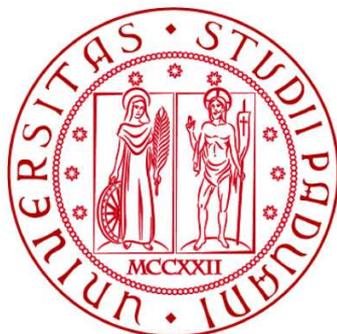


UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA



DIPARTIMENTO DI FISICA ED ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI"

CORSO DI LAUREA IN FISICA

# Correlazioni quantistiche di bosoni dipolari in doppia buca

**Laureando:**

MICHELE PIZZARDO

**Relatore:**

Chiar.mo Prof. LUCA SALASNICH

**Correlatore:**

Dott. GIOVANNI MAZZARELLA

ANNO ACCADEMICO 2013/2014



# Indice

|          |                                                                                |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introduzione.</b>                                                           | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Alune nozioni preliminari.</b>                                              | <b>6</b>  |
| 2.1      | La condensazione di Bose-Einstein. . . . .                                     | 6         |
| 2.2      | Interazioni tra particelle. . . . .                                            | 8         |
| 2.2.1    | L'interazione di contatto. . . . .                                             | 9         |
| 2.2.2    | L'interazione dipolare. . . . .                                                | 10        |
| 2.3      | La seconda quantizzazione. . . . .                                             | 11        |
| 2.4      | L'operatore densità. . . . .                                                   | 14        |
| 2.5      | L'entropia di von Neumann. . . . .                                             | 16        |
| <b>3</b> | <b>Il sistema.</b>                                                             | <b>18</b> |
| 3.1      | L'operatore Hamiltoniano. . . . .                                              | 19        |
| 3.1.1    | L'operatore Hamiltoniano di prima quantizzazione. . . . .                      | 19        |
| 3.1.2    | L'operatore Hamiltoniano di seconda quantizzazione. . . . .                    | 19        |
| 3.2      | Gli indicatori per l'analisi. . . . .                                          | 22        |
| <b>4</b> | <b>L'analisi.</b>                                                              | <b>26</b> |
| 4.1      | L'interazione di contatto. . . . .                                             | 27        |
| 4.2      | Analisi dello stato fondamentale in assenza di hopping di coppia. . . . .      | 33        |
| 4.2.1    | Informazione di Fisher, coerenza ed entanglement. . . . .                      | 36        |
| 4.3      | Influenza dell'hopping correlato sugli stati NOON, coerente e di Fock. . . . . | 38        |
| <b>5</b> | <b>Conclusioni.</b>                                                            | <b>45</b> |
| <b>A</b> | <b>Risultati analitici per <math>N = 3</math> bosoni.</b>                      | <b>47</b> |
| <b>B</b> | <b>Codice in linguaggio C++.</b>                                               | <b>49</b> |
|          | <b>Bibliografia</b>                                                            | <b>53</b> |



# Capitolo 1

## Introduzione.

Negli anni '80 e '90 la Fisica è stata segnata profondamente da due risultati miliari ottenuti in due campi di ricerca apparentemente distinti: il raffreddamento laser degli atomi in ottica quantistica da una parte e l'osservazione del condensato di Bose-Einstein (indicato con l'acronimo BEC) in fisica atomica nel 1995 dall'altra [1]. L'importanza di tali mete è stata ben sottolineata dalle due assegnazioni del Premio Nobel ai protagonisti di queste ricerche: nel 1997 a S.Chu, C. Cohen-Tannoudji e W. D. Phillips “per lo sviluppo di metodi per raffreddare e intrappolare gli atomi con luce laser”, e nel 2001 a E. A. Cornell, W. Ketterle e C. E. Wieman “per la realizzazione della condensazione di Bose-Einstein in gas diluiti di atomi alcalini, e per i primi fondamentali studi sulle proprietà dei condensati”. Da quegli anni l'interesse per la BEC ottenuta in reticoli ottici è sempre cresciuto sia dal punto di vista teorico che sperimentale per le grandi aspettative riposte in tali sistemi estremamente versatili. Grazie a tali risultati è stato possibile confermare sperimentalmente, per la prima volta nella storia della fisica, molte previsioni e addirittura fondamenti concettuali della teoria quantistica (si pensi ad esempio al famoso paradosso del “gatto” di Schrödinger), mentre alcune delle loro innumerevoli applicazioni spaziano dalla spettrometria di precisione (che valse il Premio Nobel nel 2005 a J. L. Hall e T. W. Hänsch), all'interferometria, alla costruzione di orologi atomici o ancora alla computazione quantistica. Un'altra applicazione sta nella realizzazione di una giunzione di Josephson atomica (AJJ), basata sugli studi svolti negli anni '60 dal fisico B. D. Josephson sul comportamento della corrente in metalli superconduttori separati da una barriera di materiale isolante, le giunzioni Josephson (JJ) [2], in cui si presentano chiari effetti di tunnelling delle cariche elettriche attraverso di essa, che prendono il nome di “effetto Josephson”, che valse al fisico britannico il Premio Nobel nel 1973.

Comprendibilmente, la BEC è sempre stata un fenomeno di grande rilevanza negli studi di fisica della materia condensata: teorizzata nel 1924 da A. Einstein sulla base di ricerche sui fotoni di S. N. Bose, la BEC prevede che in un sistema costituito da un numero fissato di particelle non interagenti che seguono la statistica di Bose-Einstein, esiste una temperatura critica al di sotto della quale una frazione finita di particelle si pone in uno stesso stato di particella singola e che tali bosoni possono essere descritti mediante una funzione d'onda macroscopica [3]. La scoperta del raffreddamento laser degli atomi [4], basato sul principio dell'effetto Stark per cui atomi neutri in presenza di campo elettromagnetico assumono un momento di dipolo che interagendo col campo portano ad un cessione di energia degli atomi che ne determina l'abbassamento della temperatura, ha consentito di superare uno dei più grossi problemi che si opponevano alla realizzazione di un BEC: la temperatura estremamente bassa alla quale essa si può osservare, dell'ordine di qualche decina di nK. Dopo il raggiungimento di questo risultato la fisica ottica ha compiuto rapidamente altri passi avanti, come la realizzazione di potenziali (o “trappole”)

ottici e/o magnetici, e da qui lo sviluppo della tecnica di raffreddamento ad evaporazione atomica forzata, che consiste nell'abbassamento progressivo del potenziale della trappola consentendo che gli atomi più energetici la lascino "evaporando". Si è così stati in grado di creare cristalli atomici (non necessariamente condensati) confinati otticamente dalla luce: i reticoli ottici. Attualmente, si tende ad ideare esperimenti di osservazione di BEC quasi esclusivamente in reticoli ottici, data la loro straordinaria efficienza e la grande varietà di tipi di potenziale ottenibili con fasci di luce: BEC in reticoli ottici sono stati osservati in metalli alcalini come  ${}^6\text{Li}$ ,  ${}^7\text{Li}$ ,  ${}^{23}\text{Na}$ ,  ${}^{40}\text{K}$ ,  ${}^{85}\text{Rb}$ ,  ${}^{87}\text{Rb}$  oppure in elementi quali  ${}^{52}\text{Cr}$ ,  ${}^{164}\text{Dy}$  ed  ${}^{168}\text{Er}$ , questi ultimi tre con grande momento di dipolo magnetico (rispettivamente 6, 10 e 7 magnetoni di Bohr), a temperature comprese tra poche decine di nK e  $50 \mu\text{K}$ , con densità atomiche comprese tra  $10^{11}$  e  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . In particolare la realizzazione di BEC in reticoli ottici con atomi dipolari costituisce un ambito di studio di frontiera in questo momento, poiché molti ricercatori, al fine di arricchire le proprietà di tali sistemi, hanno riconosciuto che la interazione dipolo-dipolo potrebbe senz'altro condurre alla ribalta nel mondo scientifico una nuova e interessante tipologia di gas quantistici degeneri [5]. La motivazione principale da addurre alla preferenza dello studio di reticoli ottici in stato BEC rispetto a quelli non condensati sta nel fatto che nel primo caso il sistema è più chiaro e pulito, essendo popolato il solo stato fondamentale del reticolo senza alcuna vacanza di particelle, causando un incremento dell'importanza delle interazioni interparticellari che arricchiscono di molto la fisica di tale sistema con la conseguente insorgenza di effetti, ad esempio, nonlineari. I più semplici potenziali riprodotti con tali metodi ottico-magnetici sono quelli periodici e armonici; mediante loro opportune sovrapposizioni, è possibile produrre un potenziale a doppia buca [1, 6], simmetrico o meno, riducibile a unidimensionale mediante confinamento armonico, e generare uno stato BEC in un siffatto reticolo ottico: un sistema di questo tipo viene definito "giunzione di Josephson atomica", o in breve AJJ.

Questo lavoro si occupa di una AJJ costituita da una singola specie di gas bosonico dipolare in un potenziale a doppia buca simmetrico unidimensionale a temperatura nulla, descrivendone alcune delle più rilevanti e curiose proprietà del suo stato fondamentale evidenziandone in particolare le proprietà di correlazione [7, 8, 9]. Dopo questa breve introduzione, avente la sola pretesa di contestualizzare l'argomento, l'elaborato si snoda in quattro ulteriori capitoli: nel prossimo verranno richiamati alcuni concetti fisici e strumenti matematici, cioè il formalismo della seconda quantizzazione, la nozione di operatore di densità ed entropia di von Neumann, fondamentali per la comprensione e lo sviluppo del problema, che inizia nel Capitolo 3, dove il sistema in esame verrà specificato in dettaglio e modellizzato mediante la derivazione dell'Hamiltoniano di seconda quantizzazione, che verrà scritto in termini degli operatori di creazione e distruzione di singola particella, e si conclude nel Capitolo 4, che presenterà i risultati, rispettivamente analitici e numerici per un numero  $N = 2, 3$  e  $N = 20, 25$  bosoni, ottenuti con la risoluzione dell'equazione agli autovalori e autovettori dell'Hamiltoniano in diversi casi. Per definitezza, si evidenzia che un'analisi condotta per un numero anche molto esiguo di particelle è oggi realistica, oltre che di grande interesse sia teorico che sperimentale: ciò è senza dubbio dimostrato dal Premio Nobel assegnato nel 2012 a S. Haroche e D. J. Wineland, i quali hanno indipendentemente sviluppato metodi in grado di manipolare sistemi di pochi atomi senza estinguerne le loro proprietà quantistiche. Tornando ora all'analisi svolta, verranno in particolare studiate diverse configurazioni del sistema in funzione dell'interazione effettiva in sito e del tunnelling (o hopping) correlato, due dei tre parametri presenti nel suo Hamiltoniano, caratterizzando di volta in volta lo stato mediante tre indicatori in grado di rilevare se esso coincida con uno dei tre regimi elementari del sistema oppure sia uno stato di transizione tra due di essi. Tali regimi fondamentali sono lo stato "gatto" o NOON, combinazione lineare dei due stati di base in cui tutte le particelle sono rispettivamente in una buca e nell'altra, lo stato coerente, combinazione lineare di tutti gli stati di base possibili pesati sul numero di stati microscopici "classici" competenti a ciascuno di essi e

lo stato di Fock, in cui le particelle si distribuiscono equamente nelle due buche. Ognuno dei tre indicatori è sensibile al cambiamento di una diversa proprietà del sistema e rendono possibile la conoscenza del regime in cui si trova il sistema o la transizione che sta avvenendo: in dettaglio, l'informazione quantistica di Fisher  $F$  è legata alla fluttuazione delle particelle nelle due buche, la visibilità di coerenza  $\alpha$  stima la visibilità della figura di interferenza della distribuzione di momento dei bosoni, inerente alla proprietà di coerenza del sistema in esame, infine l'entropia di entanglement  $S$  stima il suo grado di correlazione quantistica. Si noterà che rispetto al caso in cui sia presente solo l'interazione effettiva in sito, in presenza di hopping correlato, ossia la capacità del sistema di trasportare un bosone da una buca all'altra legata al numero di bosoni contenuto in una delle due buche, il comportamento del sistema si può differenziare sostanzialmente, portando all'emersione di nuovi ed interessanti effetti, sia dal punto di vista teorico che sperimentale. Nell'ultimo capitolo, molto breve, verranno riassunti i risultati ottenuti.

## Capitolo 2

# Alune nozioni preliminari.

### 2.1 La condensazione di Bose-Einstein.

Le particelle in meccanica quantistica appartengono, in via del tutto generale, alla classe dei bosoni, che seguono la statistica di Bose-Einstein, o a quella dei fermioni, che seguono quella di Fermi-Dirac. Il teorema di spin-statistica assicura che ogni particella se possiede spin intero è un bosone, se possiede spin semi-intero è un fermione. La funzione d'onda di un sistema di bosoni deve risultare simmetrica rispetto lo scambio di qualsiasi coppia di particelle, mentre un sistema di fermioni deve risultare, per la stessa operazione, antisimmetrica.

Seguendo quanto esposto in [10], prendiamo ora in considerazione un sistema di  $N$  bosoni identici non interagenti e a spin nullo, di massa  $m$ , a temperatura  $T$ , posti in un volume finito  $V$  e dunque alla pressione  $P$ , fissata dall'equazione di stato. Il suo operatore Hamiltoniano è, in funzione degli operatori momenti  $\hat{p}_i$ :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \quad (2.1)$$

Lo stato del sistema viene indicato attraverso l'insieme dei numeri di occupazione  $\{n_{\vec{p}}\}$ , ossia la lista ordinata del numero di bosoni  $n_{\vec{p}_k}$  aventi momento, naturalmente quantizzato,  $\vec{p}_k$ , con  $k \in \mathbb{N}$ . La descrizione più agevole avviene nell'ensemble grancanonico, dove diversamente da quanto detto prima  $N$  non viene fissato a priori, ma il numero medio di bosoni  $\langle N \rangle$  viene determinato dalle condizioni del sistema. La funzione di partizione grancanonica del sistema è:

$$\mathcal{Z}(z, V, T) = \sum_{\langle N \rangle=0}^{+\infty} \sum_{\substack{n_{\vec{p}} \\ \sum n_{\vec{p}} = \langle N \rangle}} \prod_{\vec{p}} (ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}})^{n_{\vec{p}}} = \prod_{\vec{p}} \left[ \sum_{n=0}^{+\infty} (ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}})^n \right], \quad (2.2)$$

dove  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , con  $k_B$  la costante di Boltzmann,  $z = e^{\beta\mu}$  è la fugacità, ove  $\mu$  è il potenziale chimico del sistema, mentre  $\epsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m}$  è l'energia competente ad una particella di momento  $\vec{p}$ , dove  $p^2 = |\vec{p}|^2$ . La serie:

$$\mathcal{Z}(z, V, T) = \prod_{\vec{p}} \frac{1}{1 - ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}}}. \quad (2.3)$$

L'equazione di stato è:

$$\frac{PV}{kT} = \ln \mathcal{Z}(z, V, T) = - \sum_{\vec{p}} \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}}), \quad (2.4)$$

e il numero medio di particelle  $\langle N \rangle$ , mediante la quale è possibile eliminare  $z$  dalla (2.4), una volta risolta la serie, per ottenere la pressione in funzione del volume e della temperatura, è:

$$\langle N \rangle = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \mathcal{Z}(z, V, T) = \sum_{\vec{p}} \frac{ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}}}{1 - ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}}}, \quad (2.5)$$

mentre i numeri medi di occupazione  $\langle n_{\vec{p}} \rangle$  dello stato di singola particella a un dato  $\vec{p}$  sono:

$$\langle n_{\vec{p}} \rangle = -\frac{\partial}{\partial(\beta\epsilon_{\vec{p}})} \ln \mathcal{Z}(z, V, T) = \frac{ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}}}{1 - ze^{-\beta\epsilon_{\vec{p}}}}. \quad (2.6)$$

Si noti in particolare che il numero medio di bosoni  $\langle n_0 \rangle$  a  $\vec{p} = 0$  è:

$$\langle n_0 \rangle = \frac{z}{1 - z}. \quad (2.7)$$

Portando ora il volume a limite infinito e passando dalla sommatorie agli integrali nell'equazione di stato (2.4), facendo attenzione alla divergenza che appare solamente nel primo termine della somma relativo a  $\vec{p} = 0$ , si ottiene la seguente equazione di stato per un gas ideale di Bose-Einstein:

$$\begin{aligned} \frac{P}{k_B T} &= \frac{1}{\lambda^3} g_{\frac{3}{2}}(z) - \frac{1}{V} \ln(1 - z) \\ \frac{1}{v} &= \frac{1}{\lambda^3} g_{\frac{3}{2}}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

ove nelle espressioni precedenti  $g_{\frac{q}{2}} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{\frac{q}{2}}}$ , con  $q \in \mathbb{Q}$ ,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ , con  $h$  la costante di Planck,  $\frac{1}{v} = \frac{N}{V}$  è la densità di bosoni del sistema e  $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$  la lunghezza d'onda termica di de Broglie. La funzione  $g_{\frac{3}{2}}(z)$  risulta monotona crescente nell'intervallo  $0 \leq z \leq 1$ , in cui ha senso trovare la soluzione della seconda delle (2.8), con massimo in  $z = 1$ . Ricordando la (2.7) e riscrivendo la (2.8) nella forma:

$$\lambda^3 \frac{\langle n_0 \rangle}{V} = \frac{\lambda^3}{v} - g_{\frac{3}{2}}(z), \quad (2.9)$$

si nota immediatamente che, per temperature e densità alte soddisfacenti la relazione:

$$\frac{\lambda^3}{v} > g_{\frac{3}{2}}(1), \quad (2.10)$$

allora  $\langle n_0 \rangle > 0$ , ovverosia esiste una frazione finita di particelle che occupa il più basso livello energetico del sistema, a  $\vec{p} = 0$ : tale fenomeno è noto come “condensazione di Bose-Einstein”. Naturalmente, senza altre richieste nel sistema coesisteranno una fase condensata, a  $\vec{p} = 0$ , e un'altra di particelle a  $\vec{p} \neq 0$ . La (2.10) presa con l'uguaglianza, a densità  $\frac{1}{v}$  fissata, definisce implicitamente la temperatura critica  $T_c$  sotto la quale si osserva condensato:

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \frac{1}{[vg_{\frac{3}{2}}(1)]^{\frac{2}{3}}}, \quad (2.11)$$

mentre a  $T$  fissata definisce il volume critico  $v_c$ :

$$v_c = \left[ \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right]^{\frac{3}{2}} \frac{1}{g_{\frac{3}{2}}(1)T^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.12)$$

Infine, risolvendo graficamente la seconda delle (2.8) rispetto a  $z$ , si trova che nel caso di (2.10) si ha  $z = 1$  e così, usando questa condizione nella (2.9), la (2.11) e (2.12), si giunge all'espressione per la frazione di condensato, valida nella condizione indicata nella (2.10):

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N} = 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} = 1 - \frac{v}{v_c}. \quad (2.13)$$

Nel seguito si prenderà in considerazione un sistema di bosoni a temperatura nulla: in tal caso, come è semplice notare dalla formula appena scritta, la frazione di condensato è pari ad uno, ovvero tutti i bosoni sono nello stato fondamentale, rendendo visibili fenomeni quantistici macroscopici sul condensato.

## 2.2 Interazioni tra particelle.

In questo paragrafo, vogliamo fornire alcune informazioni su due delle più note interazioni interparticellari esistenti, limitandoci a quelle considerate nel sistema preso in esame nei prossimi capitoli: le interazioni di contatto e dipolare.

Considerando un semplice sistema di due particelle a spin nullo di massa  $m$ , sottoposte ad un potenziale esterno  $U(\vec{r})$  e che interagiscono con un generico potenziale  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  di natura centrale, cioè dipendente solamente dalla mutua distanza delle particelle (una volta fissate le condizioni del sistema), ove  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  sono i loro rispettivi vettori posizione in un qualsiasi sistema di riferimento inerziale, l'operatore Hamiltoniano che lo descrive nel caso di indipendenza dal tempo è del tipo:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}_{\vec{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}_{\vec{r}_2}^2 + \hat{U}(\vec{r}_1) + \hat{U}(\vec{r}_2) + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.14)$$

ove, detto  $\vec{r} = (x, y, z)$ ,  $\hat{\nabla}_{\vec{r}}^2$  è l'operatore Laplaciano, la cui ben nota forma è:

$$\hat{\nabla}_{\vec{r}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.15)$$

Tale sistema viene risolto nella teoria di scattering quantistico, con il metodo della scomposizione in onde parziali [11, 12]. Innanzitutto, l'Hamiltoniano viene riscritto in una parte relativa al moto del centro di massa e in una al moto relativo ad esso, cioè:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}_R(\vec{R}) + \hat{H}_r(\vec{r}), \quad (2.16)$$

dove  $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$  è la coordinata del centro di massa e  $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$  la coordinata relativa. La soluzione del problema agli autovalori e autovettori, che fornisce la parte stazionaria della soluzione, è realmente interessante solo per la seconda parte, essendo quella della prima una semplice onda piana, per la conservazione dell'energia. Prima del contatto la funzione d'onda dello stato iniziale  $\psi_i(\vec{r})$  è semplicemente un'onda piana di particella libera, con ad esempio  $\vec{k} \parallel \hat{z}$ , con  $\vec{k}$  numero d'onda, cioè  $\psi_i(\vec{r}) \approx e^{ikz}$ ; dopo il contatto, una soluzione di  $\hat{H}(\vec{r})$  in condizioni asintotiche (a grandi distanze dal punto dell'urto) è:

$$\psi_f(\vec{r}) \approx e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \psi_i(\vec{r}) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.17)$$

ossia la funzione piana di partenza sovrapposta ad un'onda sferica.  $f(\theta)$  viene chiamata "ampiezza di scattering" perché funge da fattore di ampiezza dell'onda sferica generata dall'urto, dove  $\theta$  è l'angolo di scattering, cioè quello tra il momento relativo delle due particelle iniziale e finale.

È possibile sviluppare  $f(\theta)$  come una serie di onde parziali, mediante l'ausilio dei polinomi di Legendre  $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$  [13], in modo che risulti [12]:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta), \quad (2.18)$$

dove  $l$  indica il numero quantico angolare e  $\delta_l(k)$  è la “fase di scattering”.

L'importanza dell'ampiezza di scattering è sottolineata dal fatto che la sezione d'urto differenziale  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  è data da:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, \quad (2.19)$$

mentre la sezione d'urto totale  $\sigma$  è pari a:

$$\sigma = \int_{-1}^1 d(\cos\theta) |f(\theta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (2.20)$$

Nel seguito ci occuperemo di un sistema con un numero  $N \geq 2$  di bosoni: la generalizzazione a un numero maggiore di due è in effetti semplice sotto l'ipotesi di gas diluito, che impone che la probabilità che avvenga un urto ternario, quaternario o d'ordine maggiore sia molto piccola rispetto a quella di osservarne uno binario; le densità a cui un sistema si può considerare tale sono al massimo dell'ordine di  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

### 2.2.1 L'interazione di contatto.

Un risultato di grande importanza al fine di semplificare la (2.18) stabilisce che per un generico potenziale centrale il cui andamento a grandi distanze  $\sim \frac{1}{r^n}$ , gli angoli di fase  $\delta_l(k)$  scalano, per  $k \rightarrow 0$ , come  $k^{2l+1}$  se  $l < \frac{n-3}{2}$ , altrimenti come  $k^{n-2}$ . Sviluppando l'esponenziale in  $\delta_l$ , si comprende che a questo regime  $f(\theta) \propto \sum_l \delta_l(k)$ . Notiamo che il limite  $k \rightarrow 0$  comporta fisicamente bassi momenti e dunque basse energie di collisione delle particelle, condizioni generalmente soddisfatte alle temperature alle quali si osservano BEC. Il potenziale centrale è tipico, una volta fissate le condizioni del sistema, per una coppia di particelle interagenti secondo un'interazione dipendente solamente dalla loro mutua distanza (il modulo della coordinata  $\vec{r}$  del riferimento del centro di massa). Quando si parla di “potenziali di contatto”, si fa in genere riferimento a interazioni di van der Waals che decadono almeno come  $\frac{1}{r^6}$ : utilizzando il risultato appena riportato, si comprende che in questo caso il contributo di maggior importanza in  $f(\theta)$  è l'onda  $s$ , quella a  $l = 0$ . Allora si ottiene:

$$f(\theta) \approx \frac{\delta_0}{k} = -a_s, \quad (2.21)$$

dove  $a_s$  viene chiamata “lunghezza di scattering” di l'onda  $s$ , determinata esclusivamente dal potenziale. Questo parametro permette di modellizzare dunque il potenziale “reale” di van der Waals con uno pseudopotenziale più semplice, che descriverà d'ora in avanti l'interazione di contatto  $V_F(\vec{r})$  del sistema:

$$V_F(\vec{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\vec{r}). \quad (2.22)$$

Le due principali caratteristiche dell'interazione di contatto, il cui potenziale è stato descritto con due soli parametri, la massa della specie considerata e la lunghezza di scattering, sono da una parte il suo corto raggio d'azione, visto che è addirittura stata formalizzata mediante la delta di Dirac, secondo cui essa è attiva solo se le due particelle sono spazialmente sovrapposte, e comunque anche in realtà essa decade molto velocemente con la distanza, e l'isotropia dall'altra,

cioè la proprietà di non agire diversamente in funzione della direzione spaziale [5]. Sottolineamo, da ultimo, che in sistemi diluiti questa semplice interazione determina molte interessanti proprietà del sistema, come ad esempio la superfluidità.

### 2.2.2 L'interazione dipolare.

Restando al sistema biparticellare di sopra, analizziamo ora l'interazione sussistente tra le due particelle nel caso in cui esse posseggano un momento di dipolo lungo le direzioni  $\vec{e}_1$  e  $\vec{e}_2$ , seguendo quanto esposto in [5]; l'energia dovuta a questa interazione, nel caso non polarizzato, è:

$$V_{dd}^{np}(\vec{r}) = \frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{(\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2)r^2 - 3(\vec{e}_1 \cdot \vec{r})(\vec{e}_2 \cdot \vec{r})}{r^5}, \quad (2.23)$$

dove  $C_{dd}$ , costante di accoppiamento, è pari a  $\mu_0\mu^2$  per particelle con un momento di dipolo magnetico permanente  $\mu$  ( $\mu_0$  è la costante di permeabilità magnetica nel vuoto), mentre  $\frac{d^2}{\epsilon_0}$  per momento di dipolo elettrico  $d$  ( $\epsilon_0$  è la costante di permittività del vuoto). L'andamento spaziale di tipo  $\frac{1}{r^3}$  è ancora più evidente nel caso in cui si agisca polarizzando le particelle in modo che  $\vec{e}_1 \parallel \vec{e}_2$ :

$$V_{dd}(\varphi) = \frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{1 - 3\cos^2\varphi}{r^3}, \quad (2.24)$$

dove  $\varphi$  è l'angolo tra  $\vec{r}$  e il versore  $\vec{e}$  di polarizzazione, coincidente quindi col versore di dipolo di entrambe le particelle.

L'interazione dipolo-dipolo presenta alcune caratteristiche in forte contrasto con l'interazione di contatto che abbiamo analizzato nella precedente sottoparagrafo. La prima differenza sta nella sua azione a lungo raggio: ciò è immediatamente constatabile dalle forme delle interazioni (2.22) e (2.23) o (2.24). Un'importante conseguenza di tale comportamento è che mentre con la sola interazione di contatto l'energia del sistema di due particelle risulta estensivo in limite termodinamico (essenzialmente nel limite di condizioni periodiche al contorno), in compresenza di interazione dipolare non lo è più: mentre dunque nel primo caso l'energia dipende solo dalla densità, nel secondo caso, intensivo, dipende anche dal numero totale di particelle. Una seconda differenza sta nell'anisotropia della interazione dipolare, deducibile ancora una volta confrontandone la forma analitica con quella a contatto. Riducendosi per chiarezza al caso polarizzato, la simmetria angolare di tale interazione è del tipo  $P_2(\cos\varphi)$ , cioè di un'onda  $d$ , con  $l = 2$ , che comporta periodicità  $\pi$  ( $V_{dd}(\varphi) = V_{dd}(\varphi + \pi)$ ) e parità ( $V_{dd}(\varphi) = V_{dd}(-\varphi)$ ), cioè fisicamente un'identità del potenziale per configurazioni di  $\vec{e}$  simmetriche sia di asse  $\vec{r}$  che di asse ad esso ortogonale. Si può dunque lasciar variare  $\varphi$  solo da 0 a  $\frac{\pi}{2}$  per l'analisi del potenziale, notando che il fattore  $1 - 3\cos^2\varphi$  si sposta da -2 a 1 e dunque l'interazione risulta attrattiva per  $0 \leq \varphi < \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$ , cioè in una configurazione simile ad avere le particelle una sopra l'altra, a testa-coda, e repulsiva per  $\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) < \varphi \leq \frac{\pi}{2}$ , vicini ad una configurazione nella quale una particella sta affianco all'altra. Nello specialissimo caso in cui  $\varphi = \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$  l'interazione di dipolo si annulla. Da ultimo, se ritorniamo al risultato notevole riportato al principio del sottoparagrafo precedente, riguardante le proprietà della fase di scattering, si comprende subito che nel caso di interazione dipolare, essendo l'andamento del potenziale inversamente proporzionale a  $r^3$ , per particelle di bassa energia si ha  $\delta_l(k) \approx k$  per qualunque valore di  $l$ , e perciò tutte le onde parziali contribuiscono con il medesimo peso all'ampiezza di scattering  $f(\theta)$ , accoppiandosi tra loro e rendendo impossibile una modellizzazione a corto raggio, come fatto in precedenza.

## 2.3 La seconda quantizzazione.

Ci preoccupiamo ora di esporre i fondamenti di teoria quantistica di campo, o seconda quantizzazione, limitatamente al caso di materia bosonica. Questo formalismo è stato sviluppato dai tardi anni '20 agli anni '50 del secolo scorso da molti fisici, tra i quali spiccano P. A. M. Dirac, W. Pauli, R. P. Feynman, E. Wigner e P. Jordan, per correggere alcune imperfezioni della formulazione quantistica precedente, introducendo oggetti estremamente potenti soprattutto per ottenere una descrizione chiara e semplice di un sistema di più particelle, anche non conservate. In particolare ci occuperemo della seconda quantizzazione del campo di materia non relativistico, o campo di Schrödinger, giungendo ad esprimerlo come un'infinita somma di oscillatori armonici, quantizzati mediante l'uso degli operatori armonici di creazione e distruzione, agenti sullo spazio di Fock [14]. Questo tuttavia è un risultato piuttosto tardo, storicamente parlando, della teoria di campo quantistica, poiché la sua prima formulazione avvenne in ambito di fisica delle particelle ad alta energia, riuscendone a fornire una versione relativisticamente coerente; solo in seguito questa teoria venne estesa proficuamente anche alla fisica della materia condensata.

Si consideri innanzitutto un Hamiltoniano di  $N$  bosoni identici di massa  $m$  non interagenti e sottoposti ad un potenziale  $U(\vec{r})$ , identificate dalle posizioni  $\vec{r}_i$ :

$$\hat{H}^N = \sum_{i=1}^N \hat{H}(\vec{r}_i) = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}_{\vec{r}_i}^2 + \hat{U}(\vec{r}_i) \right]. \quad (2.25)$$

Indicate con  $u_\alpha(\vec{r}) = \{u_{\alpha_1}(\vec{r}_1), u_{\alpha_2}(\vec{r}_2), \dots, u_{\alpha_N}(\vec{r}_N)\}$  un insieme completo ortonormale di funzioni d'onda di singola particella relative ad ogni  $\hat{H}(\vec{r}_i)$  presente in  $\hat{H}^N$ , dove  $\alpha = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$  è un multiindice dove ogni  $\alpha_i$  indica un insieme di numeri quantici identificativi di ogni stato possibile per la  $i$ -esima particella, una generale funzione d'onda soluzione del problema agli autovettori per la (2.25) è:

$$\Psi_\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P u_{P\alpha_1}(\vec{r}_1) u_{P\alpha_2}(\vec{r}_2) \dots u_{P\alpha_N}(\vec{r}_N), \quad (2.26)$$

dove la somma  $\sum_P$  è la somma su tutte le permutazioni possibili degli indici. La formulazione è molto pesante e la rende inadatta ad essere utilizzata per studi più complessi; Wigner e Jordan, sulla base degli analoghi studi sui fotoni di Dirac, suggerirono di spostare l'attenzione dalle particelle ad un campo quantistico  $\psi(\vec{r}, t)$  che ne controlla la dinamica, di forma esattamente analoga alla funzione d'onda di singola particella soluzione dell'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}_{\vec{r}}^2 + \hat{U}(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}' \psi(\vec{r}, t). \quad (2.27)$$

Denotate con  $\phi_\gamma(\vec{r})$  le autofunzioni ortonormali relative agli autovalori  $\epsilon_\gamma$  dell'Hamiltoniano  $\hat{H}'$ , che è indipendente dal tempo e dunque rende possibile una scomposizione spaziale e temporale di  $\psi(\vec{r}, t)$ , Wigner e Jordan dimostrarono che essa può essere scomposta come:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_\gamma a_\gamma(t) \phi_\gamma(\vec{r}), \quad (2.28)$$

dove  $a_\gamma(t)$  sono funzioni, in genere complesse, soluzioni dell'equazione di Schrödinger  $i\hbar \dot{a}_\gamma(t) = \epsilon_\gamma a_\gamma(t)$  e cioè della forma  $a_\gamma(t) = a_\gamma(0) e^{-\frac{i\epsilon_\gamma t}{\hbar}}$ . Ora si consideri il valor medio di  $\hat{H}'$ , cioè  $H = \langle \psi(\vec{r}, t) | H | \psi(\vec{r}, t) \rangle$ : esplicitando le operazioni si ha:

$$H(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{r} \psi(\vec{r}, t)^* \hat{H}' \psi(\vec{r}, t), \quad (2.29)$$

che risolto con poca fatica dà come risultato:

$$H(t) = \sum_{\gamma} a_{\gamma}^*(t) a_{\gamma}(t) \epsilon_{\gamma} = \sum_{\gamma} \frac{\epsilon_{\gamma}}{2} (a_{\gamma}^*(t) a_{\gamma}(t) + a_{\gamma}(t) a_{\gamma}^*(t)). \quad (2.30)$$

Ora, con il cambio di coordinate seguente:

$$\begin{aligned} q_{\gamma}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\gamma}}} (a_{\gamma}(t) + a_{\gamma}^*(t)) \\ p_{\gamma}(t) &= -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\gamma}}{2}} (a_{\gamma}(t) - a_{\gamma}^*(t)), \end{aligned} \quad (2.31)$$

si giunge alla forma seguente per  $H$ :

$$H = \sum_{\gamma} \left( \frac{p_{\gamma}^2}{2} + \frac{1}{2} \omega_{\gamma}^2 q_{\gamma}^2 \right), \quad (2.32)$$

dove la dipendenza temporale delle coordinate è stata omessa, come usualmente si trova, e  $\omega_{\gamma} = \frac{\epsilon_{\gamma}}{\hbar}$ : come si nota, l'energia è quella di una serie infinita di oscillatori armonici di frequenze  $\omega_{\gamma}$ . Punto fondamentale del processo di seconda quantizzazione, sta nel promuovere le coordinate  $(q_{\gamma}, p_{\gamma})$  ad operatori,  $(\hat{q}_{\gamma}, \hat{p}_{\gamma})$ , soddisfacenti la relazione  $[\hat{q}_{\gamma}, \hat{p}_{\lambda}] = i\hbar\delta_{\gamma\lambda}$ . Ciò che prima era un numero,  $H$ , ora è un operatore quantistico  $\hat{H}$ , precisamente quello di una serie infinita di oscillatori armonici:

$$\hat{H} = \sum_{\gamma} \left( \frac{\hat{p}_{\gamma}^2}{2} + \frac{1}{2} \omega_{\gamma}^2 \hat{q}_{\gamma}^2 \right). \quad (2.33)$$

Come è d'uso comune in tal caso, si introducono gli operatori di creazione e distruzione  $\hat{a}_{\gamma}^{\dagger}$  e  $\hat{a}_{\gamma}$ , definiti come:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\gamma}^{\dagger} &= \sqrt{\frac{\omega_{\gamma}}{2\hbar}} \left( \hat{q}_{\gamma} - \frac{i}{\omega_{\gamma}} \hat{p}_{\gamma} \right), \\ \hat{a}_{\gamma} &= \sqrt{\frac{\omega_{\gamma}}{2\hbar}} \left( \hat{q}_{\gamma} + \frac{i}{\omega_{\gamma}} \hat{p}_{\gamma} \right), \end{aligned} \quad (2.34)$$

che soddisfano le ben note regole:  $[\hat{a}_{\gamma}, \hat{a}_{\lambda}^{\dagger}] = 0$ ,  $[\hat{a}_{\gamma}, \hat{a}_{\lambda}] = \delta_{\gamma\lambda} = [\hat{a}_{\lambda}^{\dagger}, \hat{a}_{\gamma}^{\dagger}]$ . Per ogni  $\gamma$  è poi definito l'operatore numero  $\hat{N}_{\gamma} = \hat{a}_{\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{\gamma}$ . Sotto tale trasformazione l'Hamiltoniano  $\hat{H}$  diviene  $\hat{H}_{\gamma} = \sum_{\gamma} \epsilon_{\gamma} (\hat{a}_{\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{\gamma})$ , che, riscalata per  $\sum_{\gamma} \frac{1}{2} \epsilon_{\gamma}$  e utilizzando gli operatori numero può essere riscritta come:

$$\sum_{\gamma} \epsilon_{\gamma} \hat{N}_{\gamma}, \quad (2.35)$$

che è l'Hamiltoniano di seconda quantizzazione per un insieme di particelle non interagenti. È importante notare che gli operatori di costruzione e distruzione armonici introdotti agiscono sullo spazio numero di Fock, i cui raggi vettori sono genericamente scritti nel modo seguente:

$$|\dots n_{\alpha} \dots n_{\beta} \dots n_{\gamma} \dots\rangle, \quad (2.36)$$

col significato che vi sono  $n_{\alpha}$  particelle nello stato di singola particella  $|\alpha\rangle$ ,  $n_{\beta}$  in  $|\beta\rangle$  e così a seguire. Gli stati di singola particella sono tali che  $\langle \vec{r} | \gamma \rangle = \phi_{\gamma}(\vec{r})$ . Il perché degli attributi "creazione" e "distruzione" è lampante dal tipo di azione che essi hanno sugli stati:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\gamma}^{\dagger} |\dots n_{\gamma} \dots\rangle &= \sqrt{n_{\gamma} + 1} |\dots n_{\gamma} + 1 \dots\rangle, \\ \hat{a}_{\gamma} |\dots n_{\gamma} \dots\rangle &= \sqrt{n_{\gamma}} |\dots n_{\gamma} - 1 \dots\rangle. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Lo stato vuoto è definito  $|0\rangle = |\dots 0\dots 0\dots\rangle$ .

A questo punto, si introducono gli operatori bosonici quantistici di campo:  $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$  e il suo aggiunto  $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)$ . La forma di  $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$  è:

$$\hat{\psi}(\vec{r}, t) = \sum_{\gamma} \hat{a}_{\gamma}(t) \phi_{\gamma}(\vec{r}), \quad (2.38)$$

e analogamente per il suo aggiunto.  $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$  distrugge un bosone presente all'istante  $t$  nella posizione  $\vec{r}$ , mentre  $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)$  crea dallo stato vuoto un bosone all'istante  $t$  nella posizione  $\vec{r}$ :

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\vec{r}, t) |\vec{r}, t\rangle &= |0\rangle, \\ \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) |0\rangle &= |\vec{r}, t\rangle. \end{aligned} \quad (2.39)$$

La regola di commutazione cui obbediscono tali operatori è, a tempo fissato:

$$\left[ \hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', t) \right] = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.40)$$

Mediante questo utile strumento, si riassume il calcolo del valor medio dell'energia (2.30), il cambio delle coordinate (2.31) che la porta nella forma (2.32), la promozione delle coordinate ad operatori fatta in (2.33) e l'introduzione degli operatori di creazione e distruzione per approdare infine al risultato finale in (2.35), semplicemente sostituendo fin dall'espressione integrale di  $H$ , nell'espressione (2.29), il campo di Schrödinger  $\psi(\vec{r}, t)$  con l'operatore bosonico di campo  $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$ , cosicché  $H$  venga subito promosso ad operatore  $\hat{H}$ , elegantemente scritto in forma integrale come in seguito:

$$\hat{H}(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{H}' \hat{\psi}(\vec{r}, t). \quad (2.41)$$

In prima quantizzazione, un sistema di  $N$  particelle interagenti fra loro a coppie con una forza di potenziale  $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$  e sottoposte a un potenziale esterno  $U(\vec{r}_i)$ , viene descritto dall'Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{int}^N = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}_{\vec{r}_i}^2 + \hat{U}(\vec{r}_i) \right] + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^N \hat{V}(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad (2.42)$$

in principio molto chiara, ma poco maneggevole dal punto di vista analitico e computazionale. Utilizzando gli operatori bosonici di campo,  $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$  e il suo coniugato, si può immediatamente scrivere la forma integrale dell'Hamiltoniano di seconda quantizzazione del sistema, ovvero:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}_{\vec{r}_i}^2 + \hat{U}(\vec{r}_i) \right] \hat{\psi}(\vec{r}, t) + \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{V}(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}', t) \hat{\psi}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Per comprendere anche visivamente la grande semplificazione e chiarificazione apportata alla descrizione, basta esplicitare la forma degli operatori di campo negli integrali, ottenendo:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{\gamma} \epsilon_{\gamma} \hat{a}_{\gamma}^\dagger \hat{a}_{\gamma} + \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} V_{\gamma\delta\alpha\beta} \hat{a}_{\gamma}^\dagger \hat{a}_{\delta}^\dagger \hat{a}_{\alpha} \hat{a}_{\beta}, \quad (2.44)$$

ove  $V_{\gamma\delta\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \phi_{\gamma}^*(\vec{r}, t) \phi_{\delta}^*(\vec{r}', t) V(\vec{r} - \vec{r}') \phi_{\alpha}(\vec{r}', t) \phi_{\beta}(\vec{r}, t)$ . Significativamente,  $\hat{H}_{int}$  è scritta in funzione dei parametri numerici  $\epsilon_{\gamma}$  e  $V_{\gamma\delta\alpha\beta}$  e degli operatori di creazione e distruzione, le cui azioni sullo spazio numero di Fock, dominio di definizione di  $\hat{H}_{int}$ , sono semplici e conosciute.

## 2.4 L'operatore densità.

In Meccanica Quantistica gli stati in cui può trovarsi un sistema possono essere genericamente suddivisi in puri o non puri (misti): nel primo caso si dice che lo stato è completamente noto, in quanto si conosce un sistema completo di osservabili compatibili che lo determinano interamente, nel secondo invece no. Seguendo la strada percorsa in [15], dato un generico spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  e considerato lo stato  $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$  completamente noto all'istante  $t$ , esso si può sviluppare in una base ortonormale di  $\mathcal{H}$  come:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |u_n\rangle, \quad (2.45)$$

con  $\sum_n |c_n(t)|^2 = 1$ , che indica che  $|\psi(t)\rangle$  è normalizzato. Introdotta una qualsiasi osservabile  $\hat{A}$ , si ha:

$$\langle u_n | \hat{A} | u_p \rangle = A_{np}, \quad (2.46)$$

e così il valor medio di  $\hat{A}$  è solitamente espresso nel modo seguente:

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np}. \quad (2.47)$$

In questo caso, è possibile una differente, seppur equivalente, formulazione del problema mediante l'introduzione dell'operatore densità  $\hat{\rho}(t)$  definito come:

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (2.48)$$

Tale operatore è evidentemente Hermitiano, dato che  $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}^\dagger(t)$ , e il suo generico elemento di matrice è:

$$\hat{\rho}_{pn}(t) = \langle u_p | \hat{\rho}(t) | u_n \rangle = \langle u_p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t). \quad (2.49)$$

Risulta semplice dimostrare che la normalità di  $|\psi(t)\rangle$ , cioè la conservazione della probabilità, in questo formalismo si esprime:

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \rho_{nn}(t) = \text{Tr } \hat{\rho}(t) = 1, \quad (2.50)$$

mentre il valor medio di  $A$  come di seguito:

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \text{Tr } [\hat{\rho}(t) \hat{A}]. \quad (2.51)$$

È semplice accertarsi che un operatore densità descrive uno stato puro: infatti, solo nel caso puro sono valide le due relazioni seguenti:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &= \hat{\rho}, \\ \text{Tr } \hat{\rho}^2 &= 1. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Si ricorda che nei capitoli successivi si prenderà in considerazione, come già anticipato nell'Introduzione, solo lo stato fondamentale del sistema, che verrà trovato risolvendo l'equazione agli autovalori e autovettori del suo Hamiltoniano: dunque evidentemente si sarà in presenza di uno stato puro.

Nel caso di stato non puro, una situazione tipica è la conoscenza solo di un sottoinsieme di osservabili compatibili, così da non conoscere completamente lo stato del sistema: qui l'obiettivo sta nel possedere uno strumento che raccolga tutta l'informazione conosciuta per un siffatto stato. Tale strumento è l'operatore densità. Se infatti si sa che lo stato, all'istante  $t$ , può essere

con probabilità  $p_1(t)$  lo stato  $|\psi_1(t)\rangle$ , oppure con probabilità  $p_2(t)$  lo stato  $|\psi_2(t)\rangle$ , oppure con probabilità  $p_k(t)$  lo stato  $|\psi_k(t)\rangle$  e così via, con la condizione che  $\sum_k p_k(t) = 1$ , si può definire l'operatore densità  $\hat{\rho}(t)$  come:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k p_k(t) \hat{\rho}_k(t) = \sum_k p_k(t) |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|, \quad (2.53)$$

che soddisfa la condizione di conservazione della probabilità poiché, ricordando la (2.50), si ha:

$$\text{Tr } \hat{\rho}(t) = \text{Tr} \left[ \sum_k p_k(t) \hat{\rho}_k(t) \right] = \sum_k p_k(t) \text{Tr} [\hat{\rho}_k(t)] = \sum_k p_k(t) = 1, \quad (2.54)$$

mentre il valor medio di  $A$  è:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} [\hat{\rho}(t) \hat{A}]. \quad (2.55)$$

È necessario ora puntualizzare alcuni aspetti. Emerge evidentemente come lo stato puro sia un caso particolare di quello non puro, dove avviene che tutte le probabilità  $p_k(t)$  sono nulle eccetto una, che è pari a uno, fatto che esprime la certezza che all'istante  $t$  lo stato è completamente determinato. Inoltre, uno stato non puro non va mai confuso con uno del tipo  $\sum_k c_k(t) \psi_k(t)$ , combinazione lineare di stati  $\psi_k(t)$ , che è puro. Infine, a differenza di quest'ultimo stato, descritto da un raggio vettore che determina in genere importanti fenomeni di interferenza quantistica, uno stato non puro, cioè una miscela statistica di più stati puri possibili pesati con le relative probabilità, non può essere descritto mediante un raggio vettore medio, ma solo da un "operatore medio", in modo che non si possano ottenere le precedenti interferenze tra gli stati presenti nella miscela. Dunque, l'analogia tra vettore di stato e operatore di densità è valida solamente per stati puri, altrimenti essa cade: si comprende dunque perché la descrizione più generale possibile per uno stato quantistico è, in ogni caso, l'operatore densità.

Si consideri ora un sistema bipartito, ossia con raggi vettori appartenenti allo spazio Hilbertiano  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , fornito di una base  $\{|\sigma_{mn}\rangle\} = \{|u_m\rangle_1 \otimes |v_n\rangle_2\}$ , prodotto tensore delle basi rispettivamente di  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ . Dato un sistema fisico che è possibile bipartire in due parti, dette 1 e 2, uno stato puro del sottosistema 1 può essere scritto come:

$$|\chi\rangle_1 = \sum_m a_m |u_m\rangle_1, \quad (2.56)$$

mentre uno stato puro del sistema 2 può essere scritto come:

$$|\phi\rangle_2 = \sum_n b_n |v_n\rangle_2. \quad (2.57)$$

Uno stato bipartito puro del sistema originario espresso nello spazio di Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , sarà esprimibile come:

$$|\Psi\rangle_{12} = \sum_{mn} c_{mn} |u_m\rangle_1 |v_n\rangle_2 = \sum_{mn} c_{mn} |\sigma_{mn}\rangle. \quad (2.58)$$

Tale stato sarà separabile se può essere scritto nella maniera seguente:

$$|\Psi\rangle_{12} = |\chi\rangle_1 |\phi\rangle_2, \quad (2.59)$$

ovvero come prodotto diretto di uno stato puro appartenente ad  $\mathcal{H}_1$  e uno stato puro appartenente ad  $\mathcal{H}_2$ . Nei sistemi quantistici complessi, costituiti da più parti come il modello bipartito di cui si sta parlando, in via del tutto generale è possibile che si trovino stati separabili o "non entangled",

quando le matrici densità che li descrivono possono venir espresse solo mediante quei componenti della base ortonormale  $|\psi_{mn}\rangle = |u_m\rangle_1 \otimes |v_n\rangle_2$  tali che  $|u_m\rangle_1 \in \mathcal{H}_1$  e  $|v_n\rangle_2 \in \mathcal{H}_2$ , cioè quando esse possono essere fattorizzate mediante le matrici densità relative a ciascuna parte del sistema considerato, oppure stati non separabili o “entangled” nel caso si necessiti anche degli altri vettori di base generati dal prodotto tensoriale, e dunque non sia possibile fattorizzare la matrice come in precedenza [11]. Torneremo anche nel prossimo capitolo su questo tema. Nel caso di un sistema bipartito, l’operatore densità  $\hat{\rho}$  è naturalmente definito in  $\mathcal{H}$ : si può però rendere necessario restringere l’azione dell’operatore ai singoli spazi di Hilbert, per descrivere lo stato di ciascun sottosistema. Si vorrebbe cioè ottenere  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ , ove  $\tilde{\rho}_1 = \hat{\rho}_1 \otimes \text{Id}_2$  e analogamente per  $\tilde{\rho}_2$ . Ciò è possibile solo se il sistema 1 non è correlato al 2, per cui si ha  $|\Psi_{12}\rangle = |\chi\rangle_1 |\phi\rangle_2$  e dunque  $\hat{\rho}_1 = |\chi\rangle_1 \langle \chi|$  e  $\hat{\rho}_2 = |\phi\rangle_2 \langle \phi|$ . Per ricavare questi due operatori da  $\hat{\rho}$ , si utilizza per definizione la traccia parziale  $\text{Tr}_k$ :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_1 &= \text{Tr}_2 \hat{\rho}, \\ \hat{\rho}_2 &= \text{Tr}_1 \hat{\rho}.\end{aligned}\tag{2.60}$$

Se le due parti sono correlate, una scrittura mediante prodotto tensore delle (2.60) non uguaglia la matrice densità del sistema. Tuttavia, in tal caso le (2.60) si rivelano utili per quantificare il grado di correlazione tra le due parti del sistema. Una proprietà molto utile dell’operazione di tracciamento parziale è la seguente:

$$1 = \text{Tr} \hat{\rho} = \text{Tr}_1 [\text{Tr}_2 \hat{\rho}] = \text{Tr}_2 [\text{Tr}_1 \hat{\rho}],\tag{2.61}$$

che comporta il fatto che sia  $\hat{\rho}_1$  che  $\hat{\rho}_2$  hanno traccia unitaria. Concludiamo osservando che dato un operatore  $\tilde{A}_1 = \hat{A}_1 \otimes \text{Id}_2$ , il suo valor medio è dato da:

$$\langle \tilde{A}_1 \rangle = \text{Tr} [\hat{\rho}_1 \hat{A}_1].\tag{2.62}$$

## 2.5 L’entropia di von Neumann.

Si introduce ora un valido indicatore che è in grado di quantificare non solo l’informazione quantistica contenuta in un generico sistema, ma anche il grado di entanglement di un sistema bipartito che si trovi in uno stato puro: l’entropia di von Neumann [16], funzione della matrice densità secondo la forma:

$$S(\hat{\rho}) = -\text{Tr} [\hat{\rho} \log_2 \hat{\rho}].\tag{2.63}$$

Si riportano di seguito alcune caratteristiche matematiche di  $S(\hat{\rho})$ .

- *Stati puri.* Per uno stato puro  $\varsigma$ , per cui  $\hat{\rho} = |\varsigma\rangle \langle \varsigma|$ , si ha  $S(\hat{\rho}) = 0$ .
- *Invarianza.*  $S(\hat{\rho})$  rimane invariata per un cambio di base unitario:

$$S(\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^{-1}) = S(\hat{\rho}).\tag{2.64}$$

- *Massimo.* Se  $\hat{\rho}$  ha  $r$  autovalori non nulli, allora:

$$S(\hat{\rho}) \leq \log_2 r,\tag{2.65}$$

e l’uguaglianza è valida se tutti gli autovalori sono uguali.

- *Concavità.* Se lo stato è una miscela di  $n$  stati, allora dati  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \geq 0$  con  $\sum_{k=1}^n \lambda_k = 1$  vale:

$$S(\lambda_1 \hat{\rho}_1 + \lambda_2 \hat{\rho}_2 + \dots + \lambda_n \hat{\rho}_n) \geq \lambda_1 S(\hat{\rho}_1) + \lambda_2 S(\hat{\rho}_2) + \dots + \lambda_n S(\hat{\rho}_n), \quad (2.66)$$

cioè l'entropia è tanto più grande quanto meno sappiamo sullo stato del sistema.

- *Subadditività.* Considerato un sistema bipartito con stato  $\hat{\rho}_{12}$ , vale, date le definizioni (2.60):

$$S(\hat{\rho}_{12}) \leq S(\hat{\rho}_1) + S(\hat{\rho}_2), \quad (2.67)$$

dove l'uguaglianza vale per stati bipartiti non correlati, per cui  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ . Perciò, nel caso non correlato l'entropia è additiva, altrimenti l'entropia complessiva è minore di quella delle parti. Questa proprietà limita superiormente l'entropia di un sistema bipartito.

- *Disuguaglianza triangolare.* Per un sistema bipartito si ha:

$$S(\hat{\rho}_{12}) \geq |S(\hat{\rho}_1) - S(\hat{\rho}_2)|, \quad (2.68)$$

che fornisce un limite inferiore all'entropia di questo sistema. Notiamo che nel caso un sistema bipartito si trovi in uno stato puro allora  $S(\hat{\rho}_{12}) = 0$ , ma  $S(\hat{\rho}_1) = S(\hat{\rho}_2)$  sono non nulli se lo stato è entangled: questo caso mette in luce il fatto che se noi conosciamo perfettamente solo la modalità in cui è stato preparato il sistema bipartito, e dunque il suo stato, lo stesso non vale per i suoi sottosistemi, osservando separatamente i quali non possiamo riportarci alla conoscenza completa della preparazione del sistema unitario, e tale ignoranza viene immagazzinata in correlazione quantistica, che per essi è uguale ma non nulla: ecco dunque lo strumento necessario alla quantificazione dell'entanglement di un sistema posto in uno stato bipartito puro, come quello che ci apprestiamo a studiare dal prossimo capitolo.

## Capitolo 3

### Il sistema.

Il sistema in esame è costituito da un numero finito,  $N$ , di bosoni dipolari identici confinati in una geometria a doppia buca unidimensionale a temperatura nulla ( $T = 0$ ).

Supporremo che tali bosoni siano confinati da un potenziale intrappolante  $V_{trap}$  dato dalla somma di un potenziale armonico isotropo nelle direzioni radiali ( $y, z$ ) e di un potenziale simmetrico  $V_{DW}$  a doppia buca generato lungo la direzione assiale ( $x$ ). Dunque:

$$\begin{aligned} V_{trap}(\vec{r}) &= V_H(y, z) + V_{DW}(x), \\ V_H &= \frac{1}{2}m\omega^2(y^2 + z^2), \end{aligned} \quad (3.1)$$

dove  $m$  è la massa dei bosoni e  $\omega$  la frequenza di intrappolamento nel piano trasverso. D'ora in avanti, assumendo di essere in presenza di un intensissimo confinamento trasverso, il sistema in oggetto potrà essere considerato, praticamente, come unidimensionale. La Fig. 3.1 mostra un tipico potenziale a doppia buca unidimensionale.

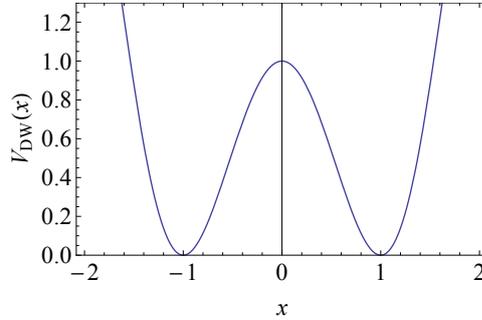


Figura 3.1: Tipica forma del potenziale  $V_{DW}$ .

Si definisca ora  $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$  il vettore posizione dell' $i$ -esimo bosone nella terna  $Oxyz$ . Accanto ai precedenti due termini di tipo esterno, ve ne sono altrettanti di interazione tra bosoni, di cui si è già parlato: uno a breve raggio, di contatto, del tipo di Fermi come in (2.22),  $V_F(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = g\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ , e uno a lungo raggio, caratteristico della natura dipolare dei bosoni come in (2.24),  $V_{dd}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \Upsilon \frac{1-3\cos^2\varphi}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3}$ , ove  $i \neq j$  sempre.

Gli argomenti trattati nel presente capitolo sono: l'operatore Hamiltoniano del sistema [7] e i

tre indicatori che verranno utilizzati nel Capitolo 4 per caratterizzare lo stato fondamentale del sistema stesso in termini delle sue proprietà di correlazione [8].

## 3.1 L'operatore Hamiltoniano.

### 3.1.1 L'operatore Hamiltoniano di prima quantizzazione.

L'operatore Hamiltoniano di prima quantizzazione, brevemente  $\hat{H}^*$ , agisce sopra vettori appartenenti allo spazio di Hilbert  $\mathcal{H} = \otimes^N \mathcal{L}^2(D)$ , ove  $D$  è la porzione di  $\mathbb{R}^3$  ove possono essere presenti i bosoni.  $D_x$  è la proiezione di  $D$  lungo  $x$ , di fatto il dominio fisico nelle nostre ipotesi.  $\hat{H}^*$  si costruisce sommando i termini cinetici e potenziali che agiscono nel sistema. I primi si possono scrivere come:

$$\hat{K}^* = \sum_{i=1}^N \hat{\nabla}_{\vec{r}_i}^2 = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right),$$

mentre i secondi possono essere scritti  $\hat{V}^* = \hat{V}_{DW}^* + \hat{V}_H^* + \hat{V}_F^* + \hat{V}_{dd}^*$ , ovvero:

$$\hat{V}^* = \sum_{i=1}^N \left( \hat{V}_{DW}^*(x_i) + \frac{1}{2} m \omega^2 (y_i^2 + z_i^2) \right) + \sum_{\substack{i,j=0 \\ i>j}}^N \left( g \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + \Upsilon \frac{1 - 3 \cos^2 \varphi}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \right).$$

Risulta quindi essere:

$$\hat{H}^* = \hat{K}^* + \hat{V}^*,$$

l'operatore Hamiltoniano di prima quantizzazione.

### 3.1.2 L'operatore Hamiltoniano di seconda quantizzazione.

Tale operatore  $\hat{H}$  agisce, a differenza di  $\hat{H}^*$ , nello spazio Hilbertiano di Fock delle particelle del campo di Schrödinger, il cui generico raggio vettore è  $|\dots n_\alpha \dots n_\beta \dots n_\gamma \dots\rangle$ , che indica la presenza di  $n_\alpha$  particelle nello stato di singola particella  $|\alpha\rangle$  e così via; nello specifico sistema in esame esso sarà  $|i, N-i\rangle = |i\rangle_L \otimes |N-i\rangle_R$ , che indica che  $i$  degli  $N$  bosoni sono nella buca di sinistra e i restanti in quella destra.

Per giungere a  $\hat{H}$  è necessario introdurre l'operatore bosonico di campo  $\hat{\psi}(\vec{r})$ . In base alla forma del potenziale considerato, esso si fattorizza in un termine  $(x)$ -dipendente e in uno  $(y, z)$ -dipendente, nella forma seguente:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \hat{\phi}(x) \xi(y, z), \quad (3.2)$$

ove  $\xi(y, z) = \frac{e^{-\frac{y^2+z^2}{2l^2}}}{\sqrt{\pi}l}$  con  $l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ , che si riconosce subito essere il prodotto delle due autofunzioni fondamentali per l'oscillatore armonico nelle direzioni considerate. In virtù del fatto che per un sistema a doppia buca gli autostati si dispongono in doppietti energetici quasi degeneri di parità fissata data la simmetria del potenziale  $V_{DW}(x)$  per inversione dell'asse  $x$ , in cui lo stato a energia più bassa è pari e l'altro dispari, per la componente  $x$  si può ipotizzare che, essendo i bosoni a  $T = 0$ , essi possano trovarsi solo nel doppietto fondamentale, ossia nei primi due autostati  $\phi_0(x)$  e  $\phi_1(x)$  di buca di potenziale, cosicché si possano costruire due funzioni d'onda ben localizzate nelle due buche,  $\phi_{L,R} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0(x) \pm \phi_1(x))$ , in modo che  $\hat{\phi}(x)$  si possa scrivere nella forma:

$$\hat{\phi}(x) = \hat{a}_L \phi_L(x) + \hat{a}_R \phi_R(x), \quad (3.3)$$

che viene costruita con gli operatori di distruzione quantistici di un bosone rispettivamente nella buca di sinistra e destra: tale scrittura rappresenta la cosiddetta approssimazione a due stati (two-mode approximation). Risulta infine:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \psi_L(\vec{r})\hat{a}_L + \psi_R(\vec{r})\hat{a}_R = \frac{e^{-\frac{y^2+z^2}{2l^2}}}{\sqrt{\pi}l} \left( \hat{a}_L\phi_L(x) + \hat{a}_R\phi_R(x) \right).$$

Allora basta svolgere l'integrazione seguente nel dominio D per ottenere  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[ \hat{K}^* + \hat{V}_{DW}^* + \hat{V}_H^* \right] \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \left[ \hat{V}_F^* + \hat{V}_{dd}^* \right] \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}).$$

Per come sono state scritte, le funzioni  $\xi(y, z)$  e  $\phi_{L,R}(x)$  sono reali e dunque identiche alle loro coniugate. Si ricordano le regole di commutazione per gli operatori di distruzione e creazione (il suo aggiunto)  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]$ ,  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}$  e la definizione  $\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ , dove  $i, j = L, R$ , essenziali per svolgere l'integrale nel modo più chiaro possibile. Si riportano ora, con qualche commento, i risultati analitici ottenuti per l'integrale, che per chiarezza è stato scisso in elementi più semplici.

- Si consideri il primo termine dell'integrale per  $\hat{H}$ :

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(1)} &= \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[ \hat{K}^* + \hat{V}_{DW}^* + \hat{V}_H^* \right] \hat{\psi}(\vec{r}) = \\ &= \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[ \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2} m\omega^2 (y^2 + z^2) + \hat{V}_{DW}^*(x) \right] \hat{\psi}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Ora utilizzando la forma 3.2 e integrando sopra  $(y, z)$  si ottiene, nel dominio  $D_x$ :

$$\hat{H}^{(1)} = \int dx \hat{\phi}^\dagger(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}_{DW}^* + \hbar\omega \right] \hat{\phi}(x),$$

e passando poi alla forma (3.3) è possibile ottenere:

$$\hat{H}^{(1)} = \varepsilon_L \hat{N}_L + \varepsilon_R \hat{N}_R + J_{RL} \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L + J_{LR} \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R, \quad (3.5)$$

con  $\varepsilon_i = \int dx \phi_i(x) \left[ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}_{DW}^* + \hbar\omega \right] \phi_i(x)$ , in genere diversi, e  $J_{LR} = J_{RL} = \int dx \phi_i(x) \left[ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}_{DW}^* + \hbar\omega \right] \phi_j(x)$ , sempre uguali, dove  $i, j = L, R$ .

- Consideriamo ora il primo termine del secondo integrale, relativo al potenziale di contatto:

$$\hat{H}^{(2)} = \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') V_F^*(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) = g \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}).$$

Procedendo come sopra, utilizzando la forma (3.2) e integrando su  $(y, z)$  otteniamo in  $D_x$ :

$$\hat{H}^{(2)} = g_{1D} \int dx \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(x),$$

con  $g_{1D} = \frac{g}{4\pi} \frac{m\omega}{\hbar}$ . Poi, passando alla (3.3) si ottiene:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(2)} &= U_L \hat{N}_L (\hat{N}_L - 1) + U_R \hat{N}_R (\hat{N}_R - 1) + M_{LR} (\hat{a}_L^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_L) + \\ &+ M_{RL} (\hat{a}_R^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_L + \hat{a}_L^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_R) + F (\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L) + 4F \hat{N}_L \hat{N}_R, \end{aligned} \quad (3.6)$$

con  $U_i = g_{1D} \int dx (\phi_i(x))^4$  e  $M_{ij} = \frac{g_{1D}}{2} \int dx (\phi_i(x))^3 (\phi_j(x))$ , in genere differenti per  $i, j = L, R$  e  $F = g_{1D} \int dx (\phi_i(x))^2 (\phi_j(x))^2$ .

- Infine, si conclude con l'ultimo termine:

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(3)} &= \int \int d\vec{r}d\vec{r}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\hat{V}_{dd}^*(\vec{r}-\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r}) = \\ &= \Upsilon(1-3\cos^2\varphi) \int \int d\vec{r}d\vec{r}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r}).\end{aligned}\quad (3.7)$$

Considerando l'angolo  $\varphi$  fissato da un campo esterno, il fattore fuori integrale è costante. Una volta effettuata la scomposizione (3.2) e l'approssimazione (3.3), indicando  $\psi_i(\vec{r}) = \phi_i(x)\xi(y, z)$ , si ottiene:

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(3)} &= U'_L \hat{N}_L (\hat{N}_L - 1) + U'_R \hat{N}_R (\hat{N}_R - 1) + (K'_{LLLL} + K'_{LLRL}) \hat{a}_L^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_R + \\ &+ (K'_{LRRR} + K'_{RLRR}) \hat{a}_L^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_R + (K'_{LRLL} + K'_{RLLL}) \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_L + \\ &+ (K'_{RRLR} + K'_{RRRL}) \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_L + K(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L) + \\ &+ \hat{N}_L \hat{N}_R (2K + U''_{LR} + U''_{RL}),\end{aligned}\quad (3.8)$$

dove  $U'_i = \int \int d\vec{r}d\vec{r}' (\psi_i(\vec{r}))^2 (\psi_i(\vec{r}'))^2 \hat{V}_{dd}^*(\vec{r}, \vec{r}')$ ,  $K'_{ijkl} = \int \int d\vec{r}d\vec{r}' \psi_i(\vec{r})\psi_j(\vec{r}')\psi_k(\vec{r}')\psi_l(\vec{r})\hat{V}_{dd}^*$ ,  $K_{ij} = K_{LR} = K_{RL} = K = K'_{iiij}$ ,  $U''_{ij} = K'_{ijij}$ , con  $i, j, k, l = L, R$ . Si nota immediatamente che  $K'_{LLLL} = K'_{RLLL}$ ,  $K'_{LLRL} = K'_{LRLL}$ ,  $K'_{RRLR} = K'_{RLRR}$ ,  $K'_{RRRL} = K'_{LRRR}$ .

Sommando assieme le (3.5), (3.6) e (3.8), considerando le uguaglianze indicate sopra e ponendo  $K'_{3i} = K'_{iii} + K'_{iij} = K'_{jiii} + K'_{ijii}$  si raggiunge la forma completa per  $\hat{H}$  nel caso generale di buche non simmetriche. Imponendo poi la simmetria per lo scambio di buche si giunge agevolmente alla forma finale nel caso sotto esame si ha infatti:  $\varepsilon_L = \varepsilon_R$ ,  $J_{LR} = J_{RL}$ ,  $U_L = U_R$ ,  $U'_L = U'_R$ ,  $M_{LR} = M_{RL}$ ,  $K'_{3L} = K'_{3R}$ ; posti poi  $J = -J_{ij}$ ,  $U = 2(U_i + U'_i)$ ,  $M = 2M_{ij}$ ,  $K' = K'_{3i}$ ,  $K_c = M + K'$ ,  $K_p = K + F$ ,  $V = 2K + 2U''_{ij} + 4F$  e riscaldando infine per la costante ininfluente  $\varepsilon(\hat{N}_L + \hat{N}_R)$ , si ottiene il cosiddetto Hamiltoniano EBH (da Extended Bose-Hubbard Hamiltonian) per bosoni in doppia buca di potenziale simmetrica, punto di partenza fondamentale per la successiva analisi:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -J(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L) + \frac{U}{2} [\hat{N}_L (\hat{N}_L - 1) + \hat{N}_R (\hat{N}_R - 1)] + V \hat{N}_L \hat{N}_R + \\ &+ K_c (\hat{a}_L^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_L + \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_L + \hat{a}_L^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_R) + K_p (\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L),\end{aligned}\quad (3.9)$$

dove:

$$\begin{aligned}J &= - \int dx \phi_i(x) \left[ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}_{DW}^* + \hbar\omega \right] \phi_j(x), \\ U &= 2g_{1D} \int dx (\phi_i(x))^4 + \frac{2}{\pi^2 l^4} \int \int d\vec{r}d\vec{r}' e^{-\frac{y^2+z^2}{l^2}} e^{-\frac{y'^2+z'^2}{l^2}} (\phi_i(x))^2 (\phi_i(x'))^2 \hat{V}_D^*(\vec{r}, \vec{r}'), \\ V &= \frac{2}{\pi^2 l^4} \int \int d\vec{r}d\vec{r}' e^{-\frac{y^2+z^2}{l^2}} e^{-\frac{y'^2+z'^2}{l^2}} \phi_i(x)\phi_i(x')\phi_j(x')\phi_j(x)\hat{V}_D^*(\vec{r}, \vec{r}') + \\ &+ \frac{2}{\pi^2 l^4} \int \int d\vec{r}d\vec{r}' e^{-\frac{y^2+z^2}{l^2}} e^{-\frac{y'^2+z'^2}{l^2}} \phi_i(\vec{r})\phi_j(\vec{r}')\phi_i(\vec{r}')\phi_j(\vec{r})\hat{V}_D^*(\vec{r}, \vec{r}') + 4g_{1D} \int dx (\phi_i(x))^2 (\phi_j(x))^2, \\ K_c &= g_{1D} \int dx (\phi_i(x))^3 (\phi_j(x)) + \frac{1}{\pi^2 l^4} \int \int d\vec{r}d\vec{r}' e^{-\frac{y^2+z^2}{l^2}} e^{-\frac{y'^2+z'^2}{l^2}} \phi_i(x)\phi_i(x')\phi_i(x')\phi_j(x)\hat{V}_D^*(\vec{r}, \vec{r}') + \\ &+ \frac{1}{\pi^2 l^4} \int \int d\vec{r}d\vec{r}' e^{-\frac{y^2+z^2}{l^2}} e^{-\frac{y'^2+z'^2}{l^2}} \phi_i(x)\phi_i(x')\phi_j(x')\phi_i(x)\hat{V}_D^*(\vec{r}, \vec{r}'),\end{aligned}\quad (3.10)$$

$$K_p = \frac{1}{\pi^2 l^4} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' e^{-\frac{y^2+z^2}{l^2}} e^{-\frac{y'^2+z'^2}{l^2}} \phi_i(x) \phi_i(x') \phi_j(x') \phi_j(x) \hat{V}_D^*(\vec{r}, \vec{r}') + g_{1D} \int dx (\phi_i(x))^2 (\phi_j(x))^2, \quad (3.11)$$

con  $i, j = L, R$ .

L'interpretazione fisica dei parametri presenti nella (3.11) è immediata:  $J$  stima la proprietà di tunnel del sistema, ovvero la tendenza del sistema a trasportare un bosone da una buca all'altra,  $U$  l'interazione in loco,  $V$  quella tra buche prime vicine,  $K_c$  il tunnelling (o hopping) indotto dal numero di bosoni nelle due buche e  $K_p$  l'hopping di coppia. Notiamo inoltre che tutte queste possibili operazioni non mutano il numero di bosoni totale e che l'operatore è hermitiano: risulta infatti  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ .

È possibile semplificare la (3.11) mediante un semplice artificio [17]:

$$\begin{aligned} V \hat{N}_L \hat{N}_R &= V \hat{N}_L \hat{N}_R + \frac{V}{2} \hat{N}^2 + \frac{V}{2} \hat{N} - \frac{V}{2} \hat{N}^2 - \frac{V}{2} \hat{N} = \\ &= V \hat{N}_L \hat{N}_R - \frac{V}{2} \hat{N}_R^2 - \frac{V}{2} \hat{N}_L^2 - V \hat{N}_L \hat{N}_R + \frac{V}{2} \hat{N}_L + \frac{V}{2} \hat{N}_R - \frac{V}{2} \hat{N} + \frac{V}{2} \hat{N}^2 + \\ &\quad - \frac{V}{2} [\hat{N}_L (\hat{N}_L - 1) + \hat{N}_R (\hat{N}_R - 1)] - \frac{V}{2} \hat{N} + \frac{V}{2} \hat{N}^2, \end{aligned} \quad (3.12)$$

e dunque riscalandolo per la costante  $-\frac{V}{2} \hat{N} + \frac{V}{2} \hat{N}^2$  e poi dividendo per  $J$ , posti  $\zeta = \frac{U-V}{J}$ , che assume il significato di interazione effettiva in sito, in quanto relativa a bosoni posti in una stessa buca e in buche prime vicine,  $\kappa = \frac{K_c}{J}$ ,  $\nu = \frac{K_p}{J}$  si giunge ad una scrittura più adatta alla successiva analisi:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{sim} = \hat{H} &= -(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L) + \frac{\zeta}{2} [\hat{N}_L (\hat{N}_L - 1) + \hat{N}_R (\hat{N}_R - 1)] + \\ &\quad + \kappa (\hat{a}_L^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_L + \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_L + \hat{a}_L^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_R) + \nu (\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L). \end{aligned} \quad (3.13)$$

## 3.2 Gli indicatori per l'analisi.

Se il numero di bosoni presenti nella doppia buca è  $N$ , il numero di autostati costituenti la base di Fock è  $(N+1)$ : l'operatore  $\hat{H}$  può allora essere posto in forma di matrice hermitiana  $(N+1) \times (N+1)$ , con componenti  $\hat{H}_{ij} = \langle i, N-i | \hat{H} | j, N-j \rangle$ , ove  $i, j = 0, \dots, N$ . Ottenuta tale matrice, è possibile studiare le proprietà del sistema risolvendo, analiticamente per  $N$  bassi e computazionalmente per  $N$  alti, l'equazione agli autovalori per  $\hat{H}$  e trovandone i relativi autovettori. Nella base di Fock, un generico stato del sistema viene scritto:

$$|E_j\rangle = \sum_{i=0}^N c_i^{(j)} |i, N-i\rangle. \quad (3.14)$$

I coefficienti  $c_i^{(j)}$  sono sottoposti al vincolo di normalizzazione  $\sum_{i=0}^N |c_i^{(j)}|^2 = 1$ . Nel seguito inoltre ci limiteremo sempre all'autostato fondamentale ( $j=0$ ). Esso è funzione dei tre parametri sopra indicati, a una cui modifica possono seguire cambiamenti anche radicali del comportamento dei bosoni e dunque delle proprietà dello stato in cui il sistema è posto. Essendo interessati alla descrizione delle proprietà dello stato fondamentale, si utilizzeranno estimatori in grado di indicarle e segnalare eventualmente un loro cambiamento. Nella letteratura moderna tre sono gli indicatori più utilizzati in tal caso: l'informazione quantistica di Fisher [18], la visibilità di coerenza [19] e l'entropia di entanglement [20].

- *Informazione quantistica di Fisher.*

Tale indicatore, scritto brevemente  $F_{QFI}$ , viene definito, per stati puri (ovverosia per autostati relativi alle autoenergie del sistema), come la varianza della differenza tra il numero di bosoni presente nelle buche  $\hat{N}_{L,R}$ :

$$F_{QFI} = (\Delta\hat{N}_{L,R})^2 = \langle(\hat{N}_L - \hat{N}_R)^2\rangle - (\langle\hat{N}_L - \hat{N}_R\rangle)^2. \quad (3.15)$$

In ogni caso analizzato in seguito è stato verificato che per lo stato fondamentale risulta  $\langle\hat{N}_L - \hat{N}_R\rangle = 0$ . Si è potuto così passare alla scrittura in funzione dei coefficienti  $c_i^0$ :

$$F_{QFI} = \sum_{i=0}^N [2i - N]^2 |c_i^{(0)}|^2 \quad (3.16)$$

e dividendo per  $N^2$ , il massimo di  $F_{QFI}$ , si può ridefinire tale estimatore come:

$$F = \frac{F_{QFI}}{N^2} \quad (3.17)$$

Un'analogia espressione per (3.15), valida per soli stati puri, è  $F_{QFI} = 4(\Delta\hat{J}_x)^2$ , ed è stato dimostrato che esiste una condizione sufficiente per affermare la presenza di entanglement di particelle, che è:  $\chi^2 \equiv \frac{N}{F_{QFI}} < 1$ , cioè:

$$F_{QFI} > N \text{ da cui } F > \frac{1}{N}. \quad (3.18)$$

Per quanto riguarda BECs in doppia buca, uno stato fondamentale nel quale si può porre il sistema è lo stato gatto  $|CAT\rangle$ :

$$|CAT\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|N, 0\rangle + |0, N\rangle), \quad (3.19)$$

combinazione lineare dello stato in cui tutte le particelle sono in una buca e di quello dove sono tutte nell'altra. Esso, conosciuto anche come stato NOON, si riconosce essere rappresentante della famosissima famiglia degli stati di tipo gatto di Schrödinger, sicuramente il più famoso degli stati entangled.

La celebrità di tale stato è legata al paradosso del gatto di Schrödinger, esperimento mentale ideato dal famoso fisico nel 1935, mirato a dimostrare come l'applicazione rigorosa dei principi della meccanica quantistica possa portare a risultati paradossali dal punto di vista classico, minandone irrimediabilmente il suo fondamentale carattere deterministico, al tempo difficili da ritenere veri dato il loro alto grado di controintuitività e la loro impossibilità di ricevere conferma sperimentale. Egli propose una situazione in cui la vita di un gatto (V per vivo, M per morto), rinchiuso in una scatola, è legata al decadimento di un solo atomo, probabile per il 50% in un dato intervallo temporale (D per decaduto, ND altrimenti). In base ai principi quantistici, dopo ad esempio un'ora lo stato del sistema viene descritto da una funzione d'onda totale entangled "gatto+atomo" del tipo:  $|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|V, ND\rangle + |M, D\rangle)$ , da cui è possibile ricavare le probabilità di trovare vivo il gatto con l'atomo non decaduto, ma non determinare con precisione (classicamente) lo stato del gatto: eventualmente, solo una misura sarà in grado di stabilire lo stato in cui, ora certamente, si trova il sistema. Lo stato  $|S\rangle$  si dice entangled perché non è possibile scriverlo in modo che lo stato del gatto sia logicamente indipendente da quello dell'atomo: è bene ricordare tuttavia che esistono

sistemi per cui ciò è possibile, detti non entangled. Formalmente, dato un sistema composto descritto da un operatore Hamiltoniano che agisce su funzioni d'onda di stato  $|\psi\rangle$  appartenenti a uno spazio Hilbertiano  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_m$ , dette  $\{|\psi_{i1}\rangle\}$ ,  $\{|\psi_{i2}\rangle\}, \dots, \{|\psi_{im}\rangle\}$  le basi degli spazi Hilbertiani corrispondenti, una base per  $\mathcal{H}$  è data dal prodotto tensore delle basi precedenti:  $\{|\psi_{i1i2\dots im}\rangle\} = \{|\psi_{i1}\rangle \otimes |\psi_{i2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{im}\rangle\}$ . Un generico stato puro di  $\mathcal{H}$  è  $\psi = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_m} c_{i_1 i_2 \dots i_m} |\psi_{i_1 i_2 \dots i_m}\rangle$ : qualora esso possa essere scritto in maniera separabile come prodotto tensore di  $m$  stati relativi ai singoli spazi Hilbertiani  $\mathcal{H}_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , cioè  $\psi = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_m} a_{i_1} |\psi_{i_1}\rangle \otimes b_{i_2} |\psi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes w_{i_m} |\psi_{i_m}\rangle$ , allora tale stato è detto separabile o non entangled, in caso contrario è detto non separabile o entangled. Ricordando la struttura dell'autovettore del sistema in (3.14) si comprende che nel caso fondamentale lo stato  $|CAT\rangle$  è caratterizzato dai soli  $c_0^{(0)} = c_N^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}$  non nulli e considerando la formula per  $F$  (3.16) si comprende facilmente che per tale stato vale  $F = 1$ .

- *Visibilità di coerenza.* La visibilità di coerenza  $\alpha$  è definita il doppio del modulo del valor medio dell'operatore  $\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R$  diviso  $N$ :

$$\alpha = \frac{2 \left| \langle \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R \rangle \right|}{N}. \quad (3.20)$$

In generale, le proprietà di coerenza di un condensato di Bose-Einstein si investigano a partire dalla loro distribuzione in momento  $n(p)$ , definito come la trasformata di Fourier della funzione densità  $\rho(x, x') = \langle \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(x') \rangle$ , ove  $\hat{\phi}(x)$  ricordiamo essere data dalla 3.3 e la media è fatta rispetto lo stato fondamentale:

$$n(p) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dx dx' e^{-ip(x-x')} \rho(x, x').$$

Nel caso in esame, essendo  $d$  la distanza tra i due minimi del potenziale  $V_{DW}(x)$ , il precedente integrale è stato dimostrato essere:

$$n(p) = n_0(p)[1 + \alpha \cos(pd)],$$

dove  $n_0(p)$  è la distribuzione di momento dello stato in regime completamente incoerente, che dipende dalla forma del potenziale  $V_{DW}(x)$ , e la  $\alpha$  misura il grado di visibilità delle figure di interferenza della distribuzione  $n(p)$ .

Nel caso del sistema a doppia buca in esame, il significato fisico di tale indicatore appare chiaro una volta definito il cosiddetto stato atomico coerente  $|ACS\rangle$ :

$$|ACS\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_L^\dagger + \hat{a}_R^\dagger) \right]^N |0, 0\rangle, \quad (3.21)$$

dove  $|0, 0\rangle = |0\rangle_L \otimes |0\rangle_R$ . Ad esempio, nel caso di  $N = 2$  bosoni, lo stato coerente assume la forma esplicita:  $|ACS\rangle = \frac{1}{2}(|2, 0\rangle + \sqrt{2}|1, 1\rangle + |0, 2\rangle)$ .  $\alpha$  risulta massima ( $\alpha = 1$ ) in corrispondenza di tale stato e risulta quindi un indicatore della sovrapposizione tra un dato stato del sistema e lo stato  $|ACS\rangle$  del sistema fisico.

Nel caso in esame, in cui i coefficienti della funzione d'onda di stato del sistema nello spazio di Fock (3.14) sono reali, è possibile scrivere  $\alpha$  in loro funzione nel modo seguente:

$$\alpha = \frac{2}{N} \sum_{i=0}^N \left| c_i^{(0)} c_{i+1}^{(0)} \right| \sqrt{(i+1)(N-i)}. \quad (3.22)$$

*Entropia di entanglement.* Il terzo indicatore che verrà utilizzato è la cosiddetta entropia di entanglement  $S$ , che misura la correlazione quantistica tra le due buche di potenziale. Introdotta la matrice densità associata al sistema posto nello stato fondamentale  $|E_0\rangle$ :

$$\hat{\rho} = |E_0\rangle \langle E_0|$$

e la matrice densità ridotta (rispetto alla buca destra):

$$\hat{\rho}_L = Tr_R \hat{\rho},$$

ottenuta dal tracciamento parziale della matrice densità, cioè solo rispetto ai gradi di libertà della buca (in tal caso) destra,  $S$  viene definita come l'entropia di Von Neumann di  $\hat{\rho}_L$ , che poi può essere scritta in funzione dei soliti coefficienti:

$$S = -Tr \hat{\rho}_L \log_2 \hat{\rho}_L = - \sum_{i=0}^N |c_i^{(0)}|^2 \log_2 |c_i^{(0)}|^2. \quad (3.23)$$

Il punto di massimo di  $S$ , fissati i parametri del sistema, risulta pari a  $\log_2(N+1)$ , in corrispondenza della configurazione in cui tutti i coefficienti dello stato fondamentale sono uguali tra loro:  $c_i^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{N+1}}$  [8]. Esso tuttavia non si trova in genere nella zona di massimo dell'informazione di Fisher  $F$ , che indica la presenza dello stato gatto di Schrödinger: ciò induce ad affermare che, a dispetto della sua fama, lo stato NOON non sia quello di massimo entanglement possibile per la giunzione di Josephson bosonica studiata.

Per concludere, accanto al regime NOON, caratterizzato da alta  $F$  e bassa  $\alpha$ , e di coerenza, con bassa  $F$  e alta  $\alpha$ , dove in entrambi i casi  $S$  non è in genere massimo, aggiungiamo il regime di Fock [8] [17], presente nel caso di  $F$ ,  $\alpha$  bassi e  $S$  non massimo, descritto da uno dei due stati seguenti, a seconda del numero di bosoni considerati nel sistema:

$$\begin{aligned} |FOCK\rangle &= \left| \frac{N}{2}, \frac{N}{2} \right\rangle, \text{ se } N \text{ è pari;} \\ |pseudoFOCK\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{N-1}{2}, \frac{N+1}{2} \right\rangle + \left| \frac{N+1}{2}, \frac{N-1}{2} \right\rangle \right), \text{ se } N \text{ è dispari.} \end{aligned} \quad (3.24)$$

## Capitolo 4

### L'analisi.

Nel presente capitolo verranno esposti risultati numerici a sostegno e conferma della trattazione teorica esposta nei capitoli precedenti. Il punto di partenza sta nell'espressione (3.13) dell'operatore Hamiltoniano di seconda quantizzazione per il sistema composto da  $N$  bosoni dipolari soggetti a un potenziale effettivo unidimensionale a doppia buca simmetrico. L'obiettivo è descrivere le proprietà di coerenza e correlazione quantistica del sistema mediante l'informazione quantistica di Fisher  $F$  (3.17), la visibilità  $\alpha$  (3.20) e l'entropia di entanglement  $S$  (3.23). Lo studio di tali proprietà viene messo in stretta relazione con i tre parametri adimensionali presenti in  $\hat{H}$  (3.13), ossia l'interazione effettiva in sito  $\zeta$ , l'hopping correlato  $\kappa$  e l'hopping di coppia  $\nu$ , esponendo come esse vengano influenzate dai valori dei parametri di cui sopra. Tale studio verrà eseguito analiticamente per  $N = 2, 3$  particelle e computazionalmente per  $N = 20, 25$  particelle.

A questo punto, è opportuno scrivere l'Hamiltoniano  $\hat{H}$  in forma matriciale. L'operatore agisce sullo spazio di Fock, avente base ortonormale  $\{|i, N - i\rangle\}$   $(N + 1)$ -dimensionale ( $0 \leq i \leq N$ ): la matrice ha così dimensione  $(N + 1) \times (N + 1)$ . Gli elementi di matrice sono naturalmente:  $\hat{H}_{ij} = \langle i, N - i | \hat{H} | j, N - j \rangle$ . Applicando le regole di definizione degli operatori numero, costruzione e distruzione si ha:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L |i, N - i\rangle &= \sqrt{i(N - i + 1)} |i - 1, N - i + 1\rangle, & \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R |i, N - i\rangle &= \sqrt{(i + 1)(N - i)} |i + 1, N - i - 1\rangle, \\
 \hat{N}_R(\hat{N}_R - 1) |i, N - i\rangle &= (N - i)(N - i - 1) |i, N - i\rangle, & \hat{N}_L(\hat{N}_L - 1) |i, N - i\rangle &= i(i - 1) |i, N - i\rangle, \\
 \hat{a}_L^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_R |i, N - i\rangle &= i\sqrt{(i + 1)(N - i)} |i + 1, N - i - 1\rangle, \\
 \hat{a}_L^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_R |i, N - i\rangle &= (N - i - 1)\sqrt{(i + 1)(N - i)} |i + 1, N - i - 1\rangle, \\
 \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_R \hat{a}_L |i, N - i\rangle &= (N - i)\sqrt{i(N - i + 1)} |i - 1, N - i + 1\rangle, \\
 \hat{a}_R^\dagger \hat{N}_L \hat{a}_L |i, N - i\rangle &= (i - 1)\sqrt{i(N - i + 1)} |i - 1, N - i + 1\rangle, \\
 \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_R \hat{a}_R |i, N - i\rangle &= \sqrt{(N - i)(N - i - 1)(i + 1)(i + 2)} |i + 2, N - i - 2\rangle, \\
 \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_L \hat{a}_L |i, N - i\rangle &= \sqrt{i(i - 1)(N - i + 1)(N - i + 2)} |i - 2, N - i + 2\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Allora, le matrici  $\hat{H}_2$  (relativa a  $N = 2$  bosoni) e  $\hat{H}_3$  (relativa a  $N = 3$  bosoni) risultanti sono le seguenti:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_2 &= \hat{H}_{2,\zeta} + \hat{H}_{2,\kappa} + \hat{H}_{2,\nu} = \begin{pmatrix} \zeta & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & \zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\kappa & 0 \\ \sqrt{2}\kappa & 0 & \sqrt{2}\kappa \\ 0 & \sqrt{2}\kappa & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2\nu \\ 0 & 0 & 0 \\ 2\nu & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} \zeta & \sqrt{2}(\kappa - 1) & 2\nu \\ \sqrt{2}(\kappa - 1) & 0 & \sqrt{2}(\kappa - 1) \\ 2\nu & \sqrt{2}(\kappa - 1) & \zeta \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_3 = \hat{H}_{3,\zeta} + \hat{H}_{3,\kappa} + \hat{H}_{3,\nu} &= \begin{pmatrix} 3\zeta & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & \zeta & -2 & 0 \\ 0 & -2 & \zeta & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 3\zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2\sqrt{3}\kappa & 0 & 0 \\ 2\sqrt{3}\kappa & 0 & 4\kappa & 0 \\ 0 & 4\kappa & 0 & 2\sqrt{3}\kappa \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3}\kappa & 0 \end{pmatrix} + \\
&+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2\sqrt{3}\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3}\nu \\ 2\sqrt{3}\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3}\nu & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3\zeta & \sqrt{3}(2\kappa-1) & 2\sqrt{3}\nu & 0 \\ \sqrt{3}(2\kappa-1) & \zeta & -2+4\kappa & 2\sqrt{3}\nu \\ 2\sqrt{3}\nu & -2+4\kappa & \zeta & \sqrt{3}(2\kappa-1) \\ 0 & 2\sqrt{3}\nu & \sqrt{3}(2\kappa-1) & 3\zeta \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Le due matrici complete sono date dalla sovrapposizione di tre matrici più semplici, che, rispettivamente, si riferiscono al sistema quando  $\zeta \neq 0$  e  $\kappa = \nu = 0$ ,  $\kappa \neq 0$  e  $\zeta = \nu = 0$ ,  $\nu \neq 0$  e  $\zeta = \kappa = 0$ . Ora è possibile procedere alla soluzione dell'equazione agli autovalori  $\hat{H} |E_j\rangle = E_j |E_j\rangle$  per stabilire l'autoenergia fondamentale e la relativa funzione di stato. Giunti ad essa, è immediato il passaggio agli indicatori di analisi. Nella trattazione seguente il termine di hopping di coppia  $\nu$  verrà sempre considerato nullo; esamineremo dapprima due casi semplificati, in cui  $\zeta$  è sempre diverso da zero, ma mentre nel primo l'hopping correlato  $\kappa$  verrà posto nullo, nel secondo sarà considerato non nullo. Questo schema di analisi ricalca un aspetto importante degli studi odierni su tale argomento: infatti, se inizialmente praticamente solo l'interazione in sito veniva considerata non nulla, ora si affrontano sempre più termini, ad esempio hopping correlato o di coppia o ancora interazioni tra buche prime vicine o ulteriori, studiandone le ricadute sul sistema, come evidenziato in [21, 22].

## 4.1 L'interazione di contatto.

In tal caso, gli autoenergie fondamentali sono:

$$E_{0,2} = \frac{1}{2} \left( \zeta - \sqrt{\zeta^2 + 16} \right) \quad \text{e} \quad E_{0,3} = -1 + 2\zeta - \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4},$$

rispettivamente per  $N = 2, 3$ , con relativi funzioni di stato date da:

$$\begin{aligned}
|E_{0,2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{1}{8} (\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 16})^2}} \left[ |0, 2\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} (\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 16}) |1, 1\rangle + |2, 0\rangle \right]; \\
|E_{0,3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{2}{3} (1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2}} \left[ |0, 3\rangle + \frac{1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4}}{\sqrt{3}} (|1, 2\rangle + |2, 1\rangle) + |3, 0\rangle \right].
\end{aligned} \tag{4.4}$$

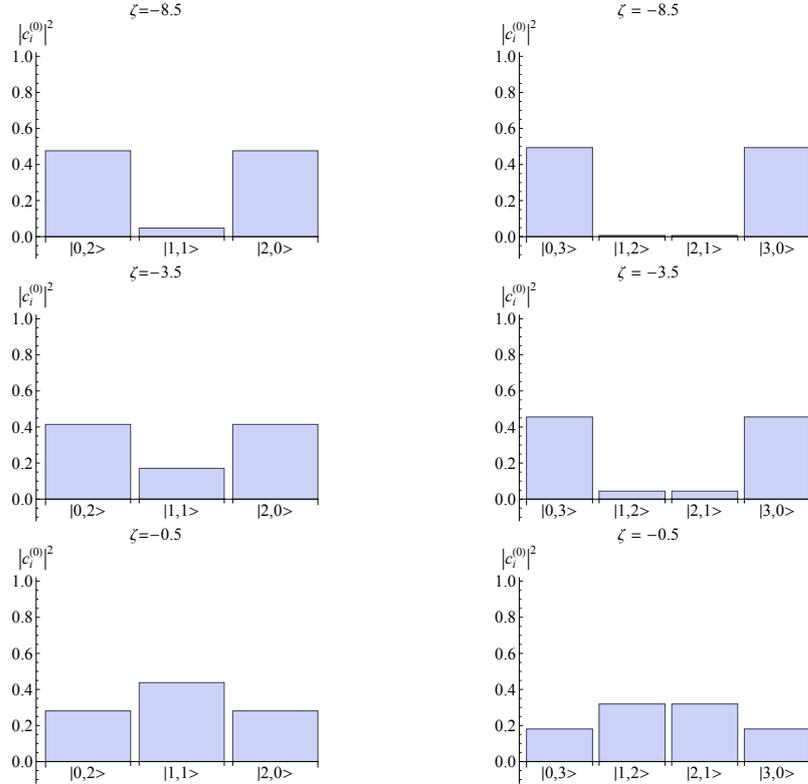
Secondo la convenzione definita nella (3.14), i coefficienti dello stato fondamentale, rispettivamente per  $N = 2$  e  $N = 3$  nella prima e seconda riga, sono:

$$\begin{aligned}
c_1^{(0)} = c_3^{(0)} &= \frac{2}{\sqrt{16 + \zeta(\zeta + \sqrt{16 + \zeta^2})}} \quad \text{e} \quad c_2^{(0)} = \frac{\sqrt{16 + \zeta(\zeta + \sqrt{16 + \zeta^2})}}{\sqrt{2}\sqrt{16 + \zeta^2}}; \\
c_1^{(0)} = c_4^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{2}{3} (1 + \zeta + \sqrt{4 + \zeta(2 + \zeta)})^2}} \quad \text{e} \quad c_2^{(0)} = c_3^{(0)} = \frac{1 + \zeta + \sqrt{4 + \zeta(2 + \zeta)}}{\sqrt{2 + \frac{2}{3} (1 + \zeta + \sqrt{4 + \zeta(2 + \zeta)})^2}}.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Per quanto riguarda i tra indicatori  $F$ ,  $\alpha$  ed  $S$ , si ottengono per  $N = 2, 3$  i seguenti risultati, come già illustrato in [8][17]:

$$\begin{aligned}
 F_2 &= \frac{8}{\zeta^2 + \zeta\sqrt{\zeta^2 + 16} + 16}, & F_3 &= \frac{27 + (1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2}{27 + 9(1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2}; \\
 \alpha_2 &= \frac{4(\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 16})}{\zeta^2 + \zeta\sqrt{\zeta^2 + 16} + 16}, & \alpha_3 &= \frac{2}{3} \frac{(4 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})(1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})}{3 + (1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2}; \\
 S_2 &= -\frac{8 \log_2 \left( \frac{4}{\zeta^2 + \zeta\sqrt{\zeta^2 + 16} + 16} \right)}{\zeta^2 + \zeta\sqrt{\zeta^2 + 16} + 16} - \frac{(\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 16})^2}{2(\zeta^2 + \zeta\sqrt{\zeta^2 + 16} + 16)} \log_2 \left( \frac{1}{2} \frac{(\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 16})^2}{\zeta^2 + \zeta\sqrt{\zeta^2 + 16} + 16} \right), \\
 S_3 &= \frac{3}{3 + (1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2} \left[ -\log_2 \left( 2 + \frac{2}{3} (1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2}{3} \log_2 \left( \frac{1}{2} \frac{(1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2}{3 + (1 + \zeta + \sqrt{\zeta^2 + 2\zeta + 4})^2} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Nella Fig. 4.1 si espone una serie di istogrammi descrittivi del comportamento del quadrato dei coefficienti degli autostati fondamentali (4.5), da cui è immediato notare i tre differenti regimi in cui questi ultimi si possono porre.



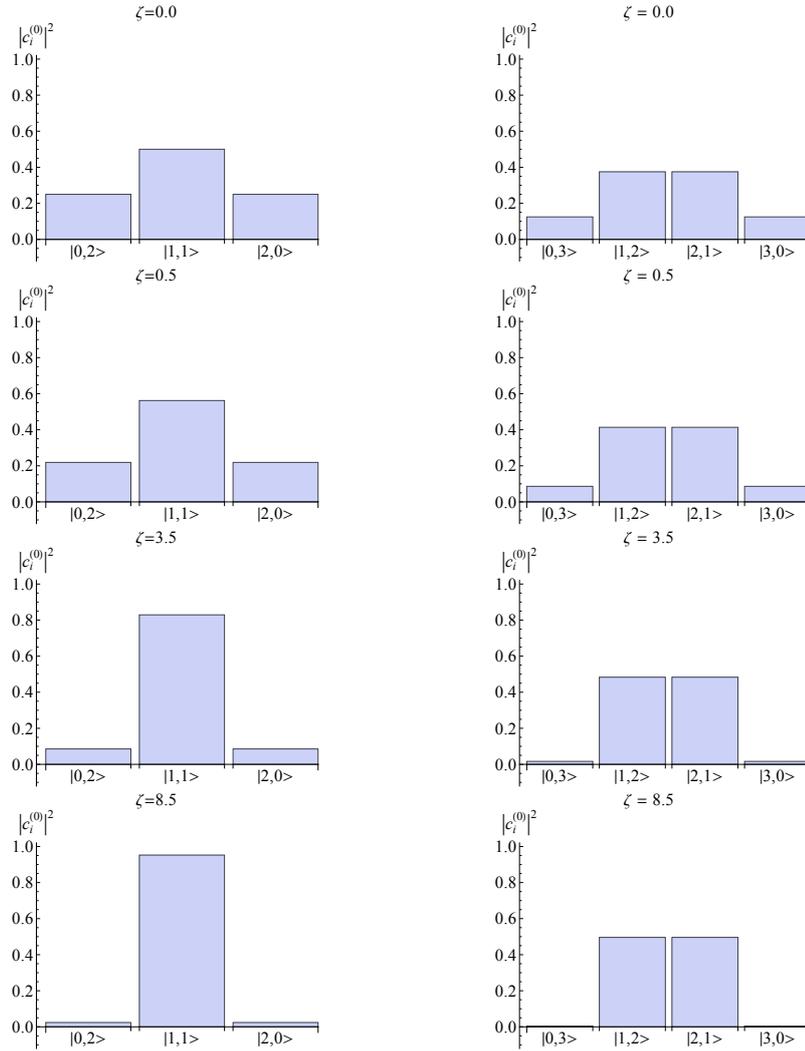


Figura 4.1: Comportamento di  $|c_i^{(0)}|^2$  al variare di  $\zeta$  per  $N = 2$  (sinistra) e  $N = 3$  (destra) bosoni.

Dalle figure è possibile notare il sistematico passaggio, per valori crescenti di  $\zeta$ , del sistema dai relativi stati vicini a quelli NOON:

$$|E_{0,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,2\rangle + |2,0\rangle) \quad |E_{0,3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,3\rangle + |3,0\rangle), \quad (4.7)$$

ai relativi stati coerenti:

$$|E_{0,2}\rangle = \frac{1}{2}(|0,2\rangle + \sqrt{2}|1,1\rangle + |2,0\rangle) \quad |E_{0,3}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}}(|0,3\rangle + \sqrt{3}|1,2\rangle + \sqrt{3}|2,1\rangle + |3,0\rangle), \quad (4.8)$$

a quelli, infine, prossimi agli stati di Fock:

$$|E_{0,2}\rangle = |1,1\rangle \quad |E_{0,3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,2\rangle + |2,1\rangle). \quad (4.9)$$

Dalle forme analitiche dei due autostati è possibile verificare ciò che si deduce dagli istogrammi: per  $\zeta \rightarrow -\infty$  si ha lo stato NOON  $|E_{0,N}\rangle \equiv |CAT\rangle$ , caratterizzato da informazione di Fisher  $F = 1$ , coerenza  $\alpha$  nulla ed entropia  $S = 1$ , per  $\zeta = 0$  si ha il relativo stato coerente  $|E_{0,N}\rangle \equiv |ACS\rangle$  caratterizzato da  $\alpha = 1$  e da  $F = \frac{1}{N}$  [8], mentre per  $\zeta \rightarrow +\infty$  si raggiunge lo stato di Fock  $|E_{0,N}\rangle \equiv |FOCK\rangle$ , caratterizzato da  $F, \alpha, S = 0$  se  $N = 2$  e  $F = \frac{1}{9}, \alpha = \frac{2}{3}, S = 1$  se  $N = 3$ , evidenziando la curiosa proprietà di ottenere stati  $|pseudoFOCK\rangle$  entangled per un numero dispari di bosoni, non entangled per un numero pari. Il passaggio tra questi vari stati avviene in un percorso che fa aumentare la loro coerenza  $\alpha$  fino al massimo acquisito per  $\zeta = 0$  per poi farla perdere. Tale percorso fa invece diminuire progressivamente l'informazione di Fisher  $F$  man mano che lo stato si allontana da quello NOON, mentre si raggiunge, poco prima dello stato coerente, un massimo dell'entropia di entanglement  $S$  per il valore  $\zeta^{crit}$  che, non essendo situato nella zona in cui  $F \rightarrow 1$ , mostra che lo stato NOON non è quello massimamente entangled. Mediante analisi di funzione si dimostra che  $\zeta_2^{crit} = -1.41421$  e  $\zeta_3^{crit} = -1.22867$  [8]. Appare tuttavia doveroso notare che, nonostante gli stati  $|CAT\rangle$  e  $|FOCK\rangle$  siano raggiunti solo in situazioni limite, i loro regimi sono, al contrario, predominanti per ragionevoli valori di  $\zeta$ : rispettivamente per  $\zeta \lesssim -5$  e  $\zeta \gtrsim 5$ . Si comprende, dunque, come l'uso degli indicatori permetta di stabilire le proprietà dello stato fondamentale anche indipendentemente, anzi più efficacemente, dagli istogrammi presentati.

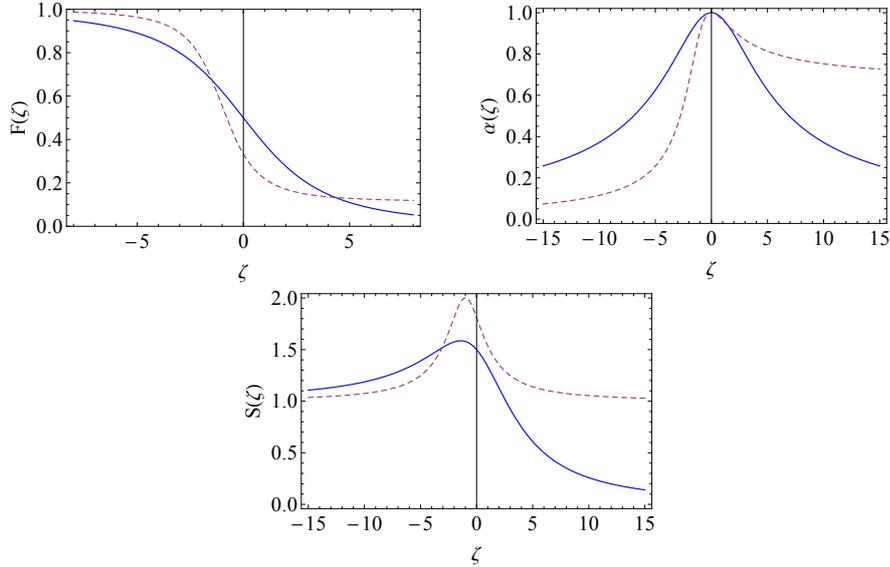


Figura 4.2:  $F, \alpha, S$  in funzione di  $\zeta$  nel caso di assenza di hopping di coppia ( $\kappa = 0$ ) e correlato ( $\nu = 0$ ) per  $N = 2$  (linea continua) e  $N = 3$  (linea tratteggiata) bosoni.  $F, \alpha, S$  e  $\zeta$  sono adimensionali.

Come accennato in precedenza, mediante l'utilizzo di metodi numerici è possibile studiare tale sistema anche quando esso sia costituito da un numero più cospicuo di bosoni. Utilizzando un programma C++ del tipo riportato nell'Appendice B e modificato a seconda dei risultati cercati, è stato studiato il sistema in presenza di  $N = 20$  e  $N = 25$  bosoni, con grafici che riportano in ascissa gli  $\frac{i}{N}$  e in ordinata i rispettivi coefficienti quadrati dell'autostato in notazione di Fock (Fig. 4.3), che sostituiscono gli istogrammi precedenti, e i grafici dei tre indicatori  $F, \alpha, S$  (Fig. 4.4).

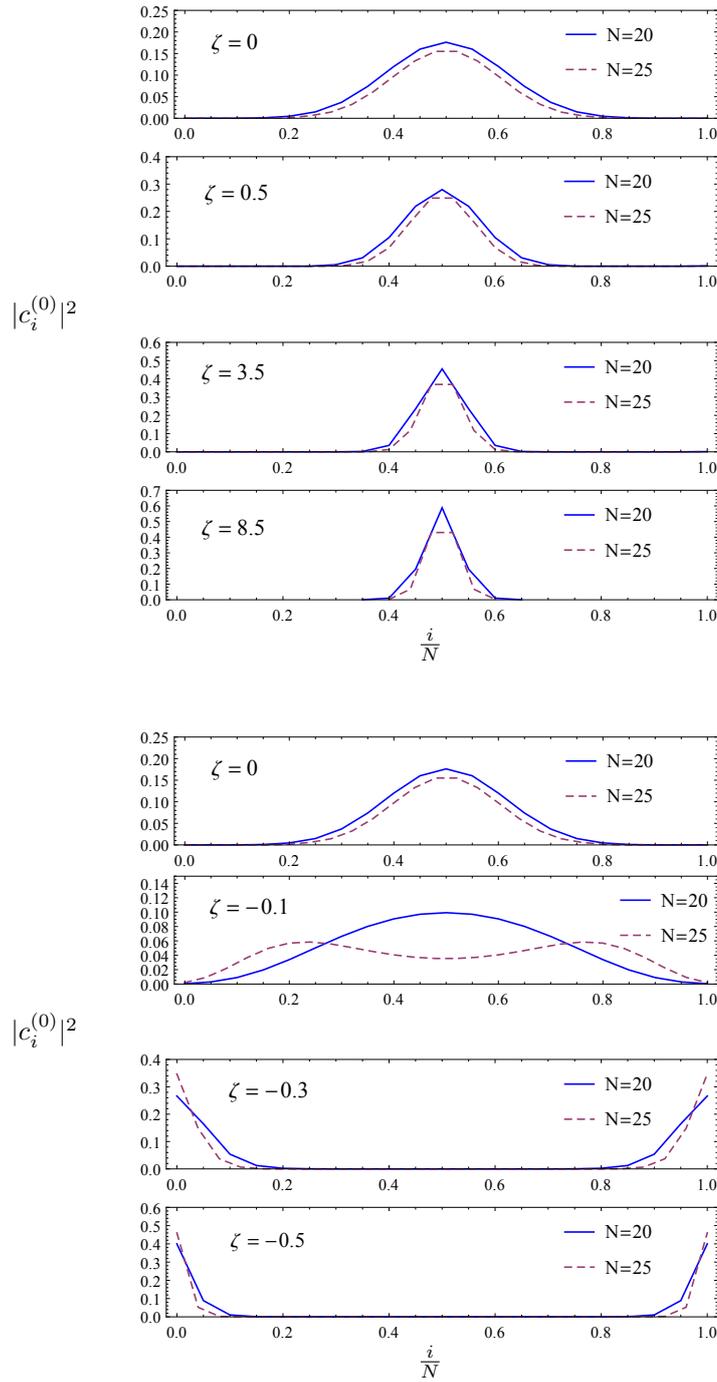


Figura 4.3: Comportamento di  $|c_i^{(0)}|^2$  al variare di  $\zeta$  per  $N = 20$  (linea continua) e  $N = 25$  (linea tratteggiata) bosoni.

Il comportamento di tali sistemi, come suffragato anche dagli indicatori, mostra che la transizione tra gli stati NOON e di Fock avviene più repentinamente quanto più alto è il numero

$N$  di bosoni, il che comporta il progressivo restringimento dell'intervallo di coerenza dei sistemi all'aumentare di  $N$ . Per quanto riguarda l'entropia di entanglement  $S$ , si può notare che il suo grafico di Fig. 4.4, confrontato col suo omologo di Fig. 4.2, conferma la tendenza di  $S$  di aumentare il valore del suo massimo man mano che  $N$  aumenta, spostando contestualmente il punto di massimo verso valori maggiori, ma sempre negativi, cioè sempre più vicini a  $\zeta = 0$ : si ha infatti  $\zeta_{20}^{crit} \approx -0.12$  e  $\zeta_{25}^{crit} \approx -0.10$ . Inoltre, sempre dal confronto dei grafici di  $S$ , si conferma la proprietà di ottenere stati  $|pseudoFOCK\rangle$  entangled per un numero dispari di bosoni ( $S \rightarrow 1$ ) e stati  $|FOCK\rangle$  non entangled viceversa ( $S \rightarrow 0$ ), mentre in regime NOON continua ad essere  $S = 1$  per qualsiasi valore di  $N$ .

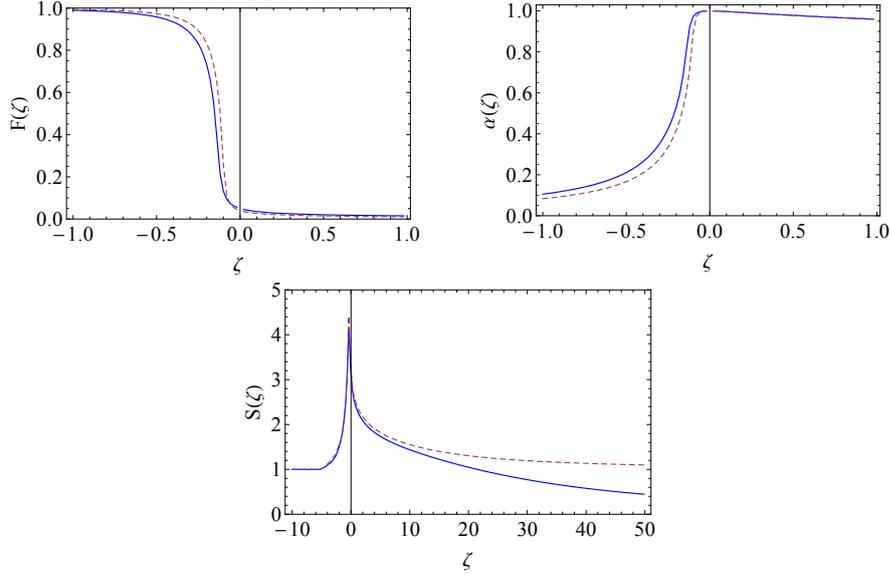


Figura 4.4:  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  in funzione di  $\zeta$  nel caso di assenza di hopping di coppia ( $\nu = 0$ ) e correlato ( $\kappa = 0$ ) per  $N = 20$  (linea continua) e  $N = 25$  (linea tratteggiata) bosoni.  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  e  $\zeta$  sono adimensionali.

Sofferamoci ora sul significato di  $\zeta$ , definito come  $\zeta = \frac{U-V}{J}$ . Qualora si studi il caso non dipolare,  $\zeta$  assume il carattere di parametro che stima l'intensità dell'azione effettiva in sito tra bosoni:  $\zeta < 0$  implica azione attrattiva, altrimenti repulsiva. In tal caso, dunque, lo stato NOON può essere raggiunto solamente in caso di interazione fortemente attrattiva, lo stato coerente in assenza di alcuna azione, lo stato di Fock nel caso repulsivo. Il caso dipolare è nettamente diverso: rappresentando infatti  $\frac{U}{J}$  la parte dell'interazione a contatto e  $\frac{V}{J}$  quella dipolare, si comprende che lo stato gatto di Schrödinger è raggiunto se  $\frac{U}{J} \ll \frac{V}{J}$ , e dunque è possibile anche per bosoni repulsivi, mentre con la diseguaglianza opposta si può ottenere lo stato di Fock. Ciò risulta di una certa importanza dal punto di vista sperimentale, poiché nel caso di interazione di contatto attrattiva, superando un valore critico per la densità di particelle si innesca il collasso della nuvola di bosoni [9], che rende impossibile osservare lo stato NOON, mentre tale problema non si pone nel caso di contatto repulsivo; inoltre, a parte il problema del collasso, un'ulteriore difficoltà viene dal fatto che in una tale situazione lo stato NOON è molto instabile e complicato da ottenere, poiché la separazione tra i primi due stati energetici del sistema sono molto vicini [23]. Concludiamo ricordando che è stata dimostrata l'esistenza di un valore critico per  $\frac{V}{J}$ , detto  $V^{crit} = \frac{U}{J} + A$ ,  $A > 0$ , oltrepassato il quale lo stato fondamentale del sistema perde

progressivamente la sua coerenza passando, per valori crescenti di  $V^{crit}$  [9], a uno stato NOON.

## 4.2 Analisi dello stato fondamentale in assenza di hopping di coppia.

Nel caso in cui  $\kappa = \frac{K_c}{J} \neq 0$  e  $\nu = 0$ , che implica la presenza di tunnelling (o hopping) correlato e l'assenza di hopping di coppia, si possono già osservare alcuni sostanziali cambiamenti nel comportamento del sistema.

Nel caso  $N = 2$  l'autostato fondamentale è dato da:

$$|E_{0,2}^\kappa\rangle = \frac{2\sqrt{2}|\kappa - 1|}{\sqrt{16(\kappa - 1)^2 + (\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 16\kappa^2 - 32\kappa + 16})^2}} \left( |2,0\rangle - \frac{\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 16\kappa^2 - 32\kappa + 16}}{2\sqrt{2}(\kappa - 1)} |1,1\rangle + |2,0\rangle \right), \quad (4.10)$$

con energia:

$$E_{0,2}^\kappa = \frac{1}{2}(\zeta - \sqrt{\zeta^2 + 16\kappa^2 - 32\kappa + 16}). \quad (4.11)$$

I coefficienti dello stato fondamentale con  $N = 2$  sono:

$$c_1^{(0)\kappa} = c_3^{(0)\kappa} = \frac{\sqrt{\sqrt{16(\kappa - 1)^2 + \zeta^2} - \zeta}}{2\sqrt[4]{16(\kappa - 1)^2 + \zeta^2}} \quad \text{e} \quad c_2^{(0)\kappa} = -\frac{\sqrt[4]{16(\kappa - 1)^2 + \zeta^2}(\sqrt{16(\kappa - 1)^2 + \zeta^2} + \zeta)}{4\sqrt{2}(\kappa - 1)\sqrt{\sqrt{16(\kappa - 1)^2 + \zeta^2} - \zeta}}. \quad (4.12)$$

Tutto ciò unito ad un'occhiata agli istogrammi esemplificativi di Fig. 4.5 sul comportamento dei coefficienti, riportati di seguito, suggerisce la possibilità di osservare stati NOON anche per bosoni molto debolmente attrattivi con numeri molto bassi di bosoni, sfruttando ampiezze di hopping correlate  $\kappa$  di ordine uno. È altresì semplice notare stati di Fock, nella stessa situazione precedente ma con bosoni debolmente repulsivi.

Nel caso  $N = 3$  si può osservare l'apparizione di un ulteriore nuovo aspetto: qui, al variare dei valori assunti dalla coppia  $(\zeta, \kappa)$ , l'autostato fondamentale cambia. Si ha:

$$\begin{aligned} E_{0,3}^{*,\kappa} &= A^* \left( |0,3\rangle + \frac{-1 + 2\kappa - \zeta - \sqrt{4 - 16\kappa + 16\kappa^2 + 2\zeta - 4\kappa\zeta + \zeta^2}}{\sqrt{3}(-1 + 2\kappa)} |1,2\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1 - 2\kappa + \zeta + \sqrt{4 - 16\kappa + 16\kappa^2 + 2\zeta - 4\kappa\zeta + \zeta^2}}{\sqrt{3}(1 - 2\kappa)} |2,1\rangle + |3,0\rangle \right), \quad \text{se } \kappa < \frac{1}{2}; \\ E_{0,3}^{*,\kappa} &= A^* \left( |0,3\rangle + \frac{-1 + 2\kappa + \zeta + \sqrt{4 - 16\kappa + 16\kappa^2 - 2\zeta + 4\kappa\zeta + \zeta^2}}{\sqrt{3}(-1 + 2\kappa)} |1,2\rangle + \right. \\ &\quad \left. - \frac{1 + 2\kappa + \zeta + \sqrt{4 - 16\kappa + 16\kappa^2 - 2\zeta + 4\kappa\zeta + \zeta^2}}{\sqrt{3}(-1 + 2\kappa)} |2,1\rangle + |3,0\rangle \right), \quad \text{se } \kappa > \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

dove  $A^*$ ,  $A^*$  sono i rispettivi coefficienti di normalizzazione; le relative autoenergie sono:

$$\begin{aligned} E_{0,3}^{*,\kappa} &= -1 + 2\kappa + 2\zeta - \sqrt{4 - 16\kappa + 16\kappa^2 + 2\zeta - 4\kappa\zeta + \zeta^2}, \\ E_{0,3}^{*,\kappa} &= 1 - 2\kappa + 2\zeta - \sqrt{4 - 16\kappa + 16\kappa^2 - 2\zeta + 4\kappa\zeta + \zeta^2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Anche in questo caso sono stati ottenuti risultati analitici, tuttavia per non appesantire troppo il testo, essi sono stati riportati in dettaglio nell'Appendice A. Osservando la Fig. 4.6, dove si riporta il comportamento dei coefficienti posto  $\kappa$  in modo che sia evidente la differenza con i rispettivi a  $\kappa = 0$ , si comprende come anche ora in regime debolmente attrattivo sia semplice ottenere uno stato NOON.

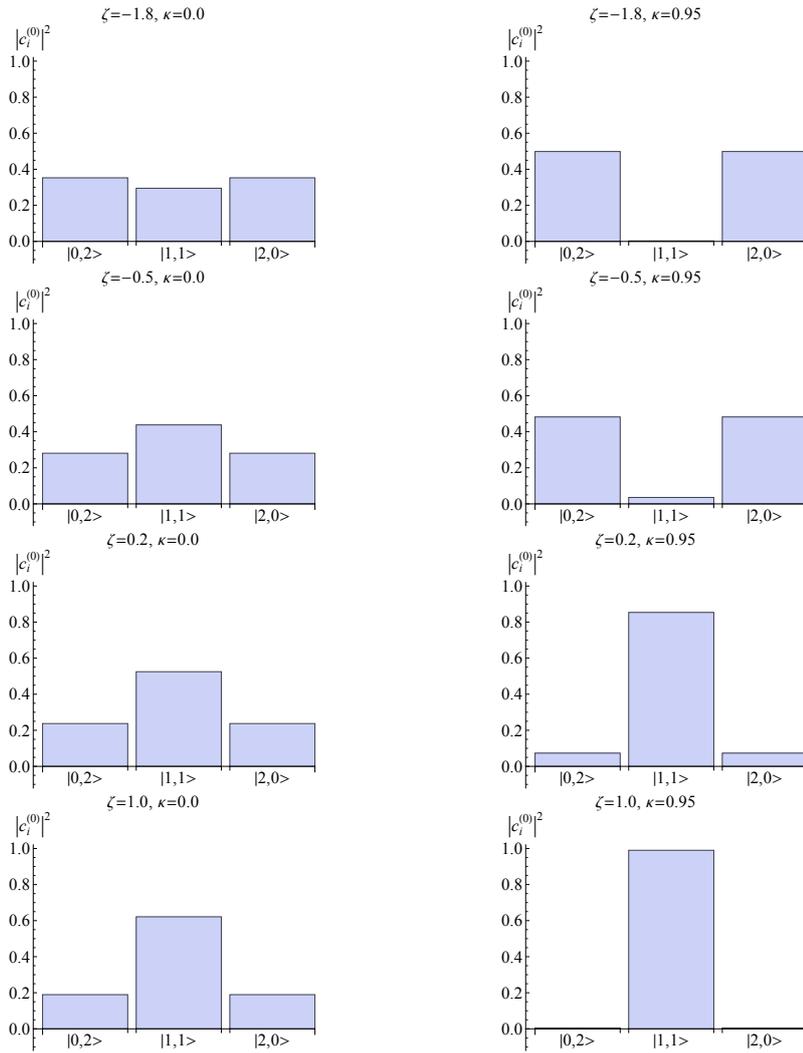
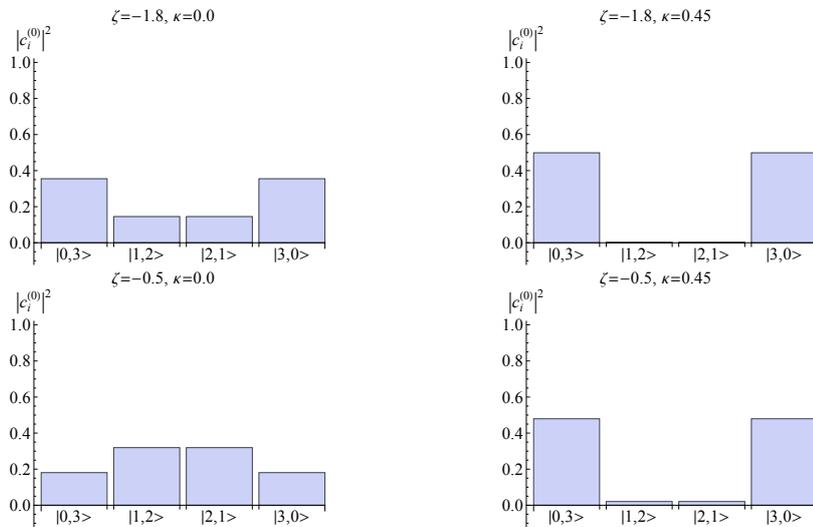


Figura 4.5: Instagrammi rappresentativi di  $|c_i^{(0)}|^2$  per  $N=2$ , nel caso  $\kappa=0$  (colonna di sinistra) e  $\kappa \neq 0$  (colonna di destra). Tutte le grandezze sono adimensionali.



## 4.2. ANALISI DELLO STATO FONDAMENTALE IN ASSENZA DI HOPPING DI COPPIA.35

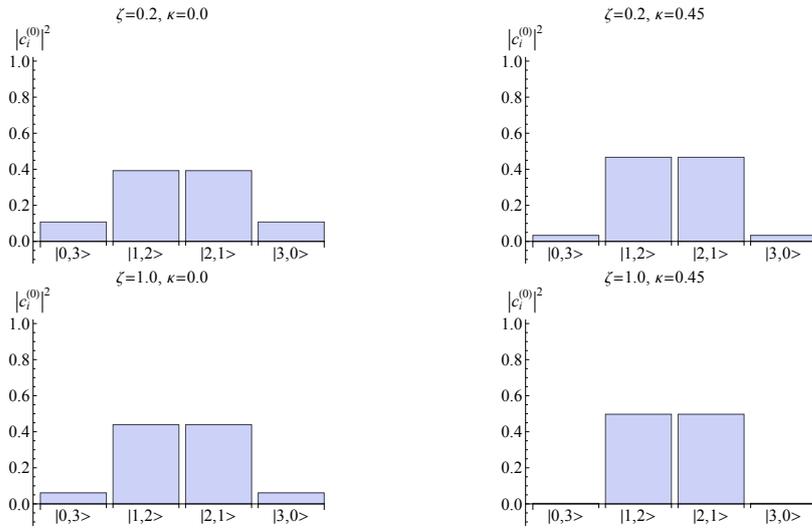
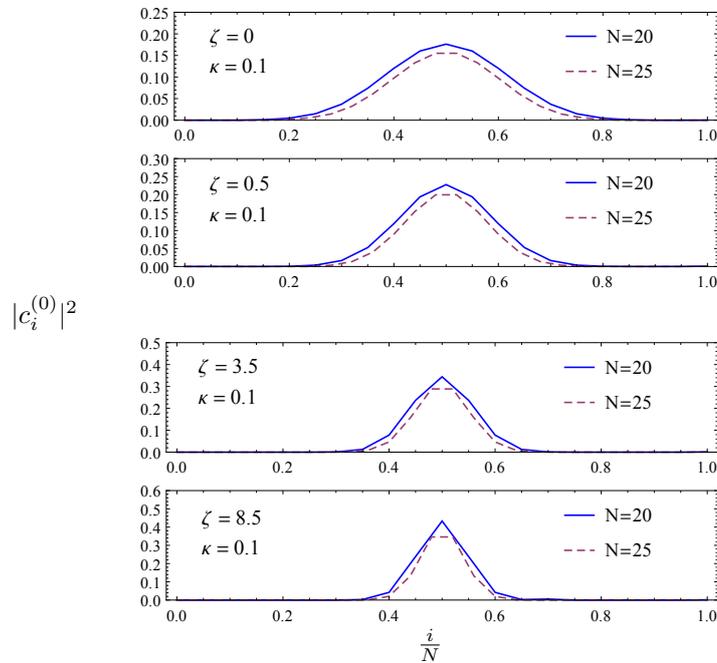


Figura 4.6: Istogrammi rappresentativi di  $|c_i^{(0)}|^2$  per  $N = 3$ , nel caso  $\kappa = 0$  (colonna di sinistra) e  $\kappa \neq 0$  (colonna di destra). Tutte le grandezze sono adimensionali.

Si osservi ora la Fig. 4.7, che mostra la distribuzione dei coefficienti dello stato fondamentale ad un valore fissato di  $\kappa$  per  $N = 20, 25$ , e la si confronti con la Fig. 4.3, relativa a  $\kappa = 0$ . Nel caso di grandi numeri di bosoni, gli intervalli in cui il sistema si comporta come esposto in precedenza per  $N = 2, 3$  spariscono (si può infatti notare che già nel passaggio da  $N = 2$  a  $N = 3$  hanno dimezzato la loro ampiezza), in modo tale che in questi casi l'effetto dell'hopping correlato stia nel rallentamento del passaggio dallo stato  $|CAT\rangle$  allo stato  $|FOCK\rangle$ , allargando dunque l'intervallo dei valori dell'interazione  $\zeta$  per cui lo stato del sistema si può considerare coerente.



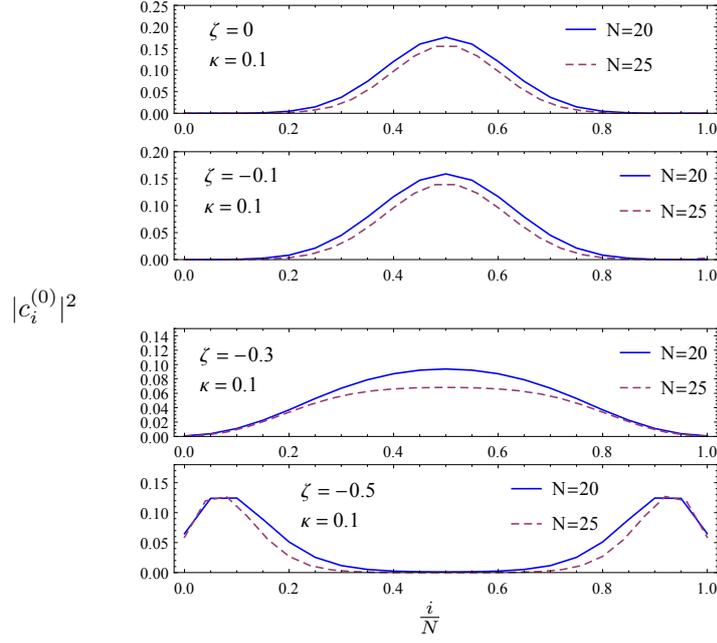


Figura 4.7: Comportamento di  $|c_i^{(0)}|^2$  al variare di  $\zeta$  per  $N = 20$  (linea continua) e  $N = 25$  (linea tratteggiata) bosoni.

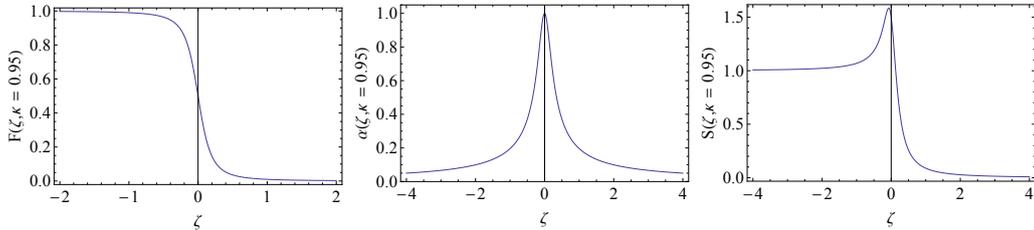
#### 4.2.1 Informazione di Fisher, coerenza ed entanglement.

Diamo ora le formule per i tre indicatori  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  limitatamente al caso di  $N = 2$  bosoni:

$$F_2^\kappa = \frac{1}{2} - \frac{\zeta}{2\sqrt{16(\kappa-1)^2 + \zeta^2}}, \quad \alpha_2^\kappa = \frac{4|\kappa-1|}{\sqrt{16(\kappa-1)^2 + \zeta^2}}, \quad (4.15)$$

$$S_2^\kappa = - \frac{\left( \frac{1}{4} - \frac{\zeta}{4\sqrt{16(\kappa-1)^2 + \zeta^2}} \right) \left( \frac{(\sqrt{16(\kappa-1)^2 + \zeta^2} + \zeta)^2 \log_2 \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\zeta}{\sqrt{16(\kappa-1)^2 + \zeta^2}} + 1 \right) \right)}{(\kappa-1)^2} + 16 \log_2 \left( \frac{1}{4} - \frac{\zeta}{4\sqrt{16(\kappa-1)^2 + \zeta^2}} \right) \right)}{8 \log_2 2}. \quad (4.16)$$

Per i risultati a  $N = 3$  si rimanda all'Appendice A. Le Figg. 4.8 e 4.9 riportano i grafici degli indicatori di analisi nei casi trattati sopra di bassi e alti  $N$ .



#### 4.2. ANALISI DELLO STATO FONDAMENTALE IN ASSENZA DI HOPPING DI COPPIA.37

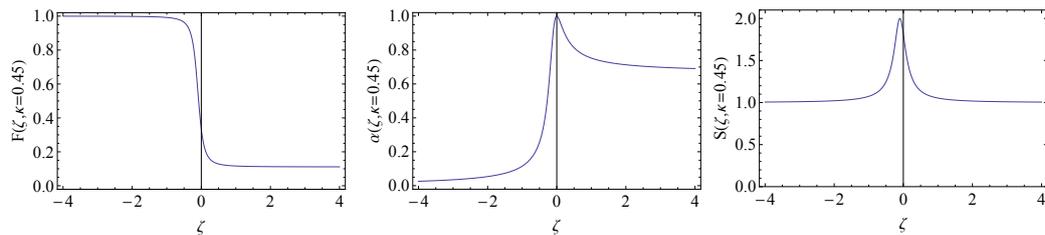


Figura 4.8: Indicatori nel caso di assenza di hopping di coppia a  $\kappa$  fissato, per  $N = 2$  (pannello superiore) e  $N = 3$  (pannello inferiore).  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

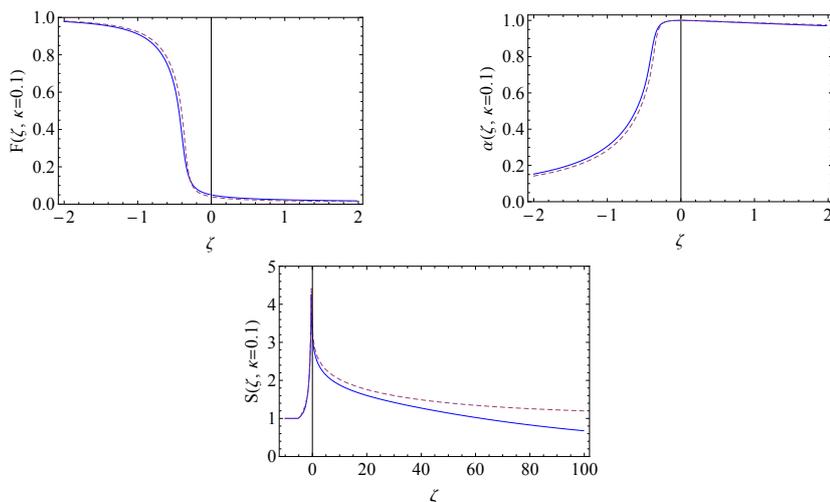


Figura 4.9:  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  in funzione di  $\zeta$  nel caso di assenza di hopping di coppia a  $\kappa$  fissato, per  $N = 20$  (linea continua) e  $N = 25$  (linea tratteggiata) bosoni.  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

Dal confronto delle due figure precedenti con le Figg. 4.2 e 4.4, si nota che la differenza sta nell'intervallo in cui si passa dal regime NOON a quello di Fock (si noti al proposito l'intervallo di ascisse utilizzato nei vari casi). Il passaggio, nel caso di  $N = 2, 3$  bosoni con tali scelte del parametro  $\kappa$ , avviene in modo molto più repentino rispetto al caso con  $\kappa = 0$ , e ciò giustifica le affermazioni riportate sopra riguardo la possibilità di ottenere stati rispettivamente NOON e di Fock in regime debolmente attrattivo e repulsivo anche per pochi bosoni; nel caso di  $N = 20, 25$  bosoni questo invece non può avvenire, come già esposto. Si sottolinea che quest'ultima configurazione rimane comunque la più comune anche nel caso di bassi numeri  $N$ , dato che gli intervalli in cui essa è verificata sono illimitati, al contrario di quelli in cui si presenta la interessante ma atipica situazione presa in considerazione precedentemente. Per il resto, si osserva lo stesso tipo di transizione di stato per ogni valore di  $\kappa$ , dallo stato  $|CAT\rangle$  a  $|ACS\rangle$  a  $|FOCK\rangle$  per  $N$  pari o  $|pseudoFOCK\rangle$  per  $N$  dispari, osservando, in quest'ultimo caso, gli stessi valori limite, a  $N$  fissato, notati a  $\kappa = 0$  e consistentemente per qualsiasi suo valore non nullo. Gli indicatori di analisi sono ora da intendere come funzioni a due variabili che generano, ove definite, varietà bidimensionali. Si possono ottenere risultati analitici nel caso di bassi numeri di bosoni.

Nel caso  $N = 2$  il dominio di definizione è  $\mathcal{D} = \{(\zeta, \kappa) \in \mathbb{R}^2 \text{ t.c. } (\zeta, \kappa) \neq (0, 1)\}$ , tuttavia esse hanno buoni limiti per tali valori, cosicché esse possano essere estese a tali punti, non ivi

risultando, tuttavia, differenziabili. I grafici degli indicatori (estesi) sono riportati in Fig. 4.10. L'intersezione grafica con piani per  $\kappa = \text{cost}$  e perpendicolari a quello delle  $\zeta$  restituisce i grafici degli indicatori unidimensionali per sistemi posti ai relativi  $\kappa$ : prendendo ad esempio  $\kappa = 0$  si trovano i grafici della Sezione 2.1.

Gli indicatori del sistema con  $N = 3$ , visibili graficamente nella Fig. 4.11, sono funzioni a due variabili a tratti, differenziabili in tutto il dominio di esistenza e ben prolungabili anche nei punti di stretta non esistenza matematica; si sottolinea che nei punti della linea di giunzione appartenenti al dominio le funzioni sono differenziabili.

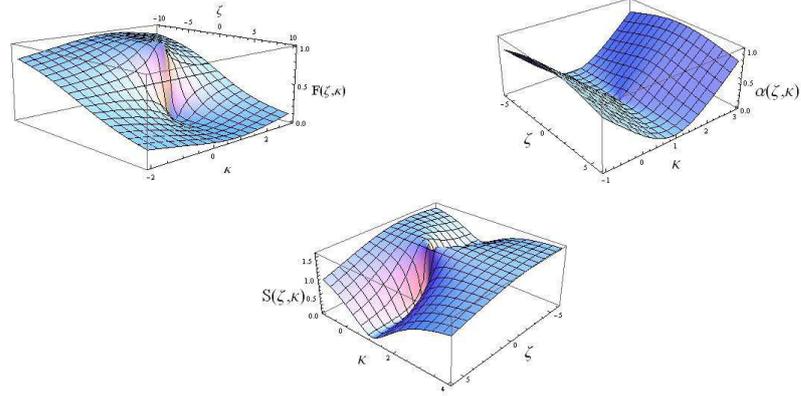


Figura 4.10:  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  in funzione di  $\zeta$  e  $\kappa$  nel caso di presenza di hopping correlato ( $\kappa \neq 0$ ) per  $N = 2$  bosoni.  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

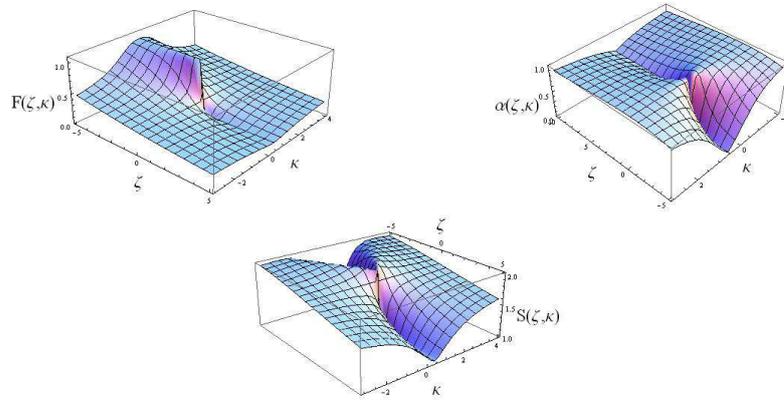


Figura 4.11:  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  in funzione di  $\zeta$  e  $\kappa$  nel caso di presenza di hopping correlato ( $\kappa \neq 0$ ) per  $N = 3$  bosoni.  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

### 4.3 Influenza dell'hopping correlato sugli stati NOON, coerente e di Fock.

In quest'ultima parte verrà studiato più in dettaglio l'importanza del tipo di interazione presente nel sistema al fine della determinazione delle sue proprietà:  $\zeta$ , l'interazione effettiva in sito dei

### 4.3. INFLUENZA DELL'HOPPING CORRELATO SUGLI STATI NOON, COERENTE E DI FOCK.39

bosoni, differentemente da quanto fatto diffusamente sin qui, verrà fissato volta per volta in corrispondenza dei tre stati notevoli Fock, NOON e coerente, mentre si lascerà variare l'hopping correlato  $\kappa$  per comprendere come esso li influenzi. Per il resto la tecnica di analisi rimarrà invariata rispetto a quanto già fatto. Nonostante la grande diversità della natura di questi stati, si giungerà ad un'unica conclusione: l'hopping correlato  $\kappa$  agisce sempre in modo da rendere coerente qualsiasi stato iniziale del sistema, seppur più o meno rapidamente a seconda di quest'ultimo.

Iniziamo fissando  $\zeta = 100$ , in corrispondenza del quale, a  $\kappa = 0$ , lo stato fondamentale è quello di Fock. Le Figg. 4.12, 4.13 e 4.14 riportano il quadrato dei coefficienti in funzione dell'hopping di coppia a  $\zeta$  fissato. Come si può notare, per piccoli valori di  $\kappa$  la struttura di stato di Fock non muta significativamente, ma ci si accorge subito che non appena essi iniziano ad assumere valori via via maggiori in modulo di una soglia che dipende strettamente da  $N$  e che diminuisce man mano che  $N$  cresce, è ben osservabile una transizione che porta lo stato ad assumere coerenza, fino a divenire coerente per valori in modulo alti dell'hopping e dipendenti da  $N$ : si può affermare ad esempio che per  $N = 2, 3$  ciò avviene per  $|\kappa| \gtrsim 100$ , per  $N = 20, 25$  basta invece  $|\kappa| \gtrsim 20$ .

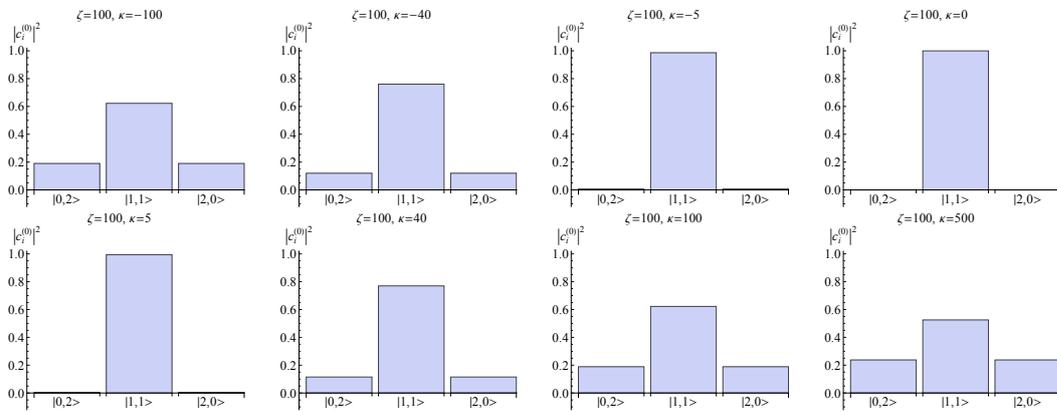


Figura 4.12: Coefficienti dello stato fondamentale al variare dell'hopping correlato, con  $N = 2$ .

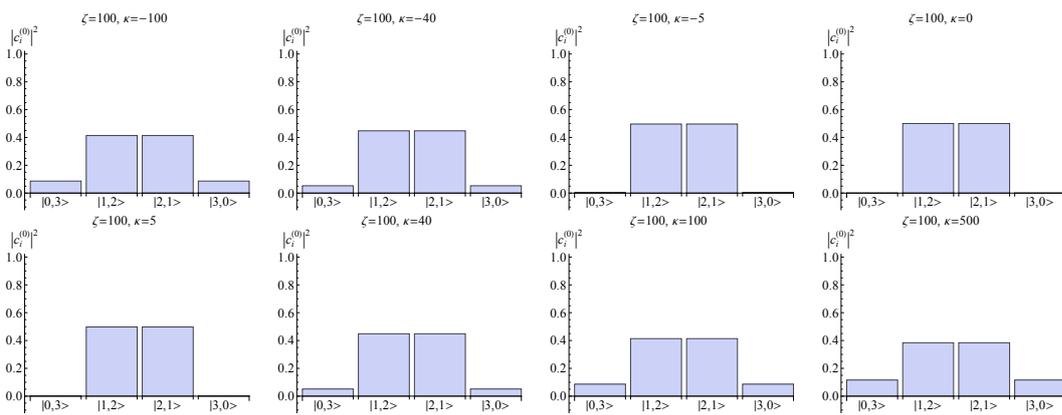


Figura 4.13: Coefficienti dello stato fondamentale al variare dell'hopping correlato, con  $N = 3$ .

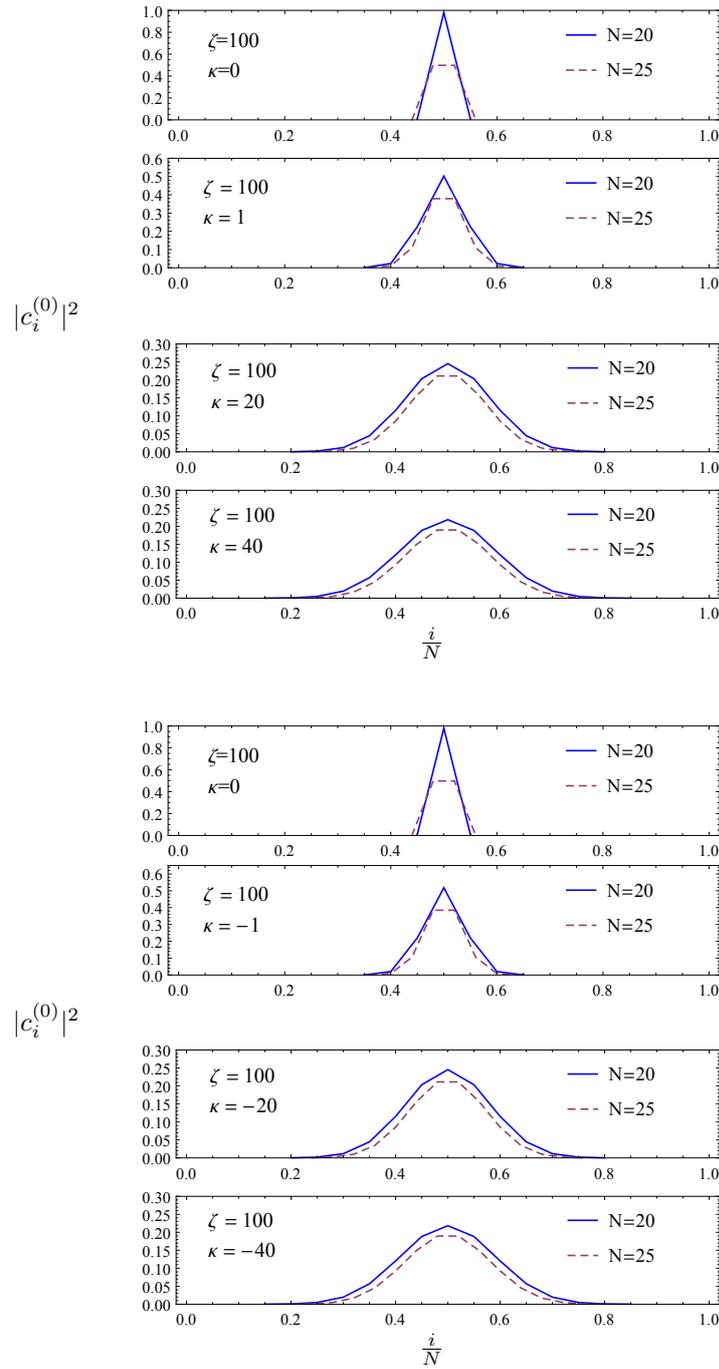


Figura 4.14: Coefficienti dello stato fondamentale al variare dell'hopping correlato, con  $N = 20$  e  $N = 25$  bosoni.

La riprova di tale comportamento è data, al solito, dagli indicatori di analisi, riportati nelle Figg. 4.15 e 4.16. Come si nota, i tre indicatori assumono per  $\kappa = 0$  i corrispondenti valori  $F(\xi = 100, \kappa = 0)$ ,  $\alpha(\xi = 100, \kappa = 0)$ ,  $S(\xi = 100, \kappa = 0)$  degli stati  $|FOCK\rangle$  per  $N$  pari e

### 4.3. INFLUENZA DELL'HOPPING CORRELATO SUGLI STATI NOON, COERENTE E DI FOCK.41

$|pseudoFOCK\rangle$  altrimenti (si ricorda che in generale i limiti degli indicatori in quest'ultimo caso dipendono dal numero di bosoni considerato, eccettuato quello dell'entanglement  $S$  che è sempre uno) ed essi crescono fino a raggiungere i valori caratteristici dello stato  $|ACS\rangle$  per intensità di hopping correlato variabili con  $N$ .

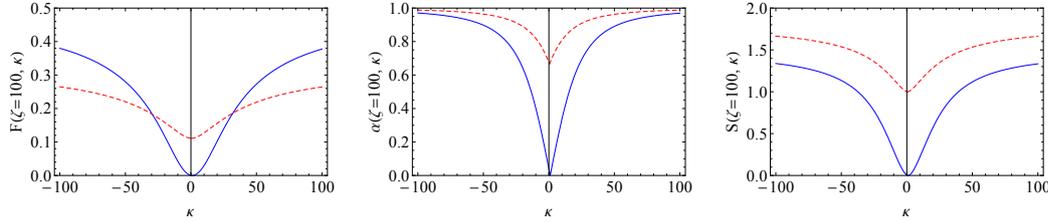


Figura 4.15: Indicatori per l'analisi dello stato di Fock per  $N = 2$  (linea continua) e  $N = 3$  (linea tratteggiata).  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

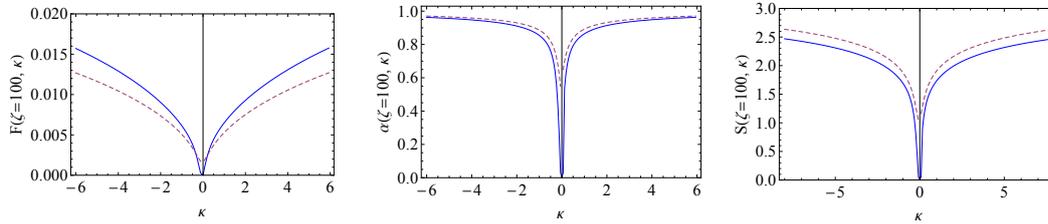


Figura 4.16: Indicatori per l'analisi dello stato di Fock per  $N = 20$  (linea continua) e  $N = 25$  (linea tratteggiata).  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

Analoghe considerazioni si traggono ponendo l'interazione effettiva in sito  $\zeta = -100$  nel caso  $N = 2, 3$  e  $\zeta = -0.5$  per  $N = 20, 25$ , in corrispondenza dei quali valori il sistema è posto nello stato NOON. Le Figg. 4.17, 4.18 e 4.19 mostrano in modo evidente la transizione che porta lo stato NOON in quello coerente, in una scala di valori dell'hopping correlato che dipende ancora in modo molto forte dal numero di bosoni, in generale restringendosi a  $N$  crescente, in modo che mentre per  $N = 2, 3$  l'intervallo di transizione rimanga molto ampio (lo stato diventa coerente per  $|\kappa| > 100$ ), per  $N = 20, 25$  esso sia molto più ristretto (basta, per la coerenza,  $|\kappa| > 2$ ).

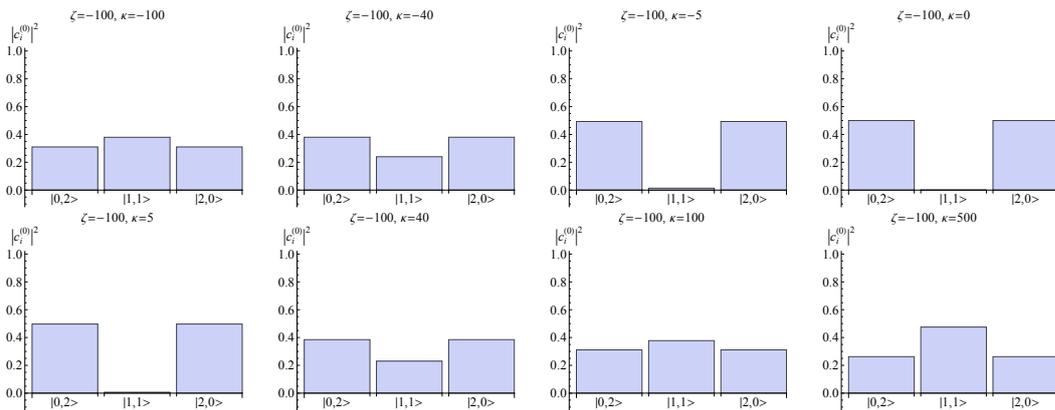


Figura 4.17: Coefficienti dello stato fondamentale al variare dell'hopping correlato, con  $N = 2$ .

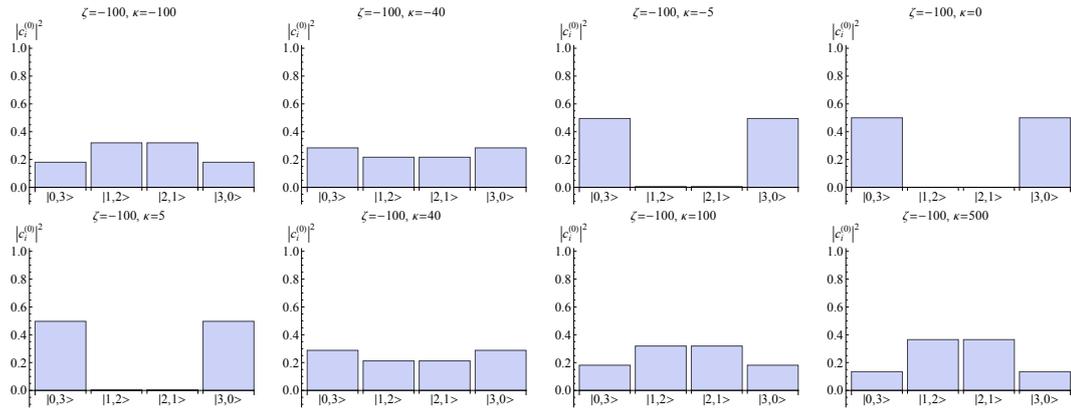
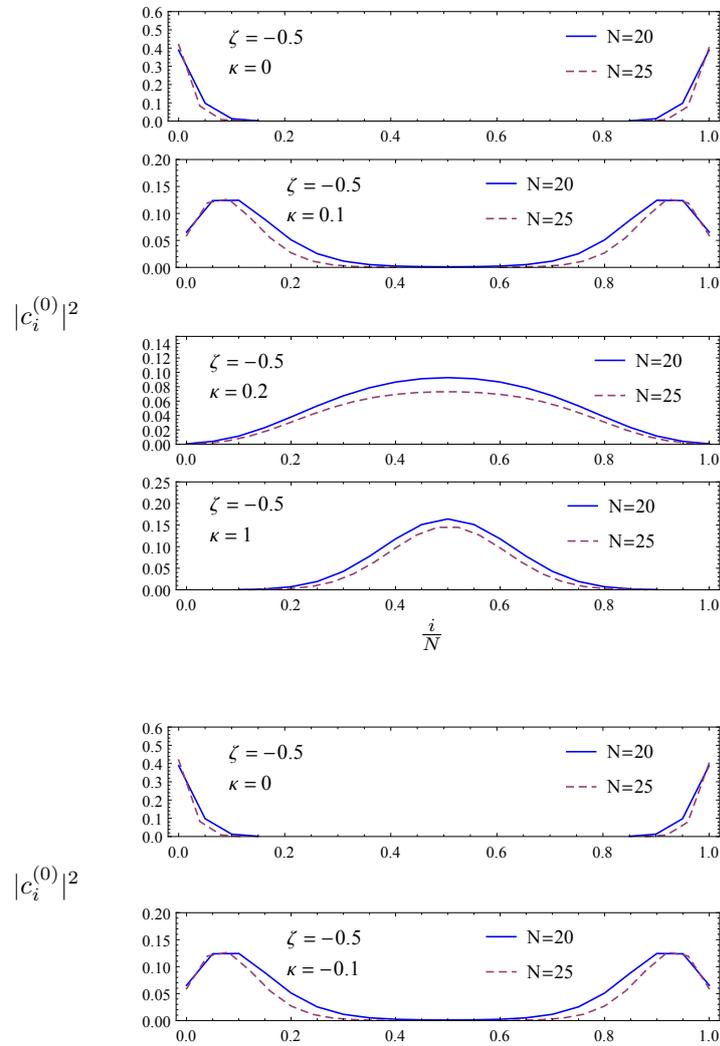


Figura 4.18: Coefficienti dello stato fondamentale al variare dell'hoping correlato, con  $N = 3$ .



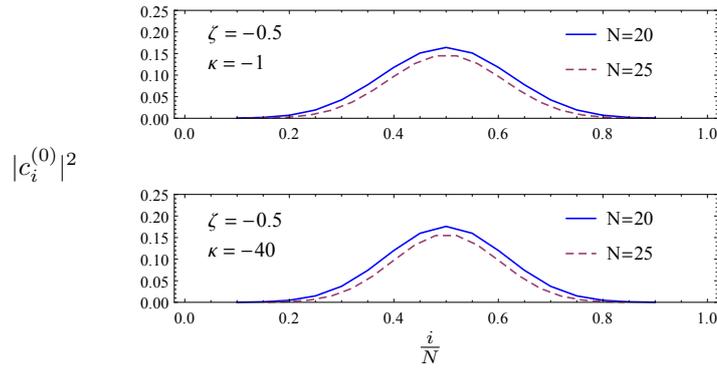


Figura 4.19: Coefficienti dello stato fondamentale al variare dell'hopping correlato, con  $N = 20$  e  $N = 25$  bosoni.

Anche i grafici dei tre indicatori  $F$ ,  $\alpha$ ,  $\kappa$ , riportati nelle Figg. 4.20 e 4.21, giustificano la precedente conclusione: l'informazione di Fisher è unitaria a  $\kappa = 0$ , come avviene nel regime NOON, per poi raggiungere il valore  $\frac{1}{N}$  tipico dello stato coerente; la coerenza da nulla a  $\kappa = 0$  diviene uguale ad uno man mano che  $\kappa$  cresce in modulo; infine, l'entropia di entanglement è uguale a uno a  $\kappa = 0$ , raggiunge simmetricamente il suo massimo per poi stabilizzarsi sui suoi valori per stati coerenti, in genere maggiori di 1.

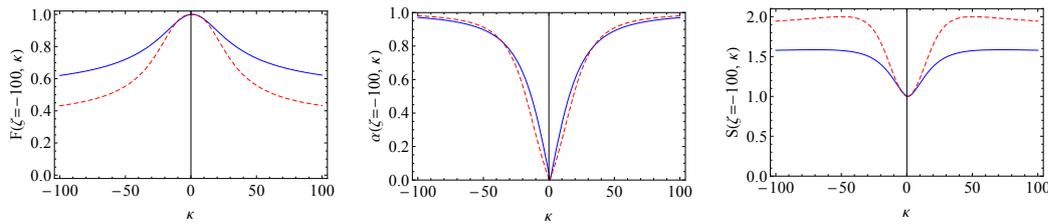


Figura 4.20: Indicatori per l'analisi dello stato NOON per  $N = 2$  (linea continua) e  $N = 3$  (linea tratteggiata).  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

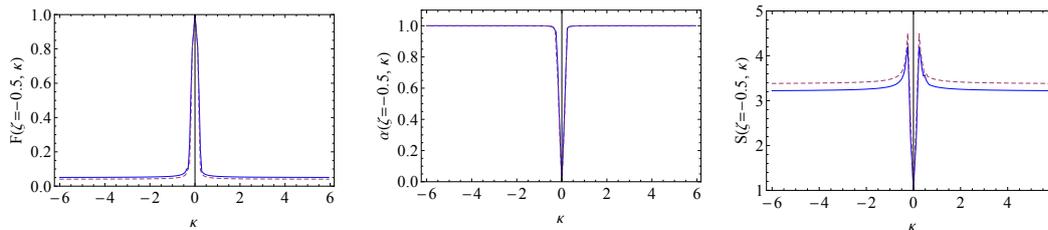


Figura 4.21: Indicatori per l'analisi dello stato NOON per  $N = 20$  (linea continua) e  $N = 25$  (linea tratteggiata).  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

Concludiamo la sezione con una rapida analisi all'azione dell'hopping correlato  $\kappa$  sullo stato coerente: in questo caso, lo stato non cambia mai per qualsiasi valore di  $\kappa$  e dunque gli indicatori  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  in funzione dell'hopping hanno grafici dati semplicemente da rette orizzontali con intersezioni sull'asse delle ordinate relative al valore atteso per ognuno di essi nel regime coerente. Tali grafici sono mostrati di seguito.

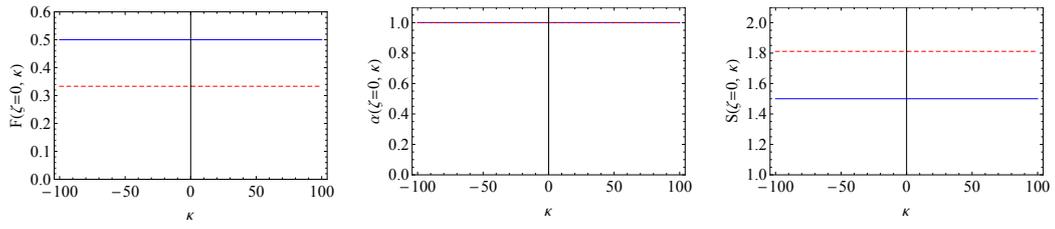


Figura 4.22: Indicatori per l'analisi dello stato coerente per  $N = 2$  (linea continua) e  $N = 3$  (linea tratteggiata).  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

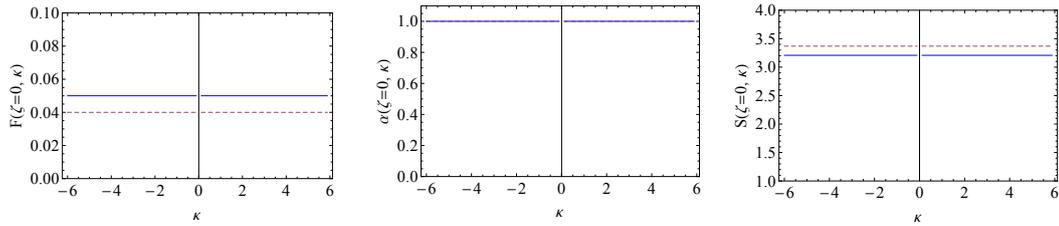


Figura 4.23: Indicatori per l'analisi dello stato coerente per  $N = 20$  (linea continua) e  $N = 25$  (linea tratteggiata).  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$ ,  $\zeta$  e  $\kappa$  sono adimensionali.

## Capitolo 5

# Conclusioni.

Giunti alla conclusione del lavoro, ripercorriamo brevemente le tappe e i principali risultati ottenuti. Dopo aver contestualizzato il problema, abbiamo richiamato alcune nozioni fisiche e matematiche necessarie per il suo successivo sviluppo. Abbiamo poi definito il sistema, un numero  $N$  di bosoni dipolari confinati in una geometria quasi-unidimensionale a temperatura nulla e sottoposti ad una interazione a corto raggio spaziale e a una a lungo raggio, dovuta alla natura dipolare dei bosoni. Procedendo dall'Hamiltoniano di Bose-Hubbard esteso scritto in termini di operatori di singola particella, abbiamo studiato lo stato fondamentale del sistema al variare dell'importanza dei fenomeni indotti dalla interazione a due corpi (interazione effettiva di contatto e hopping correlato) sia analiticamente ( $N = 2, 3$ ) sia numericamente ( $N = 20, 25$ ). Abbiamo caratterizzato lo stato dal punto di vista delle correlazioni analizzando l'informazione di Fisher quantistica, la visibilità, e l'entropia di entanglement in termini della interazione effettiva di contatto e dell'hopping correlato. Ottenuto l'Hamiltoniano, è stato possibile proseguire all'analisi del sistema, costituita da una parte dalla soluzione del problema agli autovalori e autovettori, analiticamente per  $N$  piccoli e computazionalmente per  $N$  grandi, e dall'altra dallo studio delle caratteristiche dello stato fondamentale mediante tre indicatori: l'informazione di Fisher, la coerenza e l'entropia di entanglement. Grazie ad essi, abbiamo potuto comprendere la tipologia dei regimi in cui si può porre lo stato fondamentale del sistema e in particolare le modalità di transizione tra di essi in funzione del tipo e del valore dei parametri considerati nell'Hamiltoniano, oltre che del numero di bosoni. Dapprima, abbiamo studiato due configurazioni distinte, nella prima della quale è presente solamente l'interazione effettiva in sito, mentre nella seconda anche l'hopping correlato a un valore fissato, focalizzandoci cioè sulle proprietà dello stato fondamentale in funzione dell'interazione in sito. Nel primo caso, abbiamo notato, per qualunque  $N$  studiato, il passaggio dallo stato NOON, combinazione lineare dei due stati in cui tutti i bosoni sono in una buca oppure nell'altra, per valori negativi dell'interazione, allo stato coerente, combinazione lineare di tutti i possibili stati di base dello spazio di Hilbert del sistema, pesati in base al numero di stati microscopici classici che realizzano ciascuno di essi, per interazione nulla, allo stato di Fock, in cui i bosoni si distribuiscono equamente nelle due buche, per valori positivi dell'interazione. Abbiamo notato che al crescere di  $N$  l'intervallo di coerenza diminuisce. Nel secondo caso, il comportamento si differenzia col numero di bosoni considerato: infatti, se per poche particelle il sistema si può porre in uno stato per cui l'intervallo di coerenza è molto ristretto in termini di interazione in sito, tanto che si raggiungono rapidamente gli stati NOON e di Fock in corrispondenza di un suo valore rispettivamente negativo e positivo ma molto piccolo, oppure in uno stato per cui si allarga l'intervallo di coerenza rispetto al caso di hopping correlato nullo, nel caso di un alto numero di bosoni solo quest'ultimo caso è possibile.

Infine, abbiamo percorso una via per certi versi speculare alla precedente, fissando volta per volta l'interazione effettiva in sito in corrispondenza dei tre regimi fondamentali (NOON, coerente e Fock), studiando il loro comportamento in funzione dell'hopping correlato, dimostrando che in ogni caso esso tende a renderli coerenti, in un intervallo ancora una volta fortemente dipendente dal numero di bosoni considerato: sia nel caso dello stato NOON che in quello di Fock, i soli per cui abbia senso parlarne, l'intervallo di transizione (in funzione dell'hopping correlato) tra ciascuno di essi e lo stato coerente diminuisce di ampiezza al crescere di  $N$ .

## Appendice A

# Risultati analitici per $N = 3$ bosoni.

Riportiamo di seguito le formule analitiche ottenute per i coefficienti dello stato fondamentale e per gli indicatori  $F$ ,  $\alpha$ ,  $S$  nel caso di  $N = 3$  bosoni in presenza di hopping di coppia  $\kappa$  oltre all'interazione in sito  $\zeta$ .

Per i coefficienti si ha, nel caso  $\kappa < \frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned}
 c_1^{(0)*} = c_4^{(0)*} &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\frac{\zeta(\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4-4\kappa+2})-(2\kappa-1)(\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4-8\kappa+4})+\zeta^2}{(1-2\kappa)^2}}}, \\
 c_2^{(0)*} &= \frac{(1-2\kappa)\sqrt{\frac{\zeta(\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4-4\kappa+2})-(2\kappa-1)(\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4-8\kappa+4})+\zeta^2}{(1-2\kappa)^2}}}{2\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4}}, \\
 c_3^{(0)*} &= \frac{(1-2\kappa)\sqrt{\frac{\zeta(\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4-4\kappa+2})-(2\kappa-1)(\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4-8\kappa+4})+\zeta^2}{(1-2\kappa)^2}}}{2\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4}};
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

mentre se  $\kappa > \frac{1}{2}$  si ha:

$$\begin{aligned}
 c_1^{(0)*} = c_4^{(0)*} &= \frac{1}{\sqrt{\frac{2(\sqrt{\zeta^2+4(\zeta-4)\kappa-2\zeta+16\kappa^2+4+\zeta+2\kappa-1})^2}{3(1-2\kappa)^2}+2}}, \\
 c_2^{(0)*} &= \frac{\sqrt{\zeta^2+4(\zeta-4)\kappa-2\zeta+16\kappa^2+4+\zeta+2\kappa-1}}{\sqrt{3}(2\kappa-1)\sqrt{\frac{2(\sqrt{\zeta^2+4(\zeta-4)\kappa-2\zeta+16\kappa^2+4+\zeta+2\kappa-1})^2}{3(1-2\kappa)^2}+2}}, \\
 c_3^{(0)*} &= -\frac{\sqrt{\zeta^2+4(\zeta-4)\kappa-2\zeta+16\kappa^2+4+\zeta+2\kappa-1}}{\sqrt{3}(2\kappa-1)\sqrt{\frac{2(\sqrt{\zeta^2+4(\zeta-4)\kappa-2\zeta+16\kappa^2+4+\zeta+2\kappa-1})^2}{3(1-2\kappa)^2}+2}}.
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Passiamo ora agli indicatori, per cui si ha, nel caso  $\kappa < \frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned}
 F_3^* &= \frac{5\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4-4\zeta+8\kappa-4}}{9\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4}}, \\
 \alpha_3 &= \frac{\left|\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4+\zeta-8\kappa+4}\right|}{3\sqrt{\zeta^2-4(\zeta+4)\kappa+2\zeta+16\kappa^2+4}},
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

$$S_3^* = - \frac{(1-2\kappa)^2 \left( \frac{2(\sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} + \zeta - 2\kappa + 1)^2 \log_2 \left( \frac{\sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} + \zeta - 2\kappa + 1}{4\sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4}} \right)}{(1-2\kappa)^2} \right)}{4 \log_2 2 \left( \zeta \left( \sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} - 4\kappa + 2 \right) - (2\kappa - 1) \left( \sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} - 8\kappa + 4 \right) + \zeta^2 \right) + \frac{6 \log_2 \left( \frac{\sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} - \zeta + 2\kappa - 1}{4\sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4}} \right)}{4 \log_2 2 \left( \zeta \left( \sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} - 4\kappa + 2 \right) - (2\kappa - 1) \left( \sqrt{\zeta^2 - 4(\zeta+4)\kappa + 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} - 8\kappa + 4 \right) + \zeta^2 \right)}; \quad (\text{A.4})$$

mentre nel caso  $\kappa > \frac{1}{2}$  si ottiene:

$$F_3^* = \frac{5\sqrt{\zeta^2 + 4(\zeta-4)\kappa - 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} - 4\zeta - 8\kappa + 4}{9\sqrt{\zeta^2 + \zeta(4\kappa-2)} + 4(1-2\kappa)^2},$$

$$\alpha_3^* = \frac{\left| -\sqrt{\zeta^2 + 4(\zeta-4)\kappa - 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} - \zeta - 8\kappa + 4 \right|}{3\sqrt{\zeta^2 + \zeta(4\kappa-2)} + 4(1-2\kappa)^2},$$

$$S_3^* = - \frac{\frac{2(\sqrt{\zeta^2 + 4(\zeta-4)\kappa - 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} + \zeta + 2\kappa - 1)^2 \log_2 \left( \frac{\sqrt{\zeta^2 + 4(\zeta-4)\kappa - 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} + \zeta + 2\kappa - 1}{4\sqrt{\zeta^2 + \zeta(4\kappa-2)} + 4(1-2\kappa)^2} \right)}{(1-2\kappa)^2}}{3 \log_2 2 \left( \frac{2(\sqrt{\zeta^2 + 4(\zeta-4)\kappa - 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} + \zeta + 2\kappa - 1)^2}{3(1-2\kappa)^2} + 2 \right)} + \quad (\text{A.5})$$

$$- \frac{6 \log_2 \left( \frac{1}{\frac{2(\sqrt{\zeta^2 + 4(\zeta-4)\kappa - 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} + \zeta + 2\kappa - 1)^2}{3(1-2\kappa)^2} + 2} \right)}{3 \log_2 2 \left( \frac{2(\sqrt{\zeta^2 + 4(\zeta-4)\kappa - 2\zeta + 16\kappa^2 + 4} + \zeta + 2\kappa - 1)^2}{3(1-2\kappa)^2} + 2 \right)}.$$

Se si pone  $\kappa = 0$  nelle espressioni valide per  $\kappa < \frac{1}{2}$ , si ritorna consistentemente alle corrispondenti espressioni per  $N = 3$  trovate nel caso di assenza di hopping correlato.

## Appendice B

# Codice in linguaggio C++.

```
#include<iostream>
#include<armadillo>
#include<cmath>

using namespace std;
using namespace arma;

int main ()

{
  cout << "Stabilire il numero delle particelle:" << endl;
  int N;
  cin >> N;
  cout << "Stabilire l'intensità dell'interazione in sito:" << endl;
  double xi;
  cin >> xi;
  cout << "Premere 1 per ottenere i coefficienti al quadrato" << endl;
  cout << "Premere 2 per ottenere i punti per i grafici degli indicatori" << endl;
  char scelta;
  cin >> scelta;
  switch (scelta)
  {
    case '1':
      cout << "Stabilire l'intensità dell'hopping correlato:" << endl;
      double kappa;
      cin >> kappa;
      mat H(N+1, N+1);
      for (int i=0; i<N+1; i++)
      {
        for (int j=0; j<N+1; j++)
        {
          if (j==i-1 && j>-1)
            H(i,j)=-sqrt((N-i+1)*i)*(1+kappa*(N-1));
          else if (i==j)
```

```

    H(i,j)=(xi/2)*(2*(N-i)*(N-i)+N*N-2*N*(N-i)-N);
    else if (j==i+1 && j<N+1)
        H(i,j)=-sqrt((N-i)*(i+1))*(1+kappa*(N-1));
    else
        H(i,j)=0.0;
    }
}
vec eigval(N+1); //autovalori(vettori) della matrice H
mat eigvec(N+1, N+1);
eig_sym(eigval, eigvec, H);
double E_gs = eigval(0); //energia dello stato fondamentale
vec gs(N+1); //stato fondamentale
for (int i=0; i<N+1; i++)
{
    gs(i)=eigvec(i,0);
}
double norma = 0.0; //normalizzazione
for (int i=0; i<N+1; i++)
{
    norma += gs(i)*gs(i);
}
vec gsn(N+2);
gsn (N+1) = 0.0;
for (int i=0; i<N+1; i++)
{
    gsn(i)=(1.0/norma)*gs(i);
}
cout << "Energia dello stato fondamentale: " << E_gs << endl;
cout << "Componenti normalizzate dello stato fondamentale: " << endl;
for (int i=0; i<N+1; i++)
{
    cout << gsn(i) << " ";
}
cout << " " << endl;
cout << "Quadrato delle componenti normalizzate dello stato fondamentale: " << endl;
double *a = new double [N+1];
for (int i=0; i<N+1; i++)
{
    a[i]=0.0;
}
double M = double (N);
for (int i=0; i<N+1; i++)
{
    a[i] = i/M;
    cout << "{"<<a[i]<<","<< gsn(i)*gsn(i) <<"}", ";
}
cout << "" <<endl;
break;
case '2':

```

```

cout << "Stabilire l'intensità minima dell'hopping correlato:" << endl;
double l;
cin >> l;
cout << "Stabilire l'intensità massima dell'hopping correlato:" << endl;
double u;
cin >> u;
double h = (u-l)/200.0;
double *kappa = new double [200];
for (int k=0; k<201, k++)
{
  kappa[k] = l+h*k;
  mat H(N+1, N+1);
  for (int i=0; i<N+1; i++)
  {
    for (int j=0; j<N+1; j++)
    {
      if (j==i-1 && j>-1)
        H(i,j)=-sqrt((N-i+1)*i)*(1+kappa[k]*(N-1));
      else if (i==j)
        H(i,j)=(xi/2)*(2*(N-i)*(N-i)+N*N-2*N*(N-i)-N);
      else if (j==i+1 && j<N+1)
        H(i,j)=-sqrt((N-i)*(i+1))*(1+kappa[k]*(N-1));
      else
        H(i,j)=0.0;
    }
  }
  vec eigval(N+1); //autovalori(vettori) della matrice H
  mat eigvec(N+1, N+1);
  eig_sym(eigval, eigvec, H);
  double E_gs = eigval(0); //energia dello stato fondamentale
  vec gs(N+1); //stato fondamentale
  for (int i=0; i<N+1; i++)
  {
    gs(i)=eigvec(i,0);
  }
  double norma = 0.0; //normalizzazione
  for (int i=0; i<N+1; i++)
  {
    norma += gs(i)*gs(i);
  }
  vec gsn(N+2);
  gsn (N+1) = 0.0;
  for (int i=0; i<N+1; i++)
  {
    gsn(i)=(1.0/norma)*gs(i);
  }
  double f, a, s; //calcolo indicatori di stato
  f = 0.0;
  for (int i=0; i<N+1; i++)

```

```
{
  f += (2*i-M)*(2*i-M)*gsn(i)*gsn(i)/(M*M);
}
cout << "{" << kappa[k] << "," << f << "}";
}
cout << "" << endl;
break;
}
return 0;
}
```

# Bibliografia

- [1] O. Morsch and M. Oberthaler. *Rev. Mod. Phys.* **78**, 179 (2006).
- [2] B. D. Josephson. *Phys. Lett.* **1**, 251 (1962).
- [3] A. J. Leggett. *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307 (2001).
- [4] H. J. Metcalf and P. van der Straten. *Laser Cooling and Trapping*. Springer New York, 1999.
- [5] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, and T. Pfau. *Rep. Progr. Phys.* **72**, 126401 (2009).
- [6] I. Bloch. *Nat. Phys.* **1**, 23 (2005).
- [7] G. Mazzaella, M. Moratti, L. Salasnich, and F. Toigo. *J. Phys. B: At., Mol. and Opt. Phys.* **43**, 065303 (2010).
- [8] G. Mazzaella, L. Salasnich, A. Parola, and F. Toigo. *Phys. Rev. A* **83**, 053607 (2011).
- [9] G. Mazzaella and L. Dell’Anna. *EPJ ST (Novel Quantum Phases and Mesoscopic Physics in Quantum Gases)* **217**, 197 (2013).
- [10] K. Huang. *Meccanica statistica*. Zanichelli, 1997.
- [11] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics, Volume 2*. Wiley, 1992.
- [12] C. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002.
- [13] C. Rossetti. *Metodi Matematici della Fisica*. Levrotto&Bella, 2000.
- [14] L. Salasnich. *Quantum Physics of Light and Matter: A Modern Introduction to Photons, Atoms and Many-Body Systems*. UNITEXT for Physics. Springer International Publishing, 2014.
- [15] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics, Volume 1*. Wiley, 1992.
- [16] J. Preskill. *Lecture notes for physics 229: Quantum Information and Computation*. California Institute of Technology, 1998.
- [17] M. Galante, *Quantum entanglement for ultra-cold atoms in optical traps*, Tesi di Laurea presso l’Università degli Studi di Padova, 2013; M. Galante, G. Mazzaella and L. Salasnich, sottomesso per la pubblicazione a “Special Issue of Romanian Reports in Physics” on “*Bose-Einstein Condensation: Twenty years after*”, 2014.

- [18] L. Pezzé and A. Smerzi. *Phys. Rev. Lett* **102**, 100401 (2009).
- [19] G. Ferrini, A. Minguzzi, and F. W. Hekking. *Phys. Rev. A* **78**, 023606 (2008).
- [20] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, and B. Schumacher. *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).
- [21] O. Dutta, M. Gajda, P. Hauke, M. Lewenstein, D. S. Lühmann, B. A. Malomed, T. Sowiński, and arXiv:1406.0181 (2014) J. Zakrzewski.
- [22] T. Sowiński, O. Duttai, P. Hauke, L. Tagliacozzo, and M. Lewenstein. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 115301 (2012).
- [23] Y. P. Huang and M. G. Moore. *Phys. Rev. A* **73**, 023606 (2006).