenados. No entanto, propriedades universais de pontos críticos quânticos em d dimensões podem ser igualmente estudadas fazendo um mapeamento usando integrais de caminho, em que passamos a descrever o sistema quântico como um sistema clássico efetivo com $(d+1)$ dimensões, sendo que a dimensão extra é o tempo imaginário [57]. Este mapeamento é vantajoso pois podemos cair num sistema clássico cujas propriedades críticas já foram extensivamente estudadas ou, caso a classe de universalidade seja nova, podemos usar algoritmos de Monte Carlo clássicos que costumam ser mais eficientes que os algoritmos quânticos.

O equivalente clássico mais simples do modelo de Bose-Hubbard desordenado (DBH) em 3D é o modelo de correntes- J em $(3+1)$ dimensões, também conhecido na literatura como modelo *bond-current* ou *link-current*. Este é um modelo clássico estatístico de correntes não divergentes em uma rede [45, 58]. Por possuir um algoritmo Worm [48] mais eficiente que o quântico, foi utilizado em nossos estudos do capítulo 5 para a determinação dos expoentes críticos da classe de universalidade da transição superfluido-vidro de Bose.

A função de partição desse modelo é

$$Z_J = \sum_{\{\mathbf{J}\}} e^{-\beta H_J}, \quad (3.54)$$

sendo que a soma é tomada sobre todas as configurações de correntes- J não divergentes, i.e., $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$, e sua hamiltoniana é igual a

$$\beta H_J = K \sum_{\mathbf{n}, \alpha} J_{\mathbf{n}, \alpha}^2 - \sum_{\mathbf{n}} \mu_i J_{\mathbf{n}, \tau}, \quad (3.55)$$

em que $K \propto 1/t$, com t sendo o tunelamento do modelo de Bose-Hubbard e μ_i o potencial químico. Já $J_{\mathbf{n}, \alpha}$, são correntes $\mathbf{J}_{\mathbf{n}}$ inteiras definidas nas ligações de um sítio $\mathbf{n}$, em que $\mathbf{n} = (\mathbf{r}, \tau)$ é o índice do sítio, na direção- α de uma rede hipercúbica espaço-temporal obedecendo condições periódicas de contorno (veja a figura 3.14). No caso 3D, por exemplo, temos que $\mathbf{n} = (x, y, z, \tau)$ e a direção $\alpha \in \{x, y, z, \tau\}$, sendo que a direção oposta a α é igual a $-\alpha$, i.e., $-\alpha \in \{-x, -y, -z, -\tau\}$. A condição $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ implica que as correntes devem ter divergente nulo em cada um dos sítios da rede, podendo ser escrita como $\sum_{\alpha} (J_{\mathbf{n}, \alpha} + J_{\mathbf{n}, -\alpha}) = 0$, sendo $J_{\mathbf{n}, -\alpha} = -J_{\mathbf{n}-\hat{\alpha}, \alpha}$. Se limitarmos os valores das correntes $J_{\mathbf{n}, \alpha=\mathbf{r}}$ a $-1, 0$ e 1 e $J_{\mathbf{n}, \alpha=\tau}$ a 0 e 1 , teremos o que corresponde ao limite de caroço-duro para bósons ou a um sistema com spins $1/2$ [58]. Usaremos esse limite no capítulo 5.

Graficamente, o espaço de configurações CF desse modelo é formado por *loops* de correntes- J (i.e., caminhos fechados, devido a condição de divergência zero) correspondentes a trajetórias de partículas bosônicas numa integral de caminho. A componente espacial de uma corrente $\mathbf{J}_{\mathbf{n}}$ é interpretada como eventos de tunelamento de bósons e

a componente temporal de $\mathbf{J}_n$ representa os números de ocupação do sítio correspondente durante um intervalo de tempo $\Delta\tau$. Na figura 3.14, mostramos um exemplo de uma possível configuração do espaço CF_G do algoritmo, onde a espessura das flechas é proporcional a densidade das partículas. A linha descontínua é o verme, a partir do qual atualizações do tipo “desenha”/“apaga” são feitas, modificando o espaço de configurações e contribuindo para a estatística de G . Quando os extremos do verme se encontram, fechando a corrente, temos uma contribuição para a estatística de Z . Como no caso quântico, estimativas de *winding numbers* e da função de Green são facilmente extraídas pelo algoritmo Worm. Mais detalhes do algoritmo Worm para esse modelo podem ser encontrados na referência [58] e uma amostra do código em [59].

Figura 3.14: Espaço de configurações CF_G do algoritmo Worm para o modelo de correntes- J em uma rede 1D. O eixo das ordenadas representa a evolução no tempo imaginário e o das abscissas representa os sítios da rede. Uma corrente na direção espacial é interpretada como um tunelamento instantâneo, já uma corrente na direção temporal corresponde ao número de ocupação de um sítio durante um intervalo de tempo. A espessura das correntes está relacionada com o número de partículas ou buracos (correntes com sentido positivo e negativo, respectivamente, na direção do tempo imaginário), sendo que as linhas tracejadas tem ocupação zero. Nesta configuração temos, por exemplo, um bóson que ficou no sítio x_3 do tempo 0 a τ_1 e um buraco (criado no tunelamento instantâneo no tempo 0) que ficou no sítio x_2 do tempo 0 a τ_1 . O caminho aberto com os extremos denotados por I e M é o verme.

Capítulo 4

Átomos bosônicos ultrafrios em uma rede hexagonal

Neste capítulo, iremos estudar um gás bosônico ultrafrio diluído aprisionado em uma rede ótica 2D com simetria hexagonal (também referida como rede *‘honeycomb’*). Como vimos no capítulo 2, o modelo de Bose-Hubbard (BH) é um bom modelo para descrever esse sistema. Iniciamos com a caracterização de redes hexagonais e a revisão desse modelo levando em consideração a simetria da rede. Em seguida, apresentamos o diagrama de fases da transição superfluido-isolante de Mott (SF-MI). Finalizamos fazendo comparações desse diagrama com outros dois diagramas de fases: um obtido a partir de uma hamiltoniana de campo médio e um outro obtido com o modelo de BH considerando a rede ótica do sistema quadrada.

4.1 O modelo de Bose-Hubbard em redes hexagonais

Redes óticas hexagonais são construídas experimentalmente com a sobreposição de três feixes de lasers que se intersectam num ângulo de 120° , sendo cada feixe linearmente polarizado no plano da intersecção levando a formação de mínimos de potencial locais em uma estrutura hexagonal. Experimentos recentes realizaram redes óticas triangulares e hexagonais, e inclusive observam a transição de fases superfluido-isolante de Mott [20, 26].

A rede de Bravais de uma rede hexagonal tem dois sítios na base associada com cada ponto da rede, rotulamos um de A e outro de B (sítios em vermelho e azul na figura 4.1, respectivamente). Uma escolha de vetores primitivos é

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{3}{2}\hat{\ell}_i - \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{\ell}_j \\ \vec{a}_2 &= \sqrt{3}\hat{\ell}_j,\end{aligned}\tag{4.1}$$

com ℓ o tamanho da aresta do hexágono, definindo os vetores de translação dessa rede como

$$\vec{R}_A = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (4.2)$$

$$\vec{R}_B = \vec{R}_A + \vec{\delta}_1, \quad (4.3)$$

sendo n e m inteiros e $\vec{\delta}_1$ é um dos vetores que conectam primeiros vizinhos, que são definidos como

$$\vec{\delta}_1 = \ell \hat{i} \quad (4.4)$$

$$\vec{\delta}_2 = -\frac{\ell}{2} \hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} \ell \hat{j}$$

$$\vec{\delta}_3 = -\frac{\ell}{2} \hat{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} \ell \hat{j}.$$

Figura 4.1: Uma rede hexagonal, com os vetores primitivos $\vec{a}_i$ e os vetores que conectam primeiros vizinhos $\vec{\delta}_i$ representados. Temos dois sítios na base da rede de Bravais de uma rede hexagonal, rotulados no texto como A (em vermelho) e B (em azul).

Como vimos no capítulo 2, um gás de Bose diluído ultrafrio na presença de um potencial periódico é bem descrito pelo modelo de Bose-Hubbard. No entanto, temos que revisar a hamiltoniana do modelo apresentada na equação (2.2), pois algumas modificações decorrem do fato da rede de Bravais da rede hexagonal ter dois sítios na base. Para isso, começamos escrevendo a hamiltoniana de um gás de Bose fracamente

interagente no formalismo da segunda quantização

$$H = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) - \mu \right) \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{4\pi\hbar^2 a_S}{m} \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (4.5)$$

onde $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ e $\Psi(\mathbf{r})$ são operadores de campo bosônicos, V_{ext} é o potencial de aprisionamento, que no caso é apenas a rede ótica hexagonal, μ é o potencial químico, m é a massa de um átomo e a_S é o comprimento de espalhamento da onda-s. O segundo termo da hamiltoniana decorre da interação entre os átomos, aproximada por um potencial efetivo como o apresentado na equação (2.1).

Quando temos potenciais periódicos, sempre podemos escolher uma base de autoestados da hamiltoniana que obedeça ao teorema de Bloch. Numa rede hexagonal, no entanto, como a hamiltoniana do gás não comuta com o operador de translação $T_{\vec{\delta}_j}$, que descreve a translação por um vetor da rede que liga sítios vizinhos δ_j (definidos na equação (4.4)), devemos tratar as subredes compostas apenas por sítios do tipo A e apenas por sítios do tipo B separadamente, já que $[H, T_{\vec{R}_A}] = 0$ e $[H, T_{\vec{R}_B}] = 0$, sendo $T_{\vec{R}_A}$ e $T_{\vec{R}_B}$ os operadores de translação que descrevem a translação por um vetor da rede que liga sítios A e B , respectivamente. Assim, ao considerar apenas a rede formada pelos sítios A , podemos construir uma base de autoestados comum a H e a $T_{\vec{R}_A}$ que são funções de Bloch. Com uma sobreposição adequada dessas funções de Bloch, obtemos funções de Wannier que possuem a propriedade de serem localizadas nos sítios da subrede A e formam um conjunto completo ortogonal para diferentes sítios dessa subrede, sendo uma representação consistente com as aproximações feitas pelo modelo de Bose-Hubbard. Da mesma forma, podemos construir uma base de funções de Wannier centralizadas nos sítios B de maneira que não haja sobreposição com os sítios A .

Então, uma base adequada para a hamiltoniana desse sistema é a de funções de Wannier das subredes que compõem a rede hexagonal. Assim, expandimos os operadores de campo em funções de Wannier como

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \sum_{i \in A} w_A(\vec{r} - \vec{R}_i) a_i + \sum_{i \in B} w_B(\vec{r} - \vec{R}_i) b_i \\ \Psi^\dagger(\vec{r}) &= \sum_{i \in A} w_A^*(\vec{r} - \vec{R}_i) a_i^\dagger + \sum_{i \in B} w_B^*(\vec{r} - \vec{R}_i) b_i^\dagger, \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde a_i ($a_i^\dagger$) é um operador de aniquilação (criação) num sítio $i \in A$, b_i ($b_i^\dagger$) é um operador de aniquilação (criação) num sítio $i \in B$ e $w_{A(B)}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ é uma função de Wannier centralizada num sítio i , localizado em $\vec{R}_i$, pertencente a subrede formada pelos sítios $A(B)$. Substituindo a expansão em funções de Wannier (4.6) na hamiltoniana (4.5), após algumas manipulações e levando em conta as aproximações do modelo, obtemos

a hamiltoniana de Bose-Hubbard numa rede hexagonal

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i) + \frac{U}{2} \left(\sum_i \hat{n}_i^A (\hat{n}_i^A - 1) + \sum_i \hat{n}_i^B (\hat{n}_i^B - 1) \right) - \mu \left(\sum_i \hat{n}_i^A + \sum_i \hat{n}_i^B \right), \quad (4.7)$$

onde introduzimos os operadores número $\hat{n}_i^B = b_i^\dagger b_i$ e $\hat{n}_i^A = a_i^\dagger a_i$ e o símbolo $\langle i, j \rangle$ indica que a soma é apenas entre sítios vizinhos. A intensidade do termo de tunelamento da hamiltoniana é caracterizada pelo elemento de matriz de tunelamento entre sítios vizinhos i, j dado por

$$t = - \int d^3r w_{A(B)}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] w_{B(A)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (4.8)$$

e a intensidade da repulsão entre átomos num mesmo sítio é quantificada pelo elemento de matriz de interação de um único sítio

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a_S}{m} \int d^3r |w_{A(B)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^4. \quad (4.9)$$

A função de Green de dois corpos, utilizada para obtenção dos resultados deste capítulo, também deve ser reescrita em termos da base (4.6) para que possamos fazer uso da simetria de translação discreta da rede. No algoritmo que utilizamos (apresentado no capítulo 3) é conveniente utilizar a função de Green de *tempo imaginário* conhecida como função de Matsubara [60] definida como

$$G(\vec{r}, \tau; \vec{r}', \tau') = - \left\langle \mathcal{T}_\tau \Psi(\vec{r}, \tau) \Psi^\dagger(\vec{r}', \tau') \right\rangle, \quad (4.10)$$

em que utilizamos o *tempo imaginário* $t = -i\tau$, com τ uma variável auxiliar real com dimensão de tempo e os operadores de campo são definidos como¹

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, \tau) &= e^{\tau H} \Psi(\vec{r}) e^{-\tau H} \\ \Psi^\dagger(\vec{r}, \tau) &= e^{\tau H} \Psi^\dagger(\vec{r}) e^{-\tau H}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Também utilizamos nessa definição o *operador de ordenação temporal* $\mathcal{T}_\tau$ (definido anteriormente na equação (3.3)), que ordena operadores da direita para a esquerda em ordem crescente de τ . Deste modo, substituindo (4.6) em (4.10), encontramos que a função de Green numa rede hexagonal é uma matriz 2×2 representada na base das subredes [61, 62]

$$G = \begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

¹Note que $\Psi(\vec{r}, \tau)$ não é o adjunto de $\Psi^\dagger(\vec{r}, \tau)$ já que τ é real [60] e usamos unidades em que $\hbar = 1$.

com os elementos de matriz sendo

$$\begin{aligned} G_{AA}(i, \tau; j, \tau') &= \langle \mathcal{T}_\tau a_i(\tau) a_j^\dagger(\tau') \rangle \\ G_{AB}(i, \tau; j, \tau') &= \langle \mathcal{T}_\tau a_i(\tau) b_j^\dagger(\tau') \rangle \\ G_{BB}(i, \tau; j, \tau') &= \langle \mathcal{T}_\tau b_i(\tau) b_j^\dagger(\tau') \rangle \\ G_{BA}(i, \tau; j, \tau') &= \langle \mathcal{T}_\tau b_i(\tau) a_j^\dagger(\tau') \rangle. \end{aligned} \quad (4.13)$$

A implementação de redes hexagonais no código do algoritmo Worm é feita mudando os vizinhos de cada sítio (na rede quadrada temos 4 vizinhos e na hexagonal temos 3). Isto pode ser feito de duas maneiras: utilizando uma rede “parede de tijolos” ou utilizando uma rede triangular com sítios proibidos (veja a figura 4.2). O primeiro caso tem a vantagem de ter uma implementação simplificada, por outro lado é mais difícil recuperar a informação das distâncias entre os sítios da rede, o que dificulta o cálculo de observáveis como a função de Green, fator de estrutura ou implementar um corte no alcance de interações. Optamos por implementar o segundo caso, já que é um código mais facilmente aproveitado em outros problemas. Como consequência da escolha da grade (b), temos que o tamanho linear da rede triangular com sítios proibidos deve ser um múltiplo de 3.

Figura 4.2: (a) Rede parede de tijolos, que pode ser utilizada para simular uma rede hexagonal. (b) Rede triangular com sítios proibidos formando uma rede hexagonal. No código utilizamos a rede (b).

4.2 Resultados – A transição SF-MI em redes hexagonais

Nesta seção, delimitamos o diagrama de fases da transição superfluido-isolante de Mott (SF-MI) descrita no capítulo 2. Este diagrama corresponde ao plano $(t/U, \mu/U)$ em que a fronteira entre as fases superfluida e isolante de Mott é desenhada. Obtemos o diagrama de fases do primeiro lobo de Mott (cujo fator de preenchimento é $\rho = 1$) utilizando o algoritmo Worm para determinar o *gap* da fase MI a partir da função de Green de momento zero. O procedimento usado para extrair o *gap* foi descrito na seção 3.2. Resumidamente, este é extraído do decaimento exponencial da função de Green de momento zero com o tempo imaginário, i.e., medindo a inclinação do gráfico de $\ln G(\mathbf{p} = 0, \tau)$ por τ . Verificamos que os gráficos obtidos para todos os elementos de matriz G_{AA} , G_{AB} , G_{BA} e G_{BB} da função de Green da rede hexagonal têm a mesma inclinação e, portanto, suas estimativas para o *gap* do isolante coincidem. Por isso, para diminuir a sobreposição de curvas, apresentamos apenas os dados obtidos com um dos elementos de matriz da função de Green.

Iniciamos com uma análise da convergência da grade, em seguida, apresentamos o diagrama de fases final e estimamos a localização do ponto crítico pelo prolongamento das curvas que delimitam a fronteira da transição SF-MI. A comparação desse resultado com outros diagramas de fases obtidos de diferentes maneiras ajuda no entendimento da natureza da transição e da influência da simetria da rede. Apresentamos comparações do diagrama de fases obtido com o uso de funções de Green com um obtido a partir de uma aproximação de campo médio (CM) e com um outro em que a rede ótica do sistema é quadrada.

4.2.1 Obtenção do diagrama de fases utilizando a função de Green

Utilizamos condições periódicas de contorno para minimizar os efeitos de borda e fizemos um estudo sistemático dos efeitos do tamanho da grade no diagrama de fases da transição SF-MI. Analisamos efeitos de tamanho finito do sistema aumentando progressivamente o tamanho da rede até que a diferença entre resultados obtidos com grades diferentes seja desprezível. Inicialmente utilizamos dois tamanhos lineares de rede, a saber $L = 12$ e 24 , os resultados estão apresentados na figura 4.3, onde já observamos a convergência da grade para valores de t/U menores que 0.075 .

Figura 4.3: Estudo dos efeitos do tamanho finito da rede no diagrama de fases da transição SF-MI. Apresentamos dois lobos de Mott obtidos para tamanhos lineares da rede $L = 12$ e 24 . Note que as linhas estão praticamente sobrepostas até $t/U = 0.075$.

Na figura 4.4 (a), temos uma ampliação da região em que os efeitos do tamanho da grade são significativos, sendo que prolongamos um pouco mais a curva que delimita o lobo e aumentamos a sua discretização onde esses efeitos são mais pronunciados. Incluímos nesta figura uma simulação com tamanho linear da rede $L = 36$. Podemos observar uma convergência com uma grade $L = 24$ até $t/U = 0.085$, porém, a partir deste valor, o prolongamento do lobo com a grade $L = 36$ se fecha num ponto anterior ao prolongamento do lobo com $L = 24$. Esta região corresponde à região com *gaps* pequenos em que $\bar{\Delta} \sim t$ e, por estarmos muito próximos do ponto crítico, é onde os efeitos de tamanho da grade são maiores [16].

Uma amplificação ainda maior da região próxima do ponto crítico está na figura 4.4 (b) onde incluímos mais uma simulação com grade $L = 48$ e omitimos a curva da grade $L = 12$, já que vemos claramente o seu desacordo na figura anterior. Verificamos que a diferença entre as curvas $G_{AB} - L = 36$ e $G_{AB} - L = 48$ já é bem pequena se comparada com a diferença entre as curvas $G_{AB} - L = 24$ e $G_{AB} - L = 36$ e com o erro estatístico da curva da grade $L = 48$.

Concluimos que a escolha da grade $L = 24$ é suficiente para definir o lobo de Mott até a região de *gaps* pequenos, onde achamos necessário utilizar uma grade maior, já que a diferença entre as estimativas do ponto crítico a partir do prolongamento das

curvas que definem o lobo passa a ser apreciável. Escolhemos $L = 48$ pois a diferença com a curva prevista com a grade $L = 36$ já é pequena.

Figura 4.4: Ampliação da figura 4.3, sendo que prolongamos um pouco mais a fronteira da transição SF-MI. (a) Ampliação da região onde efeitos relacionados ao tamanho da grade são relevantes. Incluímos uma simulação com tamanhos lineares da rede $L = 36$. (b) Maior amplificação da região com *gaps* $\bar{\Delta}$ pequenos, em que $\bar{\Delta} \sim t$, (parte com maior discretização). Incluímos mais uma simulação com $L = 48$ e omitimos a curva da grade $L = 12$.

Na figura 4.5, temos o diagrama final do lobo com densidade por sítio $\rho = 1$, onde a ampliação destaca a região de *gaps* pequenos. Fora da região com *gaps* pequenos, esse diagrama de fases foi obtido utilizando uma temperatura $T/t = 0.05$, já nessa região, utilizamos uma temperatura $T/t = 0.025$. Erros estatísticos correspondem a 2 desvios padrões, sendo esse estimado a partir de 20 estimativas independentes de um ponto de fronteira do lobo de Mott. A figura 4.6 mostra os desvios padrões dos erros estatísticos de pontos selecionados (o erro de pontos intermediários foi encontrado por interpolação).

Figura 4.5: Diagrama de fases do lobo de Mott com fator de preenchimento $\rho = 1$. Em (a) vemos a região de *gaps* pequenos ($\bar{\Delta} \sim t$) ampliada. As barras de erro estão presentes, porém são visíveis apenas na região ampliada (a).

Figura 4.6: Erros estatísticos dos pontos da fronteira SF-MI da figura 4.5. A barra de erros é a incerteza na estimativa do desvio padrão com 20 pontos [63]. O erro de pontos intermediários foi encontrado por interpolação.

Podemos fazer uma estimativa da localização do ponto crítico pelo prolongamento das curvas que delimitam o primeiro lobo de Mott e compará-la com a literatura encontrada. Vemos na figura 4.5(a) que o ponto crítico está próximo de $(t/U)_c^{Worm} = 0.0865(5)$. A referência [25], utilizando método conhecido como *process chain*, estima o ponto crítico em $(t/U)_c^{pc} = 0.0863(17)$. Uma outra referência [28] encontra o resultado $(t/U)_c^{cgw} = 0.0870(5)$ utilizando o método de *cluster Gutzwiller*. O ponto crítico que estimamos encontra-se dentro da faixa de erro do valor encontrado por esses autores. Resumimos o encontrado na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Sumário das estimativas do valor do ponto crítico obtidos neste trabalho e na literatura disponível. O ponto crítico estimado com uma aproximação de campo médio (CM) é mostrado na seção seguinte.

	$(t/U)_c$
CM	0.0573(1)
Worm	0.0865(5)
Ref. [25]	0.0863(17)
Ref. [28]	0.0870(5)

Segue uma análise deste diagrama através de uma comparação com um diagrama de fases obtido a partir de uma aproximação de campo médio e com um obtido considerando uma rede quadrada.

4.2.2 Comparação com outros diagramas de fases

Comparamos o diagrama de fases da figura 4.5 com um diagrama construído a partir de uma aproximação de campo médio (CM) baseada nas referências [15,17].² Em suma, a aproximação de campo médio feita trata exatamente a interação e aproxima a energia cinética dos átomos na rede considerando o tunelamento sentindo por um sítio como uma média, ou seja,

$$\begin{aligned} b_i^\dagger &\rightarrow \langle b_i^\dagger \rangle + \delta b_i^\dagger \\ b_i &\rightarrow \langle b_i \rangle + \delta b_i. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Assim, temos que

$$b_i^\dagger b_j \approx \langle b_i^\dagger \rangle b_j + \langle b_j \rangle b_i^\dagger - \langle b_i^\dagger \rangle \langle b_j \rangle. \quad (4.15)$$

Como consequência desta aproximação a parte cinética da hamiltoniana de Bose-Hubbard se desacopla e, com isso, passamos a tratar os sítios da rede independentemente. A hamiltoniana de campo médio resultante dessa aproximação é a somatória de uma hamiltoniana de um corpo para cada sítio, $H^{CM} = \sum_i H_i^{CM}$, com

$$H_i^{CM} = -zt\phi(b_i^\dagger + b_i) + zt\phi^2 + \frac{U}{2}\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu\hat{n}_i, \quad (4.16)$$

em que $\phi = \langle b_i^\dagger \rangle = \langle b_i \rangle$, z é o número de coordenação da rede, definido como o número de primeiros vizinhos de um sítio, e $\hat{n}_i$ é o operador número.

No caso da rede ser hexagonal, cada sítio tem três primeiros vizinhos (i.e., $z = 3$) e para determinar a fronteira entre as fases superfluida e isolante de Mott utilizamos a densidade por sítio ρ . O diagrama de fases à temperatura zero obtido fazendo uso dessa aproximação de campo médio encontra-se na figura 4.7 junto com o diagrama apresentado na figura 4.5 obtido com o algoritmo Worm. Assim como no estudo considerando a rede ótica quadrada [43], concluímos que a aproximação de campo médio fornece uma boa descrição qualitativa do diagrama, estando a região em que a interação intrassítio U é dominante sobre o tunelamento t em maior concordância com os cálculos de Monte Carlo quântico. Verificamos uma maior sobreposição do cálculo de campo médio com o do Worm na região em que t/U é igual a zero até aproximadamente 0.025. O ponto mais extremo do lobo de Mott previsto pelo diagrama de fases de campo médio é

$$P_c^{CM} = (0.0573(1), 0.42(1)), \quad (4.17)$$

o valor de $(t/U)_c$ está subestimado em 34% em relação a estimativa feita com o diagrama de fases obtido com o Worm.

²Para maiores detalhes da aproximação de campo médio feita e da construção do diagrama de fases veja a referência [43].

Figura 4.7: Comparação entre o diagrama de fases do modelo de Bose-Hubbard considerando uma rede hexagonal ($z = 3$) obtido usando uma aproximação de campo médio (em linha sólida vermelha) e o obtido com o uso do algoritmo Worm (figura 4.5). Temos uma concordância maior entre os diagramas na região em que $U \gg t$. O ponto mais extremo do lobo obtido pelo campo médio está localizado em $P_c^{CM} = (0.0573(1), 0.42(1))$.

Um dos objetivos deste capítulo é ver a diferença entre os diagramas de fases obtidos com as redes quadrada e hexagonal. Essa comparação encontra-se na figura 4.8. O diagrama de fases da rede quadrada foi extraído da referência [14], onde a fronteira entre as fases SF-MI foi obtida com o mesmo protocolo usado aqui, i.e., determinando o *gap* do isolante de Mott utilizando o algoritmo Worm a partir da função de Green de momento zero. O lobo de Mott do caso hexagonal cobre uma área maior do plano $(t/U, \mu/U)$ do que o do caso quadrado, indicando uma maior estabilidade da fase de Mott na rede hexagonal. Esse resultado pode ser previsto com a análise de campo médio, já que o número de coordenação da rede hexagonal é menor.

A hamiltoniana de campo médio prevê uma relação simples entre as hamiltonianas de sistemas que diferem pela geometria da rede ótica, definida pela razão entre o número de coordenação z dessas redes, que na rede quadrada é igual a 4 e na rede hexagonal é igual a 3. Podemos utilizar este resultado para quantificar a diferença entre as duas geometrias. Na figura 4.8 à direita, mostramos o diagrama de fases da rede quadrada com os dados do eixo das abscissas (t/U) multiplicados por $4/3$, com o diagrama de fases da rede hexagonal. Como o esperado, a lei de escala funciona bem na região de validade da aproximação de campo médio, em que U domina sobre t , no entanto, apenas uma parte dos diagramas não se sobrepõem. O número de coordenação expressa uma diferença geométrica entre as duas redes, a coincidência entre os lobos na

figura 4.8 à direita indica quanto da diferença entre os lobos da figura 4.8 à esquerda é geométrica. No entanto, a região mais próxima do extremo do lobo, em que a diferença entre os dois diagramas é mais pronunciada, mostra que as flutuações do campo na rede hexagonal não podem ser simplesmente escalonadas pelo número de vizinhos da rede quadrada.

Figura 4.8: (À esquerda) Diagramas de fases do modelo de Bose-Hubbard obtidos com o uso do algoritmo Worm em uma rede ótica quadrada (curva PRA 77 015602) e em uma rede ótica hexagonal. (À direita) Mesmos diagramas que a figura ao lado, porém os dados obtidos considerando uma rede quadrada estão multiplicados por um fator igual a $4/3$ (curva $(\text{PRA 77 015602}) \cdot 4/3$), que é a razão entre o número de coordenação da rede quadrada e o número de coordenação da rede hexagonal.

Capítulo 5

Sistemas bosônicos desordenados

Neste capítulo, apresentamos um estudo numérico da classe de universalidade da transição de fases superfluido-vidro de Bose (SF-BG). Iniciamos com a revisão do modelo de Bose-Hubbard desordenado e a descrição do diagrama de fases do estado fundamental previsto por esse modelo. Em seguida, apresentamos o problema abordado neste capítulo, que é a controvérsia em que as relações de escala convencionais para a classe de universalidade SF-BG em três dimensões são questionadas, a saber, $z = d$ e $\phi = z\nu$, com $\nu > 2/d$, sendo d a dimensão do sistema e z , ν e ϕ os expoentes críticos dinâmico, do comprimento de correlação e da temperatura crítica, respectivamente. Utilizamos o algoritmo Worm em sua versão clássica e quântica para estudar este problema. Os resultados apresentados neste capítulo estão publicados em [42].

5.1 O modelo de Bose-Hubbard desordenado

O modelo de Bose-Hubbard desordenado (DBH) foi inicialmente estudado pelo artigo de Fisher *et al.* [11]. A hamiltoniana deste modelo é a de Bose-Hubbard (*cf.* equação (2.2)) com desordem no potencial químico,

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} b_i^\dagger b_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \sum_i (\mu + \epsilon_i) \hat{n}_i, \quad (5.1)$$

em que t é o tunelamento entre sítios vizinhos, U é a interação intrassítio, μ é o potencial químico e ϵ_i é um potencial desordenado limitado com distribuição uniforme no intervalo $[-\Delta, \Delta]$ que é não correlacionado espacialmente. Consideramos que a desordem presente na rede é congelada (estática), i.e., as impurezas ou defeitos não mudam, nem se movem, durante escalas de tempo típicas de experimentos [64].

Como vimos na seção 2.2, quando consideramos a hamiltoniana de Bose-Hubbard sem desordem ($\epsilon_i = 0$), a competição entre o termo de interação e o termo de tunelamento estabelece duas fases no diagrama de fases do estado fundamental do sistema: uma é o isolante de Mott (MI), que acontece quando o termo de interação domina sobre o de tunelamento; e a outra é a fase superfluida (SF), que acontece no regime

oposto, quando o termo de tunelamento domina sobre o de interação. A fase de Mott possui um *gap* de energia e, portanto, é incompressível e isolante, já a fase superfluida não possui um *gap*, é compressível e caracterizada por um regime de deslocalização das partículas na rede. Quando introduzimos desordem no sistema, porém, uma terceira fase, conhecida como vidro de Bose (BG), se estabelece no diagrama de fases intermediando a fase isolante de Mott e a superfluida. A fase vidro de Bose não possui um *gap* de energia e é compressível, mas ainda assim, é um isolante devido aos efeitos de localização da desordem.

Figura 5.1: Esboço do diagrama de fases do estado fundamental do modelo de Bose-Hubbard desordenado em que se estabelecem três fases: a isolante de Mott (MI), a superfluida (SF) e a vidro de Bose (BG). Em linha tracejada vermelha e indicado por flechas é mostrado como as fronteiras entre as fases se modificam com o aumento da desordem no sistema. Note que para uma desordem suficientemente forte ($\Delta \geq U/2$) a fase de Mott é completamente destruída. Linha tracejada-pontilhada: A fronteira entre as fases SF-BG se desloca para intensidades de tunelamento cada vez maiores a medida em que a densidade do sistema se aproxima de zero, já que tunelamentos cada vez maiores são requeridos para que uma fase estendida se estabeleça no sistema.

Na figura 5.1, temos um esboço do diagrama de fases à temperatura zero da hamiltoniana (5.1) para um dado valor do limite Δ da distribuição do potencial desordenado. Assim como no caso puro (i.e., sem desordem), podemos obter uma descrição qualitativa desse diagrama de fases a partir de uma análise da hamiltoniana [11].

No limite em que o termo de tunelamento é zero ($t = 0$), a hamiltoniana se desacopla e podemos analisar individualmente a energia dos sítios da rede. Fazendo isso, encontramos que a fase isolante de Mott se estabelece na região do diagrama de fases

em que o potencial químico μ vai de $U(n-1)+\Delta$ a $Un-\Delta$, com $n = 1, 2, 3, \dots$, região na qual cada sítio tem exatamente n partículas e há um *gap* de energia para a excitação de uma partícula (ou buraco) na rede. Neste limite, o *gap* do isolante de Mott é igual a $U - 2\Delta$ e os lobos de Mott estão centralizados em $U(n - 1/2)$ (note que este valor é independente de Δ). Entre os lobos de Mott com fator de preenchimento n e $n + 1$, teremos alguns sítios com n e outros com $n + 1$ partículas dependendo se o potencial desordenado de um sítio ϵ_i for menor ou maior que $Un - \mu$, sendo que o número de sítios com $n + 1$ partículas aumenta com μ . O estado agora é compressível, no entanto, como $t = 0$, não há correlação de longo alcance e, portanto, não há superfluido. Então, a fase que se estabelece nesta região do diagrama é o vidro de Bose.

Agora para $t > 0$, ainda temos lobos de Mott, só que encolhidos. Como no caso puro, a fase de Mott persiste enquanto a energia cinética ganha por adicionar uma partícula (ou um buraco) e deixá-la tunelar pela rede, não compensar a energia potencial necessária para a adição desta partícula (ou buraco) na rede. No caso em que t é ligeiramente positivo a partir da fase vidro de Bose, em que já há regiões dopadas com partículas (ou buracos), o tunelamento de partículas será propício. A partir do momento em que o tunelamento se torna favorável nessas duas situações, no entanto, as partículas extras, que no caso limpo se propagavam em cima de um fundo MI, agora são afetadas pela desordem e os estados de partícula-única efetivos de mais baixa energia são localizados [11, 65], portanto, o estado permanece isolante e passamos para a fase vidro de Bose. O BG se forma à medida que aglomerados de sítios do sistema têm uma desordem suficientemente forte para destruir localmente o *gap* do isolante de Mott de modo que regiões compressíveis se desenvolvem. Para valores suficientemente grandes de t ou do número de partículas, os estados de mais baixa energia se tornam estendidos e o sistema sofre uma transição para a fase superfluida.

Indicado na figura 5.1 por uma linha tracejada vermelha, temos como o diagrama de fases é modificado por um aumento da intensidade de desordem Δ : o vidro de Bose se estabelece em um intervalo maior de parâmetros, destruindo as fases superfluida e isolante de Mott. Note que quando a intensidade de desordem é forte o suficiente ($\Delta \geq U/2$) a fase Mott é completamente destruída. No caso de um potencial de desordem com uma distribuição não limitada (por exemplo, uma distribuição gaussiana), o diagrama de fases é qualitativamente igual ao caso em que a desordem é forte, já que neste caso haverá sítios com valores arbitrariamente grandes de $|\epsilon_i|$, com um número arbitrariamente grande de partículas.

É interessante ver também um diagrama de fases em que a intensidade de desordem Δ é um parâmetro livre. Neste caso, consideramos sistemas comensuráveis, i.e., sistemas com um número de partículas que é um múltiplo inteiro do número de sítios da rede, (garantindo assim a existência da fase Mott) e apenas dois parâmetros livres: Δ/t e U/t . Antes, porém, apresentamos o teorema das inclusões [66, 67], que a partir de considerações gerais a respeito do potencial desordenado chega a conclusões que nos permitem delinear as características de tal diagrama de fases qualitativamente. Inclusive, a possibilidade de uma transição direta entre a fase superfluida e a isolante de Mott na presença de desordem também é descartada por esse teorema, uma questão

que foi muito debatida. Apesar de, inicialmente, a possibilidade da transição direta SF-MI acontecer na presença de desordem ter sido descartada por ser extremamente improvável [11], muitos trabalhos detectavam essa transição.

O teorema das inclusões diz que, em um sistema com *desordem genérica* e limitada, nas proximidades de uma linha de transição *genérica* entre duas fases A e B, sempre podemos encontrar inclusões arbitrariamente grandes da fase A na fase B e vice-versa. Aqui *desordem genérica* é qualquer distribuição de desordem cuja densidade de probabilidade é não zero dentro do intervalo limitado estabelecido para essa distribuição, i.e., $P(\epsilon) \neq 0$ para qualquer $\epsilon \in [-\Delta, \Delta]$, e uma *transição genérica* é uma transição de fases cujo ponto crítico é sensível às características da desordem como a dispersão, os momentos da distribuição, etc.

Figura 5.2: Apresentamos à direita uma linha de transição entre uma fase A e uma fase B que é genérica. Denotamos por ζ o conjunto das características do potencial de desordem, excluindo o limite Δ do potencial desordenado. À esquerda, temos diferentes distribuições de potenciais desordenados, caracterizados por diferentes conjuntos ζ_0 , ζ_1 e ζ_2 . No eixo das abscissas, temos a intensidade de desordem Δ , que é o parâmetro de controle utilizado para induzir a transição. (Figura extraída de [68].)

Na figura 5.2 temos ilustrada a transição entre uma fase A e uma fase B induzida variando a intensidade de desordem Δ . As fases estão separadas por uma linha de transição que depende das características da desordem, ou seja, $\Delta_c = \Delta_c(\zeta)$, em que definimos ζ como o conjunto de parâmetros que descreve o modelo de desordem em consideração, a não ser pelo limite Δ . Então, por exemplo, na figura 5.2, ζ_1 é o conjunto de parâmetros que caracteriza uma distribuição uniforme, ζ_2 caracteriza uma distribuição de desordem muito dispersa e ζ_0 caracteriza uma distribuição pouco dispersa. Considerando a fase A como sendo a fase superfluida e a fase B como uma fase isolante, na distribuição mais acima na figura, teremos um sistema não tão desordenado e, portanto, um Δ_c maior é necessário para destruir as correlações de longo alcance da

fase superfluida, se comparado com o Δ_c de uma distribuição uniforme. No entanto, se considerarmos a distribuição ilustrada mais abaixo, teremos um sistema bastante desordenado e um Δ_c não tão grande bastará para destruir a fase SF.

Para ilustrar esse teorema, comecemos na fase B (disco cheio mais à direita na figura 5.2), com um conjunto de parâmetros ς_1 que caracteriza a desordem presente no sistema. Então, o teorema diz que inclusões da fase A estarão presentes. É imediato ver isso já que sempre há uma probabilidade finita de um domínio $\{r\}$ desse sistema com $\epsilon_r \in [-\Delta', \Delta']$, tal que $\Delta' < \Delta_c(\varsigma_1)$, em que todo este domínio está na fase A (disco vazio na altura de ς_1 na figura 5.2). Por outro lado, se iniciarmos na fase A (disco cheio mais à esquerda na figura 5.2), mas ainda com o mesmo conjunto ς_1 , o teorema afirma que haverá inclusões da fase B. O argumento anterior já não pode ser usado aqui, no entanto, sempre haverá uma probabilidade finita, apesar de rara, de termos domínios $\{r\}$ desse sistema com $\epsilon_r \in [-\Delta, \Delta]$, onde o potencial de desordem poderia ter sido gerado por uma distribuição caracterizada por um conjunto de parâmetros diferentes, e.g. ς_2 , cujo ponto crítico é tal que $\Delta_c(\varsigma_2) < \Delta < \Delta_c(\varsigma_1)$ e este domínio está na fase B (disco vazio na altura de ς_2 na figura 5.2).

A principal consequência deste teorema é que, se a fase B (A) não tem um *gap* de energia, então a fase A (B) também não deve possuir um *gap*, já que domínios finitos de B (A) estarão presentes, fazendo a fase A (B) necessariamente sem *gap*. Portanto, concluímos que uma transição direta entre um superfluido e um isolante de Mott é proibida na presença de qualquer intensidade de desordem.

Entretanto, há uma aparente contradição nesta conclusão, pois esta proíbe também a transição vidro de Bose–isolante de Mott. A única possibilidade, então, é que a linha de transição MI-BG não depende de ς (veja a figura 5.3). De fato, a linha de transição MI-BG é determinada pela condição $\Delta_c = \bar{\Delta}/2$, onde $\bar{\Delta}$ é o *gap* de energia para uma excitação partícula-buraco em um sistema limpo [65, 67]. Isso porque, se $\Delta < \bar{\Delta}/2$, a fase permanece isolante de Mott, já que não há possibilidade de uma excitação partícula-buraco sem pagar uma energia finita. Mas, se $\Delta > \bar{\Delta}/2$, flutuações estatísticas garantem a existência de regiões homogêneas arbitrariamente grandes, apesar de raras, em que a desordem imita um deslocamento uniforme do potencial químico que excede o *gap* de partículas (ou buracos), isto é, teremos uma transição do tipo Griffiths [64]. Note que, mesmo se a dispersão da distribuição de desordem for muito próxima de zero, o ponto de transição não muda. Além disso, ao nos aproximarmos da transição a partir do BG, o sistema torna-se cada vez mais parecido com um sistema puro em escalas cada vez maiores. Então, quando Δ é muito próximo de Δ_c , a fase B aparenta ser idêntica a fase A, exceto por conter regiões raras e bem separadas de um estado do sistema puro sem *gap*. Portanto, precisamos de sistemas (proibitivamente) grandes para poder ver esta transição de fases numericamente [67].

Figura 5.3: Indicamos uma linha de transição entre uma fase A e uma fase B que não depende do conjunto de características ς que definem o potencial de desordem do sistema. (Contrastar com a figura 5.2.) A linha de transição MI-BG é deste tipo.

A figura 5.4 mostra o diagrama de fases para a hamiltoniana (5.1) em 3D no espaço de parâmetros $(\Delta/t, U/t)$ obtido na referência [67] com o uso do algoritmo Worm, obedecendo todas as características qualitativas impostas pelo teorema das inclusões.

Figura 5.4: Diagrama de fases comensurável ($\rho = 1$) do estado fundamental da hamiltoniana DBH em 3D com a intensidade de desordem Δ como parâmetro livre. (Figura extraída da referência [67].)

5.2 A controvérsia na classe de universalidade superfluido–vidro de Bose

Fisher *et al.* [11] desenvolveram a teoria de escala fenomenológica da transição de fases superfluido–vidro de Bose que leva a algumas previsões fundamentais, embora ainda bastante debatidas. Na presença de desordem, podemos utilizar o critério de Harris [64, 69] para determinar se um ponto crítico de um sistema limpo (sem desordem) é estável à introdução de desordem no sistema (congelada, não correlacionada ou com correlação de curto alcance), i.e., se o comportamento crítico da transição existente muda na presença de desordem. Este critério afirma que, se o expoente crítico do comprimento de correlação do sistema sem desordem ν_{limpo} vezes a dimensão do sistema d for maior que 2, o ponto crítico é estável e o comportamento crítico é o mesmo que o do sistema limpo. Caso contrário, se $\nu_{limpo}d < 2$, então o ponto crítico será afetado pela desordem e o caráter da transição deve mudar. Chayes *et al.* [70] mostraram que a mesma inequação é válida para o expoente crítico do comprimento de correlação do sistema desordenado ν_{sujo} , i.e., nas proximidades do ponto crítico no sistema desordenado vale

$$\nu_{sujo} \geq 2/d. \quad (5.2)$$

Como vimos no capítulo 2, a transição SF-MI à densidade constante em $3D$ faz parte da classe de universalidade do modelo XY em $4D$. A dimensão crítica superior dessa transição é $d_c^+ = 3$ e portanto $\nu_{limpo} = 1/2$ nesse caso. Logo, na presença de desordem, o critério de Harris não é satisfeito e o comportamento crítico é modificado. A transição que ocorre no lugar é a transição SF-BG e, como veremos na subseção 5.3.2, neste caso¹ $\nu = 0.88(5)$, satisfazendo o critério de Harris.

Podemos usar (5.2) para estimar a dimensão crítica superior da transição SF-BG, já que o expoente de campo médio para ν é igual a $1/2$, temos que $d_c^+ \geq 4$. Portanto, para todas as dimensões $d < 4$, podemos supor o escalonamento convencional, com a forma de escala da parte singular da densidade de energia livre dada por [11]

$$f_s \approx \delta^{\nu(z+d)} \tilde{f}(\xi_\tau/\beta) \approx \delta^{\nu(z+d)} \tilde{f}(T\delta^{-\nu z}), \quad (5.3)$$

em que $L_\tau = \beta$ é o tamanho da dimensão temporal, sendo $\beta = 1/k_B T$, com T a temperatura e k_B a constante de Boltzmann, e $\tilde{f}$ é uma função de escala. Usamos na equação acima a relação de escala entre o comprimento de correlação na direção espacial ξ e na direção do tempo imaginário ξ_τ dada por

$$\xi_\tau \propto \xi^z \propto \delta^{-z\nu}, \quad (5.4)$$

que define o expoente crítico do comprimento de correlação ν e o expoente crítico dinâmico z . Aqui, $\delta = (g - g_c)/g_c$ é a distância até o ponto crítico g_c , sendo g o parâmetro externo usado para induzir a transição.

¹A partir de agora omitimos o subscrito “sujo/limpo”, pois usaremos apenas ν_{sujo} .

A função de escala $\tilde{f}(u)$, deve ter uma singularidade em algum valor finito de seu argumento $u_c = T_c \delta^{-\nu z}$, correspondendo à linha de transição crítica-clássica que ocorre para $T > 0$. Então temos que o desaparecimento da temperatura crítica T_c da transição superfluido-líquido normal (SF-NL) ao nos aproximarmos do ponto crítico quântico, caracterizado pelo expoente crítico da temperatura crítica ϕ , é

$$T_c \propto \delta^\phi \propto \delta^{z\nu}, \quad (5.5)$$

definindo, assim, a lei de escala

$$\phi = z\nu. \quad (5.6)$$

Na figura 5.5 temos um esboço do decaimento da temperatura crítica dessa transição.

Figura 5.5: Esboço do decaimento da temperatura crítica da transição superfluido-líquido normal (SF-NL), nas proximidades do ponto crítico quântico da transição superfluido-vidro de Bose (SF-BG), ao variar um parâmetro de controle g .

Considerando ambos o critério de Harris (5.2) e a relação entre o expoente crítico dinâmico e a dimensão espacial do sistema,

$$z = d, \quad (5.7)$$

temos o seguinte limite inferior para o expoente crítico da temperatura crítica

$$\phi \geq 2. \quad (5.8)$$

A lei de escala (5.7) é determinada a partir da forma de escala da compressibilidade κ . Fazendo uma análise dimensional a partir da definição de compressibilidade

$$\kappa = \frac{\partial \rho}{\partial \mu} = (\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2) \frac{\beta}{L^d}, \quad (5.9)$$

sendo L^d o volume do sistema d -dimensional e ρ a densidade por sítio, encontramos que a compressibilidade se escala como

$$\kappa \propto \frac{\xi_\tau}{\xi^d} \propto \delta^{\nu(d-z)}, \quad (5.10)$$

em que usamos $\beta = L_\tau \sim \xi_\tau$, $L \sim \xi$ e, novamente, a equação (5.4). A compressibilidade deve ser finita no ponto crítico, já que é finita em ambas as fases vidro de Bose e superfluida, com isso, concluímos que $z = d$. De fato, nas proximidades de um ponto crítico quântico a compressibilidade pode ser decomposta formalmente em uma parte regular (não singular) e uma parte crítica $\kappa = \kappa_a(\delta) + \kappa_s(\delta)$, com $\kappa_s \propto \delta^{\nu(d-z)}$. Podemos especular que $\kappa(\delta = 0)$ é finito devido a parte regular, enquanto a parte crítica vai a zero em $\delta = 0$ (i.e., $z < d$). No entanto, essa possibilidade é imediatamente descartada pela observação de que κ finito no vidro de Bose é devido a estados de partícula-única e buraco-único localizados, enquanto que estes estados não existem na fase superfluida. Então, podemos concluir que $\kappa(\delta = 0)$ é finito somente devido aos modos críticos e $z = d$ [68].

No entanto, recentemente, experimentos em sistemas magnéticos desordenados [39], assim como simulações de Monte Carlo quântico do antiferromagneto desordenado com spin $S = 1$ e anisotropia de íon único relacionado [40], estimam valores para ambos os expoentes ϕ e ν que violam fortemente a lei de escala (5.6) e o limite inferior encontrado em (5.8). Seus resultados encontram $\phi = 1.1(1)$ e $\nu = 0.75(10)$ ($d=3$). Esses resultados questionam a teoria de escala da classe de universalidade superfluido-vidro de Bose que há muito foi estabelecida e este é o problema que abordamos.

5.3 Resultados – A classe de universalidade SF-BG em 3D

Nesta seção apresentamos nosso estudo da classe de universalidade SF-BG em 3D. Mais especificamente, estimamos os expoentes críticos envolvidos na controvérsia para o caso tridimensional referida na seção anterior, a saber ϕ e ν . Nossos resultados foram obtidos com simulações de Monte Carlo quântico do modelo de Bose-Hubbard desordenado no limite de caroço-duro (hc-DBH)

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} b_i^\dagger b_j - \sum_i (\mu + \epsilon_i) \hat{n}_i, \quad (5.11)$$

que é a equação (5.1) com uma restrição do número máximo de partículas por sítio igual a um, ou seja, $n_i = 0$ ou 1 . Essa restrição vem do limite de caroço duro usado, em que consideramos que a intensidade da repulsão entre átomos num mesmo sítio U é infinita. Nesse limite, esse modelo pode ser mapeado em uma hamiltoniana de spin-1/2 XXZ que descreve a física de um magneto quântico [71], similar ao sistema estudado nas referências [39,40]. O algoritmo utilizado em nossas simulações é o algoritmo Worm quântico descrito no capítulo 3.

Iniciamos nosso estudo revisando os resultados encontrados em [39,40], que geraram a controvérsia em 3D. Os resultados dessa revisão nos levaram a concluir que esses estudos foram realizados fora da região crítica quântica e que o comportamento crítico genuíno estava simplesmente fora do alcance. Isso porque a temperatura de transição

T_c fica abaixo do limite de detecção antes que os dados se tornem adequados para a estimativa de ϕ . Por isso, mudamos de estratégia: nos aproximamos da transição SF-BG aumentando a intensidade de desordem Δ à densidade constante, ao invés de utilizar o potencial químico μ , e estimamos os expoentes críticos dessa classe de universalidade com esse novo protocolo. A estimativa de expoentes críticos é bastante exigente computacionalmente, especialmente em 3D e em sistemas desordenados. No entanto, propriedades universais de um ponto crítico quântico em d dimensões podem ser igualmente estudadas em um sistema resultante de um mapeamento clássico para $(d+1)$ dimensões (em que a dimensão extra é o tempo imaginário), que possui algoritmos mais eficientes que o sistema quântico [57]. O equivalente clássico mais simples do modelo hc-DBH em 3D é o modelo de correntes- J em $(3+1)$ dimensões [45]. A hamiltoniana desse modelo é

$$\beta H_J = K \sum_{\mathbf{n}, \alpha} J_{\mathbf{n}, \alpha}^2 - \sum_{\mathbf{n}} (\mu + \epsilon_{\mathbf{r}}) J_{\mathbf{n}, \tau}, \quad (5.12)$$

em que $K \propto 1/t$, sendo t o tunelamento, μ o potencial químico e $\epsilon_{\mathbf{r}}$ um potencial aleatório não correlacionado uniformemente distribuído no intervalo $[-\Delta, \Delta]$, que depende apenas da coordenada espacial $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Aqui, $J_{\mathbf{n}, \alpha}$ são correntes $\mathbf{J}_{\mathbf{n}}$ inteiras não divergentes definidas nas ligações de um sítio $\mathbf{n}$, em que $\mathbf{n} = (x, y, z, \tau)$ é o índice do sítio, na direção $\alpha \in \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{\tau}\}$ de uma rede hipercúbica espaço-temporal.

Simulamos esse modelo num limite correspondente ao limite de caroço-duro para bósons (i.e., correspondente a um sistema com spins $1/2$), o que significa restringir os valores das correntes $J_{\mathbf{n}, \alpha \neq \tau}$ a $-1, 0$ e 1 e $J_{\mathbf{n}, \alpha = \tau}$ a 0 e 1 [58]. Utilizamos o algoritmo Worm clássico [48] nas simulações desse modelo (ver descrição na seção 3.4). Para confirmar a consistência dos nossos resultados, verificamos se o comportamento crítico previsto com o modelo de correntes- J é obedecido pelo hc-DBH. Por fim, apresentamos uma estimativa do expoente crítico do parâmetro de ordem β com ambos os protocolos.

A estimativa da temperatura T_c de transição SF-NL foi feita com uma análise de escalonamento de tamanho finito (FSS) das flutuações da média do quadrado dos *winding numbers* $\langle W^2 \rangle$ (ver seção 3.3). Por se tratar de uma transição à temperatura finita, mesmo que próxima de um ponto crítico quântico, o comportamento crítico assintótico é dominado pelas flutuações térmicas [57, 64]. Assim, a forma de escala de $\langle W^2 \rangle$ fica

$$\langle W^2 \rangle = \tilde{f}(L^{1/\nu} \delta). \quad (5.13)$$

Nessa estimativa, usamos o valor $\langle W^2 \rangle_c = 0.516(2)$ da classe de universalidade U(1) em 3D [68, 72] para auxiliar na localização de T_c no limite termodinâmico. Neste caso, $\nu_{limpo} = 0.6717(1)$ [46], então, segundo o critério de Harris, temos que a desordem não muda o comportamento crítico dessa transição.

Como se trata de um sistema com desordem congelada, para estimar uma quantidade física do sistema, além da média estatística, temos que tomar a média sobre diferentes realizações de desordem do potencial desordenado [35]. O número de realizações de desordem usadas para estimar $\langle W^2 \rangle$ nos cálculos usando o modelo hc-DBH

varia de 5000 nas temperaturas mais altas a 500 nas temperaturas mais baixas e o tamanho linear usado vai de $L = 8$ a $L = 64$. Já nos cálculos usando o modelo de correntes- J tomamos a média sobre 5000 a 20000 realizações de desordem em cada ponto e os tamanhos de sistemas usados vão de $N_s = 2 \times 12^6$ a $N_s = 2 \times 20^6$ (chegamos no limite que um cluster moderno pode lidar num tempo razoável, considerando o número de realizações de desordem usado na estimativa de cada ponto). Barras de erros são dominadas pelas flutuações nas diferentes realizações de desordem. Como a simetria da rede não influencia no comportamento crítico de um sistema, usamos uma rede quadrada nas simulações desse capítulo.

5.3.1 Revisitando resultados anteriores

Nos artigos [39, 40], o expoente crítico ϕ , que descreve o comportamento da temperatura de transição T_c nas proximidades do ponto crítico quântico da transição SF-BG, foi estimado utilizando um campo magnético para induzir essa transição no sistema. No mapeamento da hamiltoniana de spin-1/2 para o modelo de hc-DBH [71], o parâmetro de controle equivalente ao campo magnético no sistema bosônico é o potencial químico μ . Assim, podemos comparar os resultados obtidos nesta subseção (que utilizam μ como parâmetro de controle) diretamente com os resultados obtidos em [39, 40].

Nossos resultados para $T_c(\mu)$ obtidos com o modelo hc-DBH estão na figura 5.6. A transição SF-BG foi induzida fixando a intensidade de desordem em $\Delta/t = 16$ e diminuindo o potencial químico, de maneira similar ao protocolo empregado em [39, 40]. Estimamos o ponto crítico T_c para cada ponto μ com uma análise de FSS de $\langle W^2 \rangle$, com o parâmetro de controle $g = T$ (ver detalhes na página 66). Na figura, temos um grande intervalo de parâmetros obedecendo a lei de potência $T_c \propto (\mu - \mu_c)^{1.1}$ encontrada nos artigos referidos no início desta subseção. No entanto, com dados mais precisos (o tamanho do sistema que usamos é ao menos uma ordem de magnitude maior que o usado nos estudos anteriores), vemos que os pontos mais próximos do ponto crítico quântico têm um desvio desta lei de potência consideravelmente fora de suas barras de erros, revelando que a maioria dos pontos na figura 5.6 ainda não deve estar no regime crítico.²

²O último ponto desta curva exigiu um tempo computacional muito maior para convergência dos dados, por isso utilizamos o que o poder computacional disponível nos permitiu: apenas 100 realizações de desordem foram usadas na média na desordem e tamanhos de rede $L = 32$ e $L = 48$. Esse ponto foi calculado após a publicação da primeira versão do nosso artigo [42] no arXiv, motivados pelo comentário feito em [73] que questionava se havia de fato um desvio significativo do ponto em $\mu/t = -14.3$ do comportamento em que $\phi = 1.1(1)$ observado no restante dos pontos. Quando obtivemos esse último ponto, ficou claro o indício de que a maioria dos pontos do gráfico 5.6 não está no regime crítico.

Figura 5.6: Temperatura crítica T_c da transição superfluido–líquido normal (SF-NL) versus o potencial químico μ , sendo t o tunelamento, para o modelo de hc-DBH. A linha contínua é um ajuste com uma lei de potência igual a $\phi = 1.1$. Na caixa temos ampliado a região de temperaturas mais baixas. Aqui a intensidade de desordem foi fixada em $\Delta/t = 16$.

Verificando a variação da densidade no intervalo de temperaturas mais baixas, encontramos uma forte dependência da densidade com o potencial químico $n(\mu)$ (figura 5.7), confirmando a nossa suspeita e nos levando a concluir que o decaimento da temperatura crítica T_c está sendo fortemente influenciado pela diminuição da densidade e não é devido aos efeitos de localização da desordem. Portanto, concluímos que a lei de potência $\phi = 1.1(1)$ é na verdade um comportamento não universal.

Para verificar o verdadeiro comportamento crítico da transição SF-BG, a densidade na região crítica deve ser próxima da densidade no ponto crítico, i.e.,

$$n(\mu) - n(\mu_c) \ll n(\mu_c). \quad (5.14)$$

Essa condição é claramente violada na maioria dos pontos usados para estabelecer a lei $\phi = 1.1(1)$. Ademais, essa condição faz com que a região crítica seja muito estreita e inacessível, considerando o poder de computação atual.

Figura 5.7: Dependência da densidade de partículas por sítio n no ponto crítico térmico do modelo (5.11), em função do potencial químico μ para $\Delta/t = 16$. A linha pontilhada é um ajuste linear.

Porque os problemas atuais com as relações de escala provavelmente são originados da forte dependência da densidade com o potencial químico quando esse é usado como parâmetro de controle, mudamos de abordagem. Estudamos a criticalidade da transição SF-BG usando a intensidade de desordem Δ como parâmetro de controle e mantendo a densidade de partículas por sítio fixa em $1/2$. Este último requisito pode ser cumprido fixando o potencial químico no ponto de simetria partícula-buraco estatístico (que fica em $\mu = 0$, no caso do modelo hc-DBH, e em $\mu = K$, no caso do modelo de correntes- J [68]).

5.3.2 Estimativa da intensidade de desordem crítica e do expoente crítico do comprimento de correlação

Como justificamos no início desta seção, a estimativa de expoentes críticos ν e ϕ será feita usando o modelo de correntes- J . Nossas simulações com esse modelo foram feitas com $K = 2$ e fator de preenchimento fixo em $1/2$, i.e., fixamos $\mu = K$.

Para realizar uma estimativa correta do expoente crítico ϕ é crucial localizar o ponto crítico quântico com precisão, o que nesse caso significa localizar a intensidade

de desordem crítica Δ_c . Com simulações do modelo de correntes- J , localizamos Δ_c fazendo uma análise de escalonamento de tamanho finito convencional da flutuação da média do quadrado de *winding numbers* $\langle W^2 \rangle$ (cf. seção 3.3). Plotamos $\langle W^2 \rangle$ para diferentes tamanhos lineares de rede, $L = 12$ a $L = 20$, fixando o expoente $z = d = 3$ e a razão $L_\tau/L^3 = 2$, como pode ser visto na figura 5.8. Pelo cruzamento das curvas encontramos que a intensidade de desordem crítica está em $\Delta_c = 9.02(5)$ e confirmamos que, de fato, $z = 3$ ³.

Figura 5.8: Análise de escalonamento de tamanho finito da flutuação da média do quadrado do *winding number* $\langle W^2 \rangle$ usando a intensidade de desordem Δ como parâmetro de controle, para tamanhos lineares de rede $L = 12$ a $L = 20$ e com a razão $L_\tau/L^3 = 2$ fixa, para o modelo de correntes- J . O ajuste dos pontos foi feito utilizando polinômios de segunda ordem. Não observamos correções ao escalonamento dentro das nossas barras de erros. Do cruzamento entre as curvas temos que $\Delta_c = 9.02(5)$.

A partir dos dados da figura 5.8, podemos facilmente obter uma estimativa para o expoente crítico do comprimento de correlação ν (veja a equação (3.53)). Primeiramente, precisamos calcular a derivada no ponto crítico de cada curva $\langle W^2 \rangle(\Delta)$ obtida com um tamanho de rede diferente. Para isso, utilizamos quatro pontos próximos do ponto crítico: $\Delta = \{8.8, 9.0, 9.2, 9.4\}$. Plotando o gráfico log-log dessas derivadas por L extraímos $1/\nu$ da inclinação do gráfico resultante. Realizando este procedimento

³Como discutido na seção 3.3, o cruzamento acontece quando o valor usado para z nas simulações é de fato o valor do expoente crítico dinâmico da classe de universalidade estudada [56].

encontramos que $\nu = 0.88(5)$, como pode ser verificado na figura 5.9. Esse resultado concorda com estimativas anteriores [40, 74].

Figura 5.9: Estimativa do expoente crítico do comprimento de correlação ν . Deduzimos $1/\nu$ a partir do ajuste linear dos pontos neste gráfico, encontrando $\nu = 0.88(5)$. Os pontos foram extraídos da figura 5.8 usando a fórmula (3.53). A derivada de cada curva $\langle W^2 \rangle(\Delta)$ da figura 5.8 no ponto crítico foi estimada com um ajuste que utiliza quatro pontos próximos do ponto crítico: $\Delta = \{8.8, 9.0, 9.2, 9.4\}$. As barras de erros resultam da incerteza do ajuste, dados os pontos e suas barras de erros estatísticos na figura 5.8.

5.3.3 Estimativa do expoente crítico da temperatura crítica

Finalmente, somos capazes de estimar o expoente crítico ϕ a partir das medidas de $T_c(\Delta)$ e do ajuste das temperaturas de transição mais baixas com a lei de potência $T_c = A\delta^\phi$. Ainda simulando o modelo de correntes- J , obtemos a figura 5.10, onde, novamente, a temperatura crítica em cada ponto Δ é estimada fazendo uma análise de escalonamento de tamanho finito de $\langle W^2 \rangle$ (veja a descrição na página 66). Em notável contraste com a figura 5.6 e com os resultados reportados anteriormente, todos os pontos seguem bem uma curva com a lei de potência $T_c \propto (8.83 - \Delta)^{3.27}$, a medida que T_c diminui aproximadamente 2 ordens de magnitude (ajuste em linha pontilhada na figura 5.10). Sem o conhecimento de Δ_c , nós teríamos que concluir que $\phi \approx 3.3$.

No entanto, se o ajuste por uma lei de potência é feito incluindo o valor estimado do ponto crítico quântico $\Delta_c = 9.02(5)$, a previsão é diferente: o expoente varia de 2.9 a 2.7 a medida que reduzimos o número de pontos das temperaturas mais baixas incluídos no ajuste, de $T_c < 0.1$ a $T_c < 0.01$. Assim, afirmamos nosso resultado final como $\phi = 2.7(2)$, estimativa que está de acordo com o limite inferior previsto igual

a 2 (equação (5.8)) e também está em boa concordância com a previsão baseada na relação crítica quântica $\phi = z\nu$, considerando a nossa estimativa anterior do expoente crítico do comprimento de correlação $\nu = 0.88(5)$ e com a igualdade $z = 3$.

Figura 5.10: Temperatura crítica T_c da transição superfluido–líquido normal pela intensidade de desordem Δ para o modelo de correntes- J . A linha pontilhada ajusta os dados sem considerar o ponto crítico Δ_c e fornece uma lei de potência igual a $\phi \approx 3.3$ (esta curva termina em $\Delta(T = 0) = 8.83$). No entanto, quando ajustamos a uma lei de potência às temperaturas de transição mais baixas e consideramos o ponto crítico quântico $\Delta_c = 9.02(5)$, obtemos que $\phi = 2.7(2)$ (linha contínua).

Com o intuito de verificar a universalidade dos nossos resultados e fazer previsões do que pode ser esperado se um estudo similar for tentado experimentalmente usando um sistema magnético ou de átomos frios, fizemos simulações de QMC do modelo de Bose-Hubbard desordenado no limite de caroço-duro com fator de preenchimento $1/2$ (i.e., com $\mu = 0$, ou campo magnético externo zero no caso de um ferromagneto XY com spin- $1/2$). Nossos dados para a temperatura de transição SF-NL estão apresentados na figura 5.11, em que $T_c(\Delta)$ foi determinado também a partir de uma análise de FSS de $\langle W^2 \rangle$. Como simulações de modelos quânticos são numericamente mais desafiadoras, não tentamos determinar Δ_c e as médias sobre diferentes realizações de desordem são feitas com um número menor de realizações. (Mais detalhes estão na página 66.)

Verificamos que os pontos nas temperaturas mais baixas têm um comportamento consistente com um decaimento com uma lei de potência igual a $\phi = 2.7$. Esse comportamento crítico começa a temperaturas tão altas quanto $T_c/t < 0.5$ e fomos capazes de verificá-la até $T_c \approx 0.03$ (veja a ampliação dessa região na figura 5.11). Também estimamos a partir do ajuste dos dados que obedecem esta lei de potência que o ponto

crítico quântico nesse modelo é $\Delta_c \approx 24.67$, uma estimativa que pode guiar futuros experimentos.

Concluimos que certamente a condição $\phi > 2$ é satisfeita pela transição SF-BG em 3D.

Figura 5.11: Decaimento da temperatura crítica T_c da transição superfluido–líquido normal com a intensidade de desordem Δ para o modelo hc-DBH. A linha contínua é um ajuste dos cinco últimos pontos com a lei $T_c(\Delta) = A\delta^\phi$, com o expoente $\phi = 2.7$ fixo, valor determinado a partir das simulações com o modelo de correntes- J . A partir desse ajuste prevemos que o ponto crítico quântico está localizado em $\Delta_c \approx 24.67$. No canto superior direito, temos uma ampliação da parte final do gráfico principal.

5.3.4 Expoente crítico do parâmetro de ordem

Estimamos também o expoente crítico do parâmetro de ordem β de duas maneiras: uma utilizando o potencial químico como parâmetro de controle ($g = \mu$) e outra utilizando a intensidade de desordem ($g = \Delta$). No sistema bosônico, o parâmetro de ordem é a fração de condensado (equação (3.47)), cujo comportamento crítico é caracterizado por ⁴

$$n_0 \propto \delta^{2\beta}. \quad (5.15)$$

Na figura 5.12, apresentamos a dependência da densidade do condensado com o potencial químico (figura à esquerda) e com a intensidade de desordem (figura à direita) na região crítica da transição SF-BG. Para obter esta figura, utilizamos uma rede com

⁴O parâmetro de ordem de magnetos é normalmente a magnetização $\langle \mathbf{S}_i \rangle \sim \delta^\beta$, com $\mathbf{S}_i$ sendo o spin no sítio i . O parâmetro de ordem usado em [40] é $m_s^2 \sim \langle S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y \rangle \sim \delta^{2\beta}$. Aqui, $n_0 \sim \langle \Psi^\dagger \Psi \rangle$, como $\Psi \rightarrow S^+$ [71], é usual utilizar o expoente 2β para caracterizar o decaimento crítico de n_0 .

tamanho $L = 20$ e entre 500 e 1000 realizações de desordem. Medir a densidade do condensado à $T = 0$ seria um esforço computacional muito grande, por isso usamos uma aproximação. Podemos obter uma boa estimativa da densidade de condensado à $T = 0$ pela sua medida na temperatura $T = T_c/2$, só que com um esforço computacional muito menor. Estimamos que o erro sistemático devido a essa aproximação é em torno de 10%. Na figura à esquerda, medimos a densidade de condensado na região crítica determinada pelos pontos que obedecem o ajuste com lei de potência $\phi = 1.1(1)$ da figura 5.6, com $\mu_c \approx -14.7$, e, na figura à direita, pelos pontos que obedecem a lei de potência $\phi = 2.7(2)$ da figura 5.11, com $\Delta_c \approx 24.67$.

O comportamento dos pontos com temperatura mais baixa na figura à esquerda obedecem uma lei de potência com $\beta = 0.6(1)$, e os na figura à direita têm $\beta = 1.5(2)$, mostrando que também aqui o potencial químico não é um parâmetro adequado para estimativa deste expoente crítico.

Figura 5.12: Decaimento da densidade do condensado com o potencial químico μ (à esquerda) e com a intensidade de desordem Δ (à direita). O expoente crítico β foi estimado como 0.6(1) na figura à esquerda e como 1.5(2) na figura à direita.

Capítulo 6

Conclusão

Estudamos gases bosônicos ultrafrios aprisionados em redes óticas, em especial transições de fases quânticas superfluido-isolante. Para tanto, utilizamos o modelo de Bose-Hubbard e simulações de Monte Carlo Quântico empregando o algoritmo Worm. Nosso trabalho se dividiu em duas partes. Na primeira, estudamos a transição superfluido-isolante de Mott (SF-MI) na presença de uma rede ótica hexagonal. Na segunda, estudamos a transição superfluido-vidro de Bose (SF-BG) em um sistema tridimensional, que ocorre quando há desordem no sistema.

No estudo do sistema com uma rede ótica hexagonal, consideramos apenas o caso homogêneo e sem a presença da armadilha harmônica confinante. Usamos o modelo de Bose-Hubbard adaptado para uma rede ótica hexagonal, considerando apenas o tunelamento entre primeiros vizinhos t e a interação intrassítio U , em que a competição entre os parâmetros U e t da hamiltoniana levam a transição SF-MI. Delineamos o primeiro lobo de Mott do diagrama de fases utilizando a função de Green de momento zero, estimada numericamente com o algoritmo Worm, para obter o *gap* de energia do isolante de Mott, uma de suas características mais importantes. Com essa informação pudemos definir a fronteira entre as fases com precisão mesmo na região próxima ao ponto crítico onde o *gap* do isolante é pequeno. Fizemos um estudo da influência do tamanho da rede na região de *gaps* pequenos, em que o *gap* do isolante é menor do que a intensidade de tunelamento entre sítios, que é a região do diagrama de fases mais afetada pelo tamanho finito da grade por estar mais próxima do ponto crítico. Pelo prolongamento das curvas que delimitam o lobo de Mott, inferimos a localização do ponto crítico em $(t/U)_c = 0.0865(5)$, essa estimativa se mostrou dentro da previsão encontrada na literatura obtida com outros métodos [25, 28].

Comparamos o diagrama de fases obtido usando a função de Green de momento zero com um outro obtido utilizando uma aproximação de campo médio. Verificamos, como o esperado, que o campo médio fornece apenas uma descrição qualitativa do primeiro lobo, sendo o ponto crítico previsto por ele subestimado em 34% em relação a estimativa feita com o uso do Worm. Também verificamos uma maior concordância do diagrama previsto com a função de Green na região onde a interação é dominante sobre a intensidade de tunelamento, em que o campo médio tem previsões melhores. Uma

outra comparação foi feita com o diagrama de fases da transição SF-MI considerando a rede quadrada. Uma relação de escala prevista pelo campo médio, que expressa a diferença geométrica entre as duas redes, é que os pontos da fronteira do lobo de Mott do sistema com uma rede quadrada multiplicados por $4/3$ devem se sobrepôr aos pontos do lobo de Mott do sistema com uma rede hexagonal. Verificamos essa relação entre os lobos de Mott obtidos com o Worm com as rede quadrada e hexagonal na maior parte do lobo, havendo uma diferença maior apenas na região próxima ao ponto crítico. Isto mostra que as flutuações do campo na rede hexagonal não podem ser simplesmente escalonadas pelo número de vizinhos da rede quadrada.

Uma perspectiva de continuidade nessa linha de pesquisa, é a extensão do estudo do diagrama de fases considerando uma interação dipolar entre os átomos. A introdução de uma interação de longo alcance no sistema possibilita que novos sólidos de Mott se estabeleçam e novas fases sejam encontradas. Esperamos encontrar outros sólidos que sejam mais estáveis ou com fatores de preenchimento menores do que os encontrados numa rede quadrada [19]. Além de outros sólidos de Mott, podemos procurar por regiões em que uma fase supersólida se estabeleça (usualmente nas proximidades da fronteira com os lobos dos isolantes), utilizando o algoritmo Worm podemos identificá-las analisando a fração de superfluido e o fator de estrutura. A expectativa é que uma rede hexagonal apresente sólidos mais estáveis, facilitando uma observação experimental tanto dos outros sólidos de Mott como de supersólidos.

Na segunda parte desse trabalho, fizemos um estudo numérico da classe de universalidade superfluido-vidro de Bose (SF-BG) em 3D. A transição SF-BG é uma transição de fases quântica prevista pelo modelo de Bose-Hubbard com desordem no potencial químico. Quando a desordem é introduzida no sistema, com uma distribuição limitada por Δ , a fase vidro de Bose emerge intermediando as fases superfluido e isolante de Mott. A fronteira entre as fases BG-MI é determinada pela condição $\Delta = \bar{\Delta}/2$, com $\bar{\Delta}$ o gap do isolante de Mott no sistema puro, e a transição SF-BG é descrita pela teoria de escala de Fisher *et al.* [11]. Duas relações de escala encontradas por essa teoria são $\phi = z\nu$ e $z = d$, com $\phi > 2$, onde z e ν são os expoentes críticos dinâmico e do comprimento de correlação, respectivamente, e d a dimensão do sistema.

No entanto, estudos experimentais e numéricos recentes em magnetos quânticos desordenados [39, 40] reportam uma forte violação dessa relação crítica quântica, encontrando $\phi = 1.1(1)$ e $\nu = 0.75(10)$ ($d=3$), e questionam as leis de escala convencionais para a classe de universalidade SF-BG. Abordamos essa controvérsia numericamente [42] utilizando o algoritmo Worm nas suas versões quântica e clássica. O primeiro simulando o modelo de Bose-Hubbard desordenado no limite do caroço-duro (hc-DBH), limite no qual pode ser mapeado numa hamiltoniana de spin-1/2, permitindo assim uma comparação com os estudos [39, 40], e o segundo simulando o modelo clássico de correntes- J , o equivalente clássico mais simples do modelo DBH (pertencente a mesma classe de universalidade) também num limite correspondente ao limite de caroço-duro para sistemas bosônicos.

Revisamos os estudos anteriores simulando o modelo hc-DBH variando o potencial químico para induzir a transição SF-BG no sistema, desta forma, podemos comparar

nossos resultados com os obtidos em magnetos quânticos, em que um campo magnético externo foi usado como parâmetro de controle. Nossos resultados sobre a dependência da temperatura de transição superfluido-líquido normal com o potencial químico, encontram um grande intervalo de parâmetros obedecendo a lei de potência $\phi \approx 1.1$. Porém, os pontos mais próximos do ponto crítico quântico desviam consideravelmente desta lei de potência, revelando que a maioria dos pontos dessa curva não deve estar no regime crítico. Mostramos que a densidade no intervalo de temperaturas mais baixas tem uma forte dependência com o potencial químico, nos levando a concluir que o decaimento da temperatura crítica T_c está sendo fortemente influenciado pela diminuição da densidade e não é devido aos efeitos de localização da desordem. Como as variações da densidade na região crítica, devem ser pequenas em termos da densidade do ponto crítico, quando o potencial químico é usado como parâmetro de controle, a temperatura de transição T_c fica fora do limite de detecção antes que os dados se tornem adequados para a estimativa de ϕ . Concluimos que os resultados anteriores reportando o expoente crítico $\phi \approx 1.1(1)$, foram realizados fora da região crítica quântica e que o comportamento crítico genuíno estava simplesmente fora do alcance.

Ao utilizarmos a intensidade de desordem Δ para induzir a transição no sistema, mantendo a densidade de partículas por sítio fixa em $1/2$, verificamos com simulações do modelo de correntes- J a lei de escala $z = 3$ e encontramos os seguintes expoentes críticos: $\nu = 0.88(5)$ e $\phi = 2.7(2)$, onde o valor encontrado para ν concorda com estimativas anteriores [40, 74]. Para a estimativa de ϕ , foi crucial localizar o ponto crítico quântico com precisão, encontramos $\Delta_c = 9.02(5)$. Os resultados da simulação do modelo de Bose-Hubbard desordenado no limite de caroço-duro com essa abordagem também dão suporte a uma lei de potência $\phi = 2.7(2)$. A partir do ajuste dos pontos com temperatura mais baixa com esta lei de potência, previmos que $\Delta_c \approx 24.67$ para esse modelo. Assim, concluimos que de fato $z = d = 3$ e que $\phi = z\nu > 2$, colocando um fim na controvérsia em 3D. Além disso, o expoente crítico do parâmetro de ordem também foi calculado, utilizando a abordagem à densidade constante encontramos o valor $\beta = 1.5(2)$, que também difere do expoente $\beta = 0.6(1)$ característico do intervalo transiente $\mu/t \geq -14$.

Ainda há muitos problemas em aberto em sistemas desordenados. Uma linha de investigação seria abordar uma controvérsia, agora em 2D, envolvendo a lei de escala $z = d$. Por um lado, vários trabalhos encontram escalonamentos consistentes com $z = 2$, por exemplo [45, 75, 76], (i.e., supondo *a priori* que $z = 2$, encontram escalonamentos como o esperado pela teoria de escala). Por outro lado, um estudo que estima o valor do expoente crítico dinâmico diretamente encontram z menor do que 2 [77]. Outros estudos [78, 79] obtêm estimativas mais próximas de $z = 2$, mas suas barras de erros não descartam um valor inferior. No entanto, problemas relacionados ao uso de tamanho de sistemas insuficientes na análise podem estar relacionados com as previsões que violam essa relação. Se confirmado essa violação, não só a teoria de escala que leva a previsão $z = d$, mas também o limite inferior $\phi > 2$, teriam que ser revistos (para qualquer dimensão), tornando este um problema interessante e bastante relevante a ser estudado.

Referências Bibliográficas

- [1] O. Penrose and L. Onsager, “Bose-Einstein condensation and liquid Helium,” *Phys. Rev.*, vol. 104, pp. 576–584, Nov 1956.
- [2] D. Durfee and W. Ketterle, “Experimental studies of Bose-Einstein condensation,” *Optics Express*, vol. 2, no. 8, pp. 299–313, 1998.
- [3] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor,” *Science*, vol. 269, no. 5221, pp. 198–201, 1995.
- [4] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, “Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 1687–1690, Aug 1995.
- [5] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-Einstein condensation in a gas of Sodium atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3969–3973, Nov 1995.
- [6] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, “Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 71, pp. 463–512, Apr 1999.
- [7] I. Bloch, “Quantum gases in optical lattices,” *Physics World*, vol. 17, no. 4, pp. 25–29, 2004.
- [8] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, no. 3, p. 885, 2008.
- [9] C. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002.
- [10] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, “Cold bosonic atoms in optical lattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, pp. 3108–3111, Oct 1998.
- [11] M. P. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, “Boson localization and the superfluid-insulator transition,” *Physical Review B*, vol. 40, no. 1, p. 546, 1989.

- [12] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms,” *Nature*, vol. 415, no. 6867, pp. 39–44, 2002.
- [13] I. B. Spielman, W. D. Phillips, and J. V. Porto, “Mott-insulator transition in a two-dimensional atomic Bose gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 080404, Feb 2007.
- [14] B. Capogrosso-Sansone, Şebnem Güneş Söyler, N. V. Prokof’ev, and B. V. Svistunov, “Monte Carlo study of the two-dimensional Bose-Hubbard model,” *Phys. Rev. A*, vol. 77, p. 015602, Jan 2008.
- [15] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T. V. Ramakrishnan, “Superfluid and insulating phases in an interacting-boson model: mean-field theory and the RPA,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 22, p. 257, 1993.
- [16] B. Capogrosso-Sansone, N. V. Prokof’ev, and B. V. Svistunov, “Phase diagram and thermodynamics of the three-dimensional Bose-Hubbard model,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 134302, Apr 2007.
- [17] M. Ö. Oktel, M. Niță, and B. Tanatar, “Mean-field theory for Bose-Hubbard model under a magnetic field,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 045133, Jan 2007.
- [18] J. K. Freericks and H. Monien, “Strong-coupling expansions for the pure and disordered Bose-Hubbard model,” *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 2691–2700, Feb 1996.
- [19] B. Capogrosso-Sansone, C. Trefzger, M. Lewenstein, P. Zoller, and G. Pupillo, “Quantum phases of cold polar molecules in 2D optical lattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, p. 125301, Mar 2010.
- [20] C. Becker, P. Soltan-Panahi, J. Kronjäger, S. Dörscher, K. Bongs, and K. Sengstock, “Ultracold quantum gases in triangular optical lattices,” *New Journal of Physics*, vol. 12, no. 6, p. 065025, 2010.
- [21] L. Pollet, J. D. Picon, H. P. Büchler, and M. Troyer, “Supersolid phase with cold polar molecules on a triangular lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, p. 125302, Mar 2010.
- [22] D. Yamamoto, I. Danshita, and C. A. R. Sá de Melo, “Dipolar bosons in triangular optical lattices: Quantum phase transitions and anomalous hysteresis,” *Phys. Rev. A*, vol. 85, p. 021601, Feb 2012.
- [23] S. Wessel and M. Troyer, “Supersolid hard-core bosons on the triangular lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 127205, Sep 2005.
- [24] L. He, Y. Li, E. Altman, and W. Hofstetter, “Quantum phases of Bose-Bose mixtures on a triangular lattice,” *Phys. Rev. A*, vol. 86, p. 043620, Oct 2012.

- [25] N. Teichmann, D. Hinrichs, and M. Holthaus, “Reference data for phase diagrams of triangular and hexagonal bosonic lattices,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 91, no. 1, p. 10004, 2010.
- [26] P. Soltan-Panahi, J. Struck, P. Hauke, A. Bick, W. Plenkers, G. Meineke, C. Becker, P. Windpassinger, M. Lewenstein, and K. Sengstock, “Multi-component quantum gases in spin-dependent hexagonal lattices,” *Nature Physics*, vol. 7, no. 5, pp. 434–440, 2011.
- [27] C. Wu, D. Bergman, L. Balents, and S. Das Sarma, “Flat bands and Wigner crystallization in the honeycomb optical lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 070401, Aug 2007.
- [28] D. Lühmann, “Cluster Gutzwiller method for bosonic lattice systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 87, p. 043619, Apr 2013.
- [29] N. Prokof’ev, B. Svistunov, and I. Tupitsyn, “Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum systems,” *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 87, no. 2, pp. 310–321, 1998.
- [30] N. Prokof’ev, B. Svistunov, and I. Tupitsyn, “Worm algorithm in quantum Monte Carlo simulations,” *Physics Letters A*, vol. 238, no. 4, pp. 253–257, 1998.
- [31] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Physical Review*, vol. 109, no. 5, pp. 1492–1505, 1958.
- [32] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics*. Holt, Rinehardt and Winston, 1976.
- [33] A. Aspect and M. Inguscio, “Anderson localization of ultracold atoms,” *Physics today*, vol. 62, no. 8, pp. 30–35, 2009.
- [34] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, and A. Aspect, “Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder,” *Nature*, vol. 453, no. 7197, pp. 891–894, 2008.
- [35] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen, and U. Sen, “Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond,” *Advances in Physics*, vol. 56, no. 2, pp. 243–379, 2007.
- [36] T. Hong, A. Zheludev, H. Manaka, and L.-P. Regnault, “Evidence of a magnetic Bose glass in $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{Cu}(\text{Cl}_{0.95}\text{Br}_{0.05})_3$ from neutron diffraction,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 060410, Feb 2010.

- [37] D. Hüvonen, S. Zhao, G. Ehlers, M. Månsson, S. N. Gvasaliya, and A. Zheludev, “Excitations in a quantum spin liquid with random bonds,” *Phys. Rev. B*, vol. 86, p. 214408, Dec 2012.
- [38] E. Wulf, D. Hüvonen, J.-W. Kim, A. Paduan-Filho, E. Ressouche, S. Gvasaliya, V. Zapf, and A. Zheludev, “Criticality in a disordered quantum antiferromagnet studied by neutron diffraction,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 174418, Nov 2013.
- [39] R. Yu, L. Yin, N. S. Sullivan, J. S. Xia, C. Huan, A. Paduan-Filho, N. F. Oliveira Jr, S. Haas, A. Steppke, C. F. Miclea, F. Weickert, R. Movshovich, E.-D. Mun, B. L. Scott, V. S. Zapf, and T. Roscilde, “Bose glass and Mott glass of quasiparticles in a doped quantum magnet,” *Nature*, vol. 489, pp. 379–384, 09 2012.
- [40] R. Yu, C. F. Miclea, F. Weickert, R. Movshovich, A. Paduan-Filho, V. S. Zapf, and T. Roscilde, “Quantum critical scaling at a Bose-glass/superfluid transition: Theory and experiment for a model quantum magnet,” *Phys. Rev. B*, vol. 86, p. 134421, Oct 2012.
- [41] P. B. Weichman and R. Mukhopadhyay, “Critical dynamics of the dirty boson problem: Revisiting the equality $z = d$,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 245701, Jun 2007.
- [42] Z. Yao, K. P. C. da Costa, M. Kiselev, and N. Prokof’ev, “Critical exponents of the superfluid–Bose-glass transition in three dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 112, p. 225301, 2014.
- [43] K. P. C. da Costa, “Estudo do modelo de Bose-Hubbard usando o algoritmo Worm,” Master’s thesis, Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 2011.
- [44] J. Mun, *Bose-Einstein condensates in optical lattices: The superfluid to Mott insulator phase transition*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2008.
- [45] M. Wallin, E. S. Sørensen, S. M. Girvin, and A. P. Young, “Superconductor-insulator transition in two-dimensional dirty boson systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 49, pp. 12115–12139, May 1994.
- [46] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, and E. Vicari, “Theoretical estimates of the critical exponents of the superfluid transition in ^4He by lattice methods,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 144506, Oct 2006.
- [47] Grupo teórico de sólidos, líquidos e gases quânticos da Universidade de Massachusetts Amherst, “Notas de aula.” <http://mcwa.csi.cuny.edu/umass/lectures.html>.
- [48] N. Prokof’ev and B. Svistunov, “Worm algorithms for classical statistical models,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 160601, Sep 2001.

- [49] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford Graduate Texts, OUP Oxford, 2004.
- [50] N. Prokof'ev, "Notas de aula do curso 'simulations of quantum many body systems'." https://wiki.phys.ethz.ch/quantumsimulations/_media/lecture_101021.pdf, 2010.
- [51] N. Prokof'ev and B. Svistunov, "Worm algorithm for problems of quantum and classical statistics," *arXiv preprint arXiv:0910.1393*, 2010.
- [52] E. L. Pollock and D. M. Ceperley, "Path-integral computation of superfluid densities," *Phys. Rev. B*, vol. 36, pp. 8343–8352, Dec 1987.
- [53] M. Newman and G. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press, 1999.
- [54] B. Capogrosso-Sansone, *Quantum Monte Carlo study of ultracold bosons in optical lattices*. PhD thesis, University of Massachusetts - Amherst, <http://scholarworks.umass.edu/dissertations/AAI3336980>, 2008.
- [55] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. Frontiers in physics, Addison-Wesley, Advanced Book Program, 1992.
- [56] Grupo teórico de sólidos, líquidos e gases quânticos da Universidade de Massachusetts Amherst, "Notas de aula - parte 3." http://staff.ustc.edu.cn/yj-deng/CQMC2012/lecture_notes/part3.pdf.
- [57] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar, "Continuous quantum phase transitions," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 69, pp. 315–333, Jan 1997.
- [58] K. G. Balabanyan, "Superfluid and superconducting transitions in low-dimensional systems," 2007. Doctoral Dissertations Available from Proquest. Paper AAI3293933.
- [59] Grupo teórico de sólidos, líquidos e gases quânticos da Universidade de Massachusetts Amherst, "Worm algorithm for J-current model." <http://mcwa.csi.cuny.edu/umass/jcurrent.html>.
- [60] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics*. No. pt. 2 in Course of theoretical physics, Pergamon Press, 1980.
- [61] V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, "Electron-electron interactions in Graphene: Current status and perspectives," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 84, pp. 1067–1125, Jul 2012.
- [62] J. Cserti, "Application of the lattice Green's function for calculating the resistance of an infinite network of resistors," *American Journal of Physics*, vol. 68, no. 10, pp. 896–906, 2000.

- [63] J. Taylor, *An Introduction to Error Analysis: The Study of Uncertainties in Physical Measurements*. University Science Books, 1997.
- [64] T. Vojta, “Phases and phase transitions in disordered quantum systems,” *arXiv preprint arXiv:1301.7746*, 2013.
- [65] P. B. Weichman, “Dirty bosons: twenty years later,” *Modern Physics Letters B*, vol. 22, no. 27, pp. 2623–2647, 2008.
- [66] L. Pollet, N. V. Prokof’ev, B. V. Svistunov, and M. Troyer, “Absence of a direct superfluid to Mott insulator transition in disordered Bose systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 140402, Sep 2009.
- [67] V. Gurarie, L. Pollet, N. V. Prokof’ev, B. V. Svistunov, and M. Troyer, “Phase diagram of the disordered Bose-Hubbard model,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 214519, Dec 2009.
- [68] E. S. B. Boris V. Svistunov and N. V. Prokof’ev, *Superfluid States of Matter*. CRC Press, 2015.
- [69] A. B. Harris, “Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 7, no. 9, p. 1671, 1974.
- [70] J. T. Chayes, L. Chayes, D. S. Fisher, and T. Spencer, “Finite-size scaling and correlation lengths for disordered systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 57, pp. 2999–3002, Dec 1986.
- [71] A. Zheludev and T. Roscilde, “Dirty-boson physics with magnetic insulators,” *Comptes Rendus Physique*, vol. 14, no. 8, pp. 740 – 756, 2013.
- [72] M. Boninsegni, N. V. Prokof’ev, and B. V. Svistunov, “Worm algorithm and diagrammatic Monte Carlo: A new approach to continuous-space path integral Monte Carlo simulations,” *Phys. Rev. E*, vol. 74, p. 036701, Sep 2006.
- [73] R. Yu, V. Zapf, and T. Roscilde, “Comment to ‘Critical exponents of the superfluid-Bose glass transition in three-dimensions’ by Z. Yao et al., arxiv: 1402.5417 v1,” *arXiv preprint arXiv:1403.6059*, 2014.
- [74] P. Hitchcock and E. S. Sørensen, “Bose-glass to superfluid transition in the three-dimensional Bose-Hubbard model,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 174523, May 2006.
- [75] Ş. G. Söyler, M. Kiselev, N. V. Prokof’ev, and B. V. Svistunov, “Phase diagram of the commensurate two-dimensional disordered Bose-Hubbard model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, p. 185301, Oct 2011.
- [76] F. Alet and E. S. Sørensen, “Cluster Monte Carlo algorithm for the quantum rotor model,” *Phys. Rev. E*, vol. 67, p. 015701, Jan 2003.

- [77] H. Meier and M. Wallin, “Quantum critical dynamics simulation of dirty boson systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 055701, Jan 2012.
- [78] J. P. Álvarez Zúñiga, D. J. Luitz, G. Lemarié, and N. Laflorencie, “Critical properties of the superfluid–Bose-glass transition in two dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 114, p. 155301, Apr 2015.
- [79] R. Ng and E. S. Sørensen, “Quantum critical scaling of dirty bosons in two dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 114, p. 255701, 2015.