

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF

Dissertação de Doutorado

Modelos Integráveis para Condensados de Bose-Einstein  
Homo-triatômicos e Hetero-triatômicos Moleculares

Aluno: Zeila Virginia Torres Santos

Orientador: Itzhak Roditi

Co-orientador: Angela Foerster

Novembro - 2009

Este trabalho é dedicado

*"El conocimiento si no se sabe aplicar es peor que la ignorancia." C.B.*

C. Bukowski.

W. Allen.

# Agradecimentos

★ A meu orientador Itzhak Roditi e a minha co-orientadora Angela Foerster pela amizade durante este período e por toda a ajuda que eles me brindaram.

★ A minha família pelo carinho e suporte económico nos últimos meses da minha estada em Rio.

★ Aos amigos e amigas, eles e elas sabem quem são.

★ Aos colaboradores: Arlei Tonel, Gilberto Santos, Eduardo Mattei e Carlos Kuhn

★ Aos professores e funcionários do CBPF e pela bolsa de estudos ao CNPq.

*Gracias totales!*

## Resumo

Nós construímos uma família de modelos homo e hetero-triatômico-moleculares para condensados de Bose-Einstein utilizando realizações especiais das álgebras  $su(2)$  e  $su(1/1)$  e também uma representação multibosônica de  $sl(2)$ . Mostramos que estes novos modelos generalizados são integráveis através do método algébrico do ansatz de Bethe e derivamos as correspondentes equações do ansatz de Bethe e suas respectivas energias.

Posteriormente, fazemos um análise clássica para determinar os pontos fixos do sistema e construímos o diagrama de parâmetros correspondente. Basicamente, três cenários diferentes são encontrados, dependendo da diferença hetero-atômica. Estes resultados se confirmam a nível quântico através de um estudo da dinâmica quântica e do gap do sistema.

## Abstract

We construct a family of tri-atomic models for heteronuclear and homonuclear molecular Bose-Einstein condensates using special realizations of the  $su(2)$  and  $su(1/1)$  algebras as well as a multibosonic representation of  $sl(2)$ . We show that these new generalized models are exactly solvable through the algebraic Bethe ansatz method and derive their corresponding Bethe ansatz equations and energies.

Using a classical analysis we determine the fixed points of the system and the corresponding phase diagram. Three different scenarios are found varying with the atomic population imbalance. These results are confirmed at a quantum level through an analysis of the quantum dynamics and the gap of the system.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Integrabilidade e solução exata</b>	<b>12</b>
2.1	Método do Espalhamento Inverso Quântico, <i>MEIQ</i> . . . . .	12
2.2	MEIQ ou ansatz de Bethe algébrico . . . . .	15
2.3	Exemplos de realizações da álgebra de Yang-Baxter . . . . .	18
2.3.1	Realizações triviais . . . . .	18
2.3.2	Realização dos operadores bosônicos. . . . .	18
2.3.3	Realização em termos de geradores da álgebra de Lie $su(2)$ . . . . .	19
2.3.4	Realização em termos de geradores da álgebra de Lie $su(1, 1)$ . . . . .	19
2.3.5	Realização da álgebra de Y-B com estrutura $\mathbb{Z}$ -graduada $Y[gl(2)]$ . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Modelos tri-atômicos de condensados de Bose-Einstein</b>	<b>22</b>
3.1	Modelo para dois átomos $a$ e outro $b$ , AABC . . . . .	26
3.2	Modelo para três átomos diferentes $a$ , $b$ e $c$ . . . . .	29
3.3	Realização para o modelo Homonuclear-molecular . . . . .	30
<b>4</b>	<b>Análise clássica e quântica para um modelo de CBE heteronuclear-molecular</b>	<b>35</b>
4.1	Análise Clássica . . . . .	36
4.1.1	Equações de movimento e pontos fixos . . . . .	37
4.1.2	Caso positivo: $0 < k \leq 1$ . . . . .	39
4.1.3	Caso Zero: $k = 0$ . . . . .	40
4.1.4	Caso Negativo: $-2 \leq k < 0$ . . . . .	41

4.1.5	Diagrama de parâmetros e curvas de nível . . . . .	42
4.2	Análise Quântica . . . . .	45
4.2.1	Dinâmica quântica . . . . .	46
4.3	Transições de Fase Quânticas, <i>TFQ</i> . . . . .	46
4.3.1	Gap de energia . . . . .	47
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>50</b>
<b>A</b>	<b>Modelo ABC</b>	<b>53</b>
A.1	Integrabilidade . . . . .	54
A.2	Análise Clássica e Quântica . . . . .	55
A.2.1	Pontos Fixos . . . . .	57
A.2.2	Diagrama de parâmetros . . . . .	60
A.2.3	Dinâmica Quântica . . . . .	62
	<b>Referência</b>	<b>63</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Recentemente, abriu-se um caminho seminal para estudar uma nova classe de sistemas quânticos através da produção de *vapores atômicos diluídos* [1, 2, 3] ultrafrios, utilizados na geração de condensados de Bose-Einstein (CBE). O CBE é uma fase da matéria composta de bósons numa temperatura próxima do zero absoluto, nesta temperatura se produz um colapso dos átomos até que a grande maioria dos átomos se encontra no estado fundamental. O primeiro condensado produzido foi com o vapor de átomos de Rubídio esfriados a 170 *nanoKelvin* ( $nK$ ). Na figura 1.1 estão ilustradas, de maneira simplificada, as etapas da condensação de Bose-Einstein, um processo no qual a natureza ondulatória das partículas participa de maneira fundamental.

Esse estudo de condensação foi teorizado nos anos 20, do século passado. Bose trabalhou na mecânica estatística dos fótons e em seguida Einstein [4, 5, 6] colocou essas investigações numa base mais formal. O conceito básico está associado ao gás de bósons. Os bósons são partículas de spin inteiro, i.e. partículas que seguem a estatística de Bose-Einstein e portanto vários bósons idênticos podem ocupar um mesmo nível de energia, ao contrário dos férmions que seguem o princípio de exclusão de Pauli. Alguns exemplo de bósons são:

1. glúons,
2. fótons,

3. átomos de He-4,
4. bóson de Higgs.

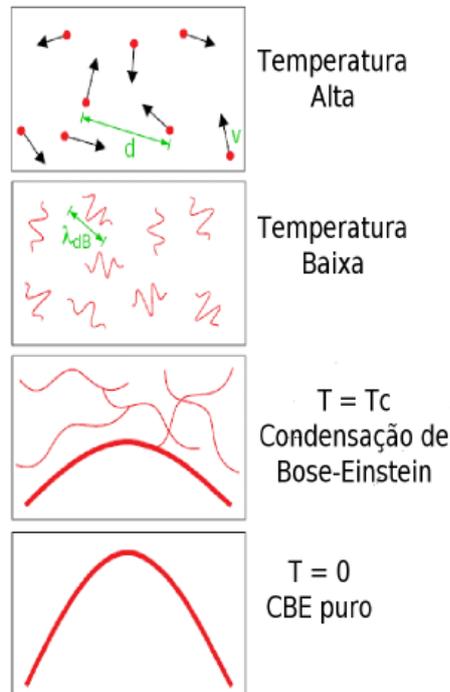


Figura 1.1: Etapas na condensação de Bose-Einstein. Do alto para baixo. 1. Para altas temperaturas, os átomos do vapor com uma interação desprezível entre eles podem ser considerados como um sistema de "bolas de bilhar". 2. Ao abaixarmos a temperatura, numa descrição quântica simplificada, os átomos podem ser vistos como pacotes de onda com comprimento de onda de Broglie  $\lambda_{dB}$ . A continuação desse processo de resfriamento nos conduz a uma temperatura de transição  $T_c$ . 3. Em  $T = T_c$  o comprimento de onda  $\lambda_{dB}$  vem a ser comparável com a distância entre os átomos e se dá a condensação de Bose-Einstein. 4. Para uma temperatura perto do zero a nuvem térmica desaparece e gera-se um CBE puro. Figura extraída do artigo do *Ketterle et. al.* [7, 8].

Einstein especulou que esfriando os sistemas bosônicos (átomos, moléculas) até uma temperatura muito baixa os faria condensar para o mais baixo estado quântico uma vez que sua estatística o permite, resultando em uma nova forma de matéria. Esta transição da matéria ocorre abaixo de uma certa temperatura crítica. Por exemplo, o *He - 4* se transforma em um superfluido a uma temperatura de *2,17 Kelvins*. O hélio superfluido tem muitas propriedades como a de escoar sem dissipar energia (viscosidade zero) e a existência de vórtices quantizados. As propriedades superfluidas do Hélio-4 cujos componentes são bósons guardam uma analogia com o CBE, entretanto, ao contrário dos CBE,

os superfluidos são sistemas fortemente interagentes. Os primeiros pesquisadores que obtiveram experimentalmente um CBE, com vapores, foram Cornell, Wieman e Ketterle (ver, [1, 2, 3]), através do resfriamento de átomos, utilizando além de lasers a evaporação com armadilhas magnéticas, essas técnicas isoladamente não eram suficientes para atingir a temperatura mais baixa em que se forma o condensado.

Os métodos de resfriamento dos materiais utilizados para obter os condensados foram melhorados com a execução consecutiva das diversas técnicas para obtenção de temperaturas mais baixas, podemos explicar alguns detalhes destes métodos.

O primeiro passo para o processo de diminuição da temperatura é o resfriamento por laser, que sózinho não atinge temperaturas suficientemente baixas. Ele se dá do seguinte modo, os fótons colidem sobre os átomos mas a luz não deve ser absorvida pelos átomos, caso contrário se aqueceriam, o que temos é que a luz espalhada ganha energia num processo de frenagem dos átomos. Basicamente, o que temos é um fluxo de partículas muito leves (os fótons) que recebem parte da energia cinética de partículas muito pesadas, os átomos. O laser esfria o sistema de  $1/10.000$  de grau acima do zero absoluto, entretanto essa temperatura não é suficiente para a condensação ocorrer.

Para baixar mais a temperatura é necessário usar um segundo procedimento, o esfriamento evaporativo com armadilhas magnéticas. Essencialmente, por meio de bobinas magnéticas se produzem campos magnéticos que capturam as partículas menos energéticas, aquelas mais energéticas (mais quentes) saem do sistema por evaporação. O custo desse tipo de resfriamento é que se perde uma fração das partículas envolvidas, porém é possível atingir temperaturas ultrafrias.

Após a obtenção dos primeiros CBE, vários experimentos de sucesso foram realizados. Entre eles, é interessante citar a interferência entre dois condensados expandindo-se livremente, que foi observada em [9]. Dois condensados separados por uma pequena distância

foram criados por resfriamento evaporativo de átomos de Sódio em um poço de potencial duplo construído a partir de forças magnéticas e ópticas, após o desligamento do potencial e uma mínima expansão se observam franjas de interferência envolvendo as ondas de matéria. Esses resultados comprovaram diretamente a existência de tunelamento e auto-aprisionamento em CBE.

Seguindo-se aos resultados com vapores de átomos, foram obtidas também moléculas ultra frias do tipo hetero-atômico, isto é, moléculas de dois átomos de espécies diferentes, para tal resultado foram usadas técnicas como fotoassociação em que se utilizaram misturas de  $^{39}K$  e  $^{85}Rb$  [10, 11] e técnicas de ressonância de Feshbach com misturas de  $^{87}Rb$  e  $^{41}K$  [12, 13]. O momento de dipolo permanente de moléculas hetero-atômicas têm atraído grande interesse pois essa propriedade viabiliza sua manipulação com o uso campos externos, permitindo um ótimo controle na interação entre as moléculas. Esses tipos de condensados também provocam interesse pela possibilidade de aplicação em diferentes áreas, que vão da espectroscopia fotoassociativa [14] até computação quântica [15].

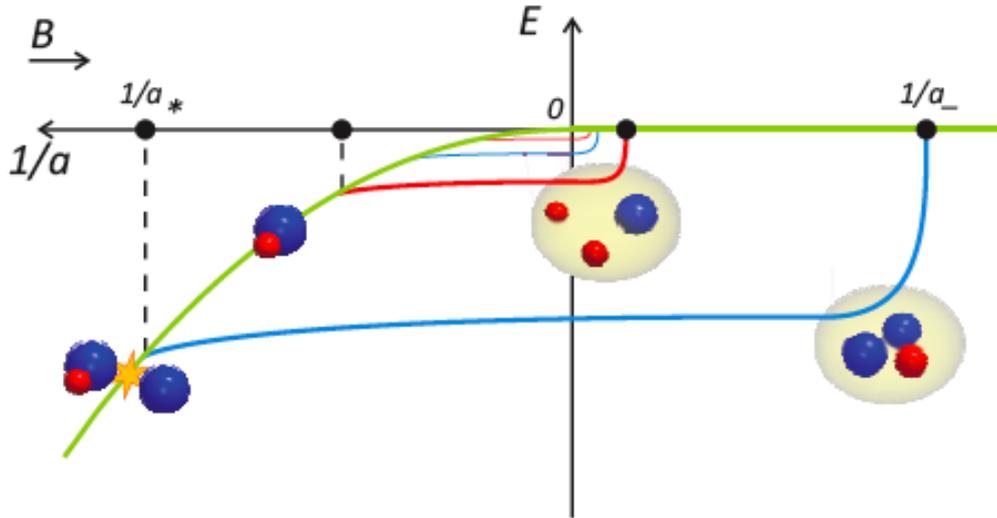


Figura 1.2: Diagrama de energia dos estados de Efimov para uma mistura de  $K$  e  $Rb$  usando ressonância Feshbach onde a longitude de espalhamento diverge  $1/a = 0$ . Os estados de Efimov aparecem: (i) no limiar átomo-dímero do sistema para comprimentos de espalhamento positivos  $a_+$ ; (ii) no limiar de três-átomos para comprimentos de espalhamento negativos  $a_-$ . Duas clases distintas de trimeros são possíveis,  $KKRb$  e  $KRbRb$ , mostrados respectivamente pelas linhas vermelhas e azuis. A linha verde mostra a dissociação do limiar dos estados Efimov. Figura do artigo [16]

A maioria dos condensados moleculares investigados até recentemente eram os do tipo diatômico, fossem esses homonucleares ou heteronucleares. Uma questão natural que se coloca é se condensados de moléculas maiores e mais complexas no regime ultrafrio podem ser obtidos. Há, nesse momento, algumas evidências experimentais que indicam a existência de tal possibilidade através dos chamados estados de *Efimov*, observados em gases de Césio ultra frios. Esses resultados físicos proporcionaram uma sustentação para a busca de *CBE's* com sistemas triatômicos moleculares [17, 18].<sup>1</sup>

As técnicas modernas envolvendo fenômenos de condensação de Bose-Einstein tem-se desenvolvido a um passo extremamente rápido e acreditamos que em breve assistiremos a uma grande quantidade de estudos envolvendo moléculas ultrafrias multiatômicas. Por exemplo, muito recentemente experiências efetuadas por J. Catani e colaboradores com

<sup>1</sup>É interessante notar que recentemente foram encontradas evidências de estados tipo Efimov de quatro corpos [19]

resultados apresentados na conferência internacional de CASTU <sup>2</sup> sugerem fortemente a formação de condensados hetero-triatômicos moleculares formados por compostos do tipo  $K K Rb$  e  $K Rb Rb$  [20].

Focalizando em nosso interesse teórico, sabe-se que os sistemas ultrafrios, atômicos e moleculares, se distinguem por apresentar grandes flutuações quânticas. Ou seja, não é apropriado o uso de métodos aproximados para abordar esses sistemas. Neste sentido, passa a ser de grande relevância o estudo de modelos que sejam exatamente solúveis e que descrevam condensados de Bose-Einstein atômicos e moleculares. Um campo de pesquisa que tem surgido com muito atividade [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27]. Nessa perspectiva, além de esperarmos que nossos estudos tragam avanços relevantes nesta área notamos que ainda há uma carência de modelos triatômicos integráveis. Um outro aspecto interessante que vale a pena frisar é que investigaremos o estado fundamental dos modelos, já que em se tratando de sistemas ultrafrios o estado fundamental pode trazer à tona reflexões de relevância. Além disso, como já mencionado, o CBE envolve flutuações quânticas que se sobrepõem às térmicas, de modo que podemos examinar, na temperatura absoluta nula, a presença de transições de fase quânticas.

Nesta tese introduzimos novos modelos integráveis que descrevem a interconversão de átomos e moléculas em CBE homo e hetero-triatômico moleculares. Isto será possível explorando diferentes realizações das álgebras  $su(2)$ ,  $su(1, 1)$  e representações multibosônicas de  $sl(2)$ . O primeiro modelo, que chamaremos de AABC, descreve a interconversão de átomos em moléculas ( e vice-versa) para o caso em que dois átomos são de uma espécie e um átomo é de outra espécie. O segundo modelo, que chamaremos de ABCD, descreve a interconversão átomos-moléculas para o caso em que os três átomos são de espécies distintas; finalmente, o terceiro modelo, que chamaremos de AAAB descreve a interconversão átomos-moléculas para o caso em que os três átomos são iguais.

---

<sup>2</sup>Castu Cold Atom Conference realizada em 20-24 de outubro de 2008 no Center for Advanced Study of Tsinghua University (CASTU 2008), China

Vamos fazer um estudo detalhado da integrabilidade destes modelos utilizando o método do espalhamento inverso quântico: as equações do ansatz de Bethe e suas energias serão derivadas. Para o modelo mais simples obtido, faremos um análise clássica e quântica, e exploraremos os diferentes cenários que podem ser obtidos, dependendo se a diferença hetero-atômica normalizada  $k$  é positiva, zero ou negativa. Além disso, veremos que existe uma conexão entre alguns pontos fixos da análise clássica e pontos de transição de fase quânticos.

O trabalho está organizado da seguinte forma: no Cap. 1 apresentamos uma breve introdução teórica e experimental dos CBE; no Cap. 2 discutimos a integrabilidade e a solução exata dos modelos, num contexto mais formal de matrizes de transferência; no Cap. 3 introduzimos três modelos para CBE homo e hetero-triatômico moleculares: As equações do ansatz de Bethe e as energias para os modelos serão obtidas; no Cap. 4 faremos uma análise clássica e uma análise quântica do modelo mais simples, o modelo AABC.

Os resultados contidos nos capítulos 3 e 4 são originais e foram publicadas em *Journal of Physics. A, Mathematical and Theoretical*, v. 41, 295003, 2008  
*Phys. Rev. A* 79, 013624 (2009).

# Capítulo 2

## Integrabilidade e solução exata

### 2.1 Método do Espalhamento Inverso Quântico, *MEIQ*

O método do espalhamento Inverso quântico foi desenvolvido com o intuito de investigar sistemas integráveis. Trata-se de uma poderosa ferramenta algébrica que contém a condição de integrabilidade dada pela equação de *Yang-Baxter* (*Y-B*) e fornece um método algébrico para determinar o espectro dos modelos através da álgebra das matrizes de monodromia determinada pela equação (*Y-B*). Com o mesmo método pode-se tratar diferentes modelos: Estatística Clássica em 2-dimensões, redes quânticas em 1-dimensão e Teorias Quânticas de Campos em  $(1 + 1)$ -dimensões. Além de unificar e sistematizar o tratamento de diferentes teorias, este método permite analisar a estrutura algébrica dos modelos [22].

A teoria dos sistemas quânticos exatamente solúveis, dentro desse quadro, repousa na existência de um operador inversível  $R(u) \in \text{End}(V \otimes V)$ , onde  $V$  denota um espaço vetorial e que satisfaz a equação de *Y-B* atuando sobre o produto tensorial  $V \otimes V \otimes V$

$$R_{12}(u - v)R_{13}(u)R_{23}(v) = R_{23}(v)R_{13}(u)R_{12}(u - v), \quad (2.1)$$

onde  $R_{ij}$  denota a matriz no  $\text{End}(V \otimes V \otimes V)$  atuando não-trivialmente sobre o  $i$ -ésimo e  $j$ -ésimo espaços ( $i, j = 1, 2, 3$ ) e como identidade no espaço que não corresponde aos índices  $i, j$ . A matriz  $R$  solução da eq.2.1 pode ser vista como as constantes de estrutura da

álgebra de Y-B, que é gerada pela chamada matriz de monodromia  $T(u)$  cujos elementos de matriz geram a álgebra

$$R_{12}(u-v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u-v), \quad (2.2)$$

os parâmetros  $u$  e  $v$  são chamados de parâmetros espectrais.

A equação de Y-B é necessariamente associativa e a interpretação de constantes de estrutura da matriz  $R$  fica mais evidente quando escrita em componentes:

$$\sum_{j_1, j_2} R_{j_1 j_2}^{k_1 k_2}(u-v) T(u)_{i_1}^{j_1} T(v)_{i_2}^{j_2} = \sum_{j_1, j_2} T(v)_{j_2}^{k_2} T(u)_{j_1}^{k_1} R_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(u-v). \quad (2.3)$$

tal que  $R_{ij}$  fornece as constantes de estrutura da álgebra. Num dos casos mais interessantes, o da matriz  $R$  invariante relativamente à álgebra  $su(2)$ , na forma matricial temos,

$$R(u) = \frac{1}{u+\eta}(u.I \otimes I + \eta P) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(u) & c(u) & 0 \\ 0 & c(u) & b(u) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

onde  $b(u) = u/(u+\eta)$  e  $c(u) = \eta/(u+\eta)$ .

Acima,  $u$  é o parâmetro espectral e  $\eta$  é um parâmetro arbitrário, a ser escolhido posteriormente e  $P$  é o operador de permutação que satisfaz  $P(x \otimes y) = y \otimes x \quad \forall x, y \in V$ . Nesse caso a álgebra de Y-B possui quatro elementos que podemos denotar por,

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Em seguida consideramos que existe uma representação, que denotamos  $\pi$ , da álgebra de Y-B e por conveniencia definimos o operador de Lax,  $L$  como,

$$L(u) = \pi(T(u)). \quad (2.5)$$

A matriz de transferência por sua vez pode ser definida como,

$$t(u) = \text{tr}\pi((T(u))) = \pi(A(u) + D(u)) \quad (2.6)$$

e decorre de (2.1) que a matriz de transferência comuta para diferentes valores do parâmetro espectral;

$$[t(u), t(v)] = 0 \quad \forall u, v \quad (2.7)$$

Existem duas consequências fundamentais que decorrem de (2.7). A primeira é que  $t(u)$  pode ser diagonalizada independentemente de  $u$ , ou seja os autovalores de  $t(u)$  não dependem do parâmetro espectral. Segundo que se expandimos  $t(u)$  numa série de potências,

$$t(u) = \sum_k c_k u^k,$$

os coeficientes (operadores)  $c_i$  satisfazem a seguinte relação de comutação

$$[c_k, c_j] = 0 \quad \forall k, j. \quad (2.8)$$

Portanto, para qualquer Hamiltoniano que possamos escrever como uma função apenas dos operadores  $c_k$ , cada um desses  $c_k$  corresponderá a um operador que representa uma constante de movimento pois ele necessariamente comuta com o Hamiltoniano. Dizemos que o modelo é integrável quando o número de quantidades conservadas é igual ao número de graus de liberdade do sistema.

Uma lei importante da álgebra de Y-B é a lei de adição, chamada de co-multiplicação, ou co-produto,  $\Delta$ , que mapeia a álgebra  $\mathbb{V}$  no produto tensorial  $\mathbb{V} \otimes \mathbb{V}$  e que preserva as

relações algébricas de  $\mathbb{V}$ , sua definição é:

$$\begin{aligned} \Delta & : \mathbb{V} \longrightarrow \mathbb{V} \otimes \mathbb{V} \\ T_i^j(u) & \mapsto \sum_k T_i^k(u) \otimes T_k^j(u). \end{aligned}$$

A importância do co-produto  $\Delta$  é que ele permite a construção de representações de produto tensorial. Em particular, dados dois operadores de Lax  $L^U, L^W$  atuando sobre  $V \otimes U$  e  $V \otimes W$  respectivamente, temos que  $L = L^U L^W$  é também um operador de Lax, vemos isso da relação:

$$\begin{aligned} R_{12}(u-v)L_1(u)L_2(v) & = R_{12}(u-v)L_1^U(u)L_1^W(u)L_2^U(v)L_2^W(v) \\ & = R_{12}(u-v)L_1^U(u)L_2^U(v)L_1^W(u)L_2^W(v) \\ & = L_2^U(v)L_1^U(u)R_{12}(u-v)L_1^W(u)L_2^W(v) \\ & = L_2^U(v)L_1^U(u)L_2^W(v)L_1^W(u)R_{12}(u-v) \\ & = L_2^U L_2^W L_1^U(u)L_1^W(u)R_{12}(u-v) \\ & = L_2(v)L_1(u)R_{12}(u-v). \end{aligned}$$

É importante observar que, se  $L(u)$  é um operador de Lax então  $L(u+\alpha)$  também é, para qualquer  $\alpha$ , uma vez que a matriz  $R$  depende somente da diferença entre os parâmetros espectrais.

## 2.2 MEIQ ou ansatz de Bethe algébrico

Uma vez que tenhamos uma realização da álgebra de Y-B podemos encontrar para esse modelo específico a sua solução. Nessa seção veremos o procedimento geral do MEIQ ou, como também é chamado, ansatz de Bethe algébrico (ABA) e pelo qual podemos encontrar os autovalores da matriz de transferência. Nas seções seguintes exibiremos diversos exemplos de realizações de R.

Para uma dada realização da álgebra de Y-B, a solução do problema de encontrar os autovalores da matriz de transferência (2.6), por meio do MEIQ, vem a partir da utilização de relações de comutação obtidas da álgebra de Y-B. Aquelas relevantes para nós e obtidas de (2.1) são:

$$[A(u), A(v)] = [D(u), D(v)] = 0, \quad (2.9)$$

$$[B(u), B(v)] = [C(u), C(v)] = 0, \quad (2.10)$$

$$A(u)C(v) = \frac{u-v+\eta}{u-v}C(v)A(u) - \frac{\eta}{u-v}C(u)A(v), \quad (2.11)$$

$$D(u)C(v) = \frac{u-v-\eta}{u-v}C(v)D(u) + \frac{\eta}{u-v}C(u)D(v). \quad (2.12)$$

Para podermos utilizar o MEIQ um passo crucial é encontrar um estado apropriado, para o modelo estudado, chamado de *pseudovácuo*, seja esse o vácuo de *Fock*:  $|0, 0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$  ou alguma combinação diferente [27]. Uma vez escolhido o *pseudovácuo*  $|0\rangle$  devemos ter o seguinte conjunto de igualdades:

$$A(u)|0\rangle = a(u)|\chi\rangle, \quad (2.13)$$

$$B(u)|0\rangle = 0, \quad (2.14)$$

$$C(u)|0\rangle \neq 0, \quad (2.15)$$

$$D(u)|0\rangle = d(u)|\chi\rangle. \quad (2.16)$$

Onde  $a(u)$  e  $d(u)$  são funções escalares, que podem ser determinadas através da ação de  $A(u)$  e  $D(u)$  sobre o pseudovácuo  $|0\rangle$ .

Em seguida, supondo que temos o pseudovácuo, escolhemos o estado de Bethe:

$$|\vec{v}\rangle \equiv |v_1, \dots, v_M\rangle = \prod_{i=1}^M C(v_i)|\chi\rangle; \quad (2.17)$$

Notemos que devido a relação de comutação,  $[C(u), C(v)] = 0$ , a ordem não é importante em (2.17).

Usando (2.11) e (2.12) e a ação dos operadores sobre o pseudovácuo (2.13) e (2.16),

podemos determinar a ação de  $t(u)$  sobre  $|\vec{v}\rangle$ :

$$\begin{aligned}
t(u)|\vec{v}\rangle &= (A(u) + D(u))|\vec{v}\rangle \\
&= \Lambda(u, \vec{v})|\vec{v}\rangle \\
&- \left( \sum_i^M \frac{\eta a(v_i)}{u - v_i} \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j + \eta}{v_i - v_j} \right) |v_1, \dots, v_{i-1}, u, v_{i+1}, \dots, v_M\rangle \\
&+ \left( \sum_i^M \frac{\eta d(v_i)}{u - v_i} \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j} \right) |v_1, \dots, v_{i-1}, u, v_{i+1}, \dots, v_M\rangle. \quad (2.18)
\end{aligned}$$

onde

$$\Lambda(u, \vec{v}) = a(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} + d(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i}. \quad (2.19)$$

De (2.18) se pode ver que  $|\vec{v}\rangle$  torna-se um autovetor da matriz de transferência com autovalor (2.19), desde que as *EAB* seguintes sejam satisfeitas:

$$\frac{a(v_i)}{d(v_i)} = \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad j = 1, \dots, M. \quad (2.20)$$

são satisfeitas.

Um último detalhe é que na derivação das *EAB*  $v_i \neq v_j$  para todo  $i, j$ .

## 2.3 Exemplos de realizações da álgebra de Yang-Baxter

Vamos aqui apresentar diversas possibilidades de realizações da álgebra de Y-B exibindo os operadores de Lax, associados a matriz  $R$  com invariância  $su(2)$ , algumas dessas realizações serão usadas nos capítulos seguintes na construção dos modelos multiatômicos por nós estudados.

### 2.3.1 Realizações triviais

O primeiro exemplo de realização vem diretamente da eq. 2.1 que repetimos aqui numa configuração mais geral:

$$R_{12}(u-v)R_{13}(u-w)R_{23}(v-w) = R_{23}(v-w)R_{13}(u-w)R_{12}(u-v), \quad (2.21)$$

Ora, se  $w = 0$ , podemos fazer a identificação de  $L(u) = R(u)$ , o que nos explicita a álgebra de Y-B. Esta realização é aquela utilizada para a construção do modelo de Heisenberg [28, 29].

Outra realização, chamada de realização de número- $c$  segue do fato que a matriz  $R$  satisfaz  $[R(u), g \otimes g] = 0$ , onde  $g$  é qualquer matriz  $2 \times 2$  cujos elementos de matriz não dependam do parâmetro espectral. Nesse caso temos simplesmente:

$$L(u) = g. \quad (2.22)$$

### 2.3.2 Realização dos operadores bosônicos.

Existe uma realização em termos dos operadores bosônicos  $a, a^+$ , estes operadores satisfazem as relações de comutação (*rr.cc.*) seguintes:

$$[a, a^+] = I \quad (2.23)$$

$$[a, a] = [a^+, a^+] = 0.$$

O operador de Lax  $L^a(u)$  é:

$$L^a(u) = \begin{pmatrix} (1 + \eta u)I + \eta^2 N & \eta a \\ \eta a^+ & I \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

sendo  $N$  o operador número, i.e.  $N = a^+ a$ .

### 2.3.3 Realização em termos de geradores da álgebra de Lie $su(2)$

O operador de Lax pode ser construído, em alguns casos, com elementos de matriz que são geradores de uma álgebra de Lie no caso  $su(2)$  temos:

$$L^s(u) = \frac{1}{u} \begin{pmatrix} u I + \eta S^z & \eta S^- \\ \eta S^+ & u I - \eta S^z \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

onde os geradores da álgebra,  $S^z$  e  $S^\pm$  satisfazem as seguintes *rr.cc.*:

$$\begin{aligned} [S^z, S^\pm] &= \pm S^\pm \\ [S^+, S^-] &= 2S^z \end{aligned} \quad (2.26)$$

### 2.3.4 Realização em termos de geradores da álgebra de Lie $su(1, 1)$

Para esta álgebra denotamos os geradores por  $K^z$  e  $K^\pm$ , o operador de Lax  $L^k(u)$  tem a forma:

$$L^K(u) = \frac{1}{u} \begin{pmatrix} u I + \eta K^z & \eta K^- \\ -\eta K^+ & u I - \eta K^z \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

e as *rr.cc.* de  $su(1, 1)$  são:

$$\begin{aligned} [K^z, K^\pm] &= \pm K^\pm \\ [K^+, K^-] &= -2K^z \end{aligned} \quad (2.28)$$

É interessante observar que entre as álgebras  $su(2)$  e  $su(1, 1)$ , existe um homomorfismo de álgebra de Lie:

$$\Upsilon : su(2) \longrightarrow su(1, 1),$$

o que fica claro com as seguintes escolhas:

$$\Upsilon(S^z) = K^z, \quad \Upsilon(S^+) = -K^+ \quad e \quad \Upsilon(S^-) = K^-,$$

para diferenciar entre estes dois operadores seja  $S$  e  $K$ , a transformação  $\Upsilon$  tem que ser não-unitária.

### 2.3.5 Realização da álgebra de Y-B com estrutura $\mathbb{Z}$ -graduada $Y[gl(2)]$

Esta álgebra possui uma estrutura  $\mathbb{Z}$ -graduada [22]. Nesse caso podemos ter a realização de  $Y[gl(2)]$  atuando sobre o espaço vetorial  $W$  o qual se denota por  $\pi : Y[gl(2)] \longrightarrow End W$ . Os geradores desta álgebra são  $X(u, j) = X(u, j)P_j$ , com as seguintes igualdades para os elementos da matriz de monodromia:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(u, j) &= \eta u^2 + u(1 - \eta^2(K^2 + N_c) - \eta w(K^z + N_c + jI)) + \eta K^z - \eta^2 K^z w(K^z + N_c + jI) + \\ &- \eta^3 N_c K^z + \eta^2 c K^+ \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\tilde{B}(u, j) = \eta(1 - \eta u - \eta w(K^z + N_c + jI) - \eta^2 N_c - \eta c(u - \eta K^z)) \quad (2.30)$$

$$\tilde{C}(u, j) = \eta c^\dagger(u + \eta K^z) - \eta K^+ \quad (2.31)$$

$$\tilde{D}(u, j) = u - \eta K^z + \eta^2 c^\dagger K^- \quad (2.32)$$

Nas relações acima os operadores  $K^z$ ,  $K^+$  e  $K^-$  satisfazem as relações de  $su(1, 1)$ (2.28).

O operador de Lax para esta álgebra é dado por:

$$L(u) = u G L^a(u - \eta^{-1} + w) L^K(u), \quad (2.33)$$

onde  $G = diag(-1, +1)$ .

No capítulo seguinte usaremos algumas dessas realizações que, como já observamos, podem ser compostas gerando outros operadores de Lax.

# Capítulo 3

## Modelos tri-atômicos de condensados de Bose-Einstein

Vamos introduzir neste capítulo três modelos que descrevem condensados de Bose-Einstein (CBE) formados por moléculas tri-atômicas. Os Hamiltonianos associados a esses modelos, dois para o caso hetero-atômico (os casos que chamamos de AABC e ABCD) e um para o caso homo-atômico (chamado AAAB), serão apresentados em seguida. Nas seções subsequentes explicitamos a construção algébrica de cada caso introduzindo as realizações da matriz de transferência  $\pi(T(u)) = L(u)$  que satisfazem a equação de Y-B e a partir do MEIQ obtemos as equações do ansatz de Bethe . Os modelos são:

### ★1. AABC

$$\begin{aligned} H = & U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{cc}N_c^2 + U_{ab}N_aN_b + U_{ac}N_aN_c + U_{bc}N_bN_c + \\ & + \mu_aN_a + \mu_bN_b + \mu_cN_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger baa) \end{aligned} \quad (3.1)$$

O Hamiltoniano (3.1), descreve a interconversão de uma molécula heterogenea tri-atômica chamada de  $c$ , com dois tipos de átomos um do tipo  $a$  e outro do tipo  $b$ . Aqui e nos outros modelos  $\{N_a, N_b, N_c, N_d\}$  denota o operador número (associado às diferentes espécies) agindo no espaço de Fock. O Hamiltoniano acima tem duas quantidades conservadas que

são independentes:

$$I = N_a + 2N_c, \quad J = N_a - 2N_b \quad (3.2)$$

onde  $J$  é a diferença ponderada entre o número de átomos do tipo  $a$  e  $b$ , o que chamaremos de desequilíbrio, o número total de partículas é  $N = N_a + N_b + 3N_c$  e é possível escrever-lo usando as quantidades independentes:  $N = \frac{3I-J}{2}$ , portanto  $N$  também é conservado. Os parâmetros  $U$  descrevem o espalhamento de onda- $S$ , os parâmetros  $\mu$  são os potenciais externos e  $\Omega$  é a amplitude para a interconversão entre átomos e moléculas.

A parte diagonal das amplitudes de espalhamento de onda- $S$  pode também ser reescrita como uma combinação das quantidades conservadas independentes, da seguinte forma:

$$\alpha I^2 + \beta J^2 + \gamma IJ.$$

Para chegar a expressão acima as constantes de acoplamento  $U$  foram redefinidas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} U_{aa} &= \alpha + \beta + \gamma, & U_{bb} &= 4\beta, & U_{cc} &= 4\alpha, \\ U_{ab} &= -4\beta - 2\gamma, & U_{ac} &= 4\alpha + 2\gamma, & U_{bc} &= -4\gamma. \end{aligned}$$

o que permite chegar a uma forma um pouco mais compacta para o Hamiltoniano (3.1):

$$H = \alpha I^2 + \beta J^2 + \gamma IJ + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a a). \quad (3.3)$$

Como veremos mais adiante esta forma do Hamiltoniano pode ser obtida a partir da matriz de transferência, para estabelecer a integrabilidade dentro do quadro do método do espalhamento inverso quântico.

★2. *ABCD*

$$\begin{aligned}
 H = & U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{cc}N_c^2 + U_{dd}N_d^2 + U_{ab}N_aN_b + U_{ac}N_aN_c + U_{ad}N_aN_d + U_{bc}N_bN_c + \\
 & + U_{bd}N_bN_d + U_{cd}N_cN_d + \mu_aN_a + \mu_bN_b + \mu_cN_c + \mu_dN_d + \Omega(a^\dagger b^\dagger c^\dagger d + d^\dagger cba), \quad (3.4)
 \end{aligned}$$

A eq.(3.4), descreve um Hamiltoniano para o modelo de uma molécula heterogênea tri-atômica chamada de  $d$ , com um átomo do tipo  $a$ , outro do tipo  $b$  e um do tipo  $c$ , a notação é análoga a usada no caso anterior. Para esse modelo é possível encontrar três quantidades conservadas e independentes:

$$I = N_a + N_d \quad J = N_b + N_d \quad P = N_c + N_d.$$

Estas quantidades físicas podem ser utilizadas para representar os diferentes desequilíbrios entre o número de átomos das diferentes espécies ( que denotaremos por  $J_{ab}$ ,  $J_{ac}$  e  $J_{bc}$ ), o número total de átomos pode também ser escrito em função destas quantidades, de modo que temos as seguintes quantidades derivadas conservadas:

$$\begin{aligned}
 J_{ab} &= N_a - N_b = I - J, \\
 J_{ac} &= N_a - N_c = I - P, \\
 J_{bc} &= N_b - N_c = J - P, \\
 N &= N_a + N_b + N_c + 3N_d = I + J + P.
 \end{aligned}$$

Usando a seguinte reparametrização:

$$\begin{aligned}
 U_{aa} = \alpha, \quad U_{bb} = \beta, \quad U_{cc} = \delta, \quad U_{dd} = \alpha + \beta + \delta + \gamma + \rho + \theta, \\
 U_{ab} = \gamma, \quad U_{ac} = \rho, \quad U_{bc} = \theta, \quad U_{bd} = 2\beta + \gamma + \theta, \quad U_{cd} = 2\delta + \rho + \theta,
 \end{aligned}$$

Podemos como antes reescrever a parte diagonal do espalhamento de onda- $S$ , i.e. a das

constantes de acoplamento  $U$ , em termos das quantidades conservadas,  $I, J, P$ :

$$\alpha I^2 + \beta J^2 + \delta P^2 + \gamma IJ + \rho IP + \theta JP,$$

o Hamiltoniano (3.4) pode então ser escrito de forma mais compacta como:

$$\begin{aligned} H = & \alpha I^2 + \beta J^2 + \delta P^2 + \gamma IJ + \rho IP + \theta JP + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \mu_d N_d + \\ & + \Omega(a^\dagger b^\dagger c^\dagger d + d^\dagger c b a) \end{aligned} \quad (3.5)$$

e também pode ser obtido como função da matriz de transferência.

### ★3. AAAB

$$H = U_{aa} N_a^2 + U_{bb} N_b^2 + U_{ab} N_a N_b + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \Omega(a^+ a^+ a^+ b \alpha_-(N_a) + \alpha_-(N_a) b^+ a a a), \quad (3.6)$$

Finalmente o Hamiltoniano (3.6) é aquele que descreve a interconversão de uma molécula homogênea tri-atômica chamada de  $b$  com três átomos iguais denotados por  $a$ . Onde  $\alpha_-(N_a)$  é uma função do operador  $N_a$ , isto controla a amplitude de interconversão  $\Omega$ , esta particularidade indica que a densidade de átomos  $N_a$  deve exercer algum tipo de influência na geração de um estado ligado obtido a partir de três átomos idênticos.

O Hamiltoniano (3.6) tem apenas uma quantidade conservada:

$$I = N_a + 3N_b, \quad (3.7)$$

que, como se vê, é o número total de partículas:  $N = N_a + 3N_b$ .

### 3.1 Modelo para dois átomos $a$ e outro $b$ , AABC

A realização apropriada para a matriz de monodromia, neste caso, consiste numa combinação de  $L$ 's com elementos das álgebras  $su(2)$  e  $su(1,1)$  e possui a seguinte forma:

$$\pi(T(u)) = L(u) = u^- G L^S(u^-) L^K(u^+), \quad (3.8)$$

onde  $u^\pm = u \pm \omega$ , sendo  $\omega$  um parâmetro arbitrário e  $G = \text{diag}(+1, -1)$ . A matriz de monodromia  $L(u)$  pode ser escrita em termos dos seguintes operadores de Lax:

$$L^S(u) = \frac{1}{u} \begin{pmatrix} u - \eta S^z & -\eta S^+ \\ -\eta S^- & u + \eta S^z \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

$$L^K(u) = \begin{pmatrix} u + \eta K^z & \eta K^- \\ -\eta K^+ & u - \eta K^z \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

onde utilizamos a álgebra de Lie  $su(2)$  cujos geradores  $S^z$  e  $S^\pm$  obedecem as relações de comutação (2.26) e utilizamos também a álgebra de Lie  $SU(1,1)$  com os geradores  $K^z$  e  $K^\pm$  que obedecem as relações de comutação (2.28). Por conveniência repetimos aqui essas relações:

$$[S^z, S^\pm] = \pm S^\pm, \quad [S^+, S^-] = 2S^z,$$

$$[K^z, K^\pm] = \pm K^\pm, \quad [K^+, K^-] = -2K^z.$$

Usando os operadores de criação e aniquilação é simples verificar as seguintes combinações definem os operadores das álgebras e satisfazem as relações acima:

$$S^+ = b^\dagger c, \quad S^- = c^\dagger b, \quad S^z = \frac{N_b - N_c}{2},$$

$$K^+ = \frac{(a^\dagger)^2}{2}, \quad K^- = \frac{(a)^2}{2}, \quad K^z = \frac{2N_a + 1}{4}.$$

Vejamos o procedimento do MEIQ para construir o Hamiltoniano (3.1). Explicitamente, a matriz de monodromia vem dada por:

$$L(u) = \begin{pmatrix} (u - \omega - \eta S^z)(u + \omega + \eta K^z) + \eta^2 S^+ K^+ & \eta K^-(u - \omega - \eta S^z) - \eta S^+(u + \omega - \eta K^z) \\ \eta S^-(u + \omega + \eta K^z) - \eta K^+(-u + \omega - \eta S^z) & (u + \omega - \eta K^z)(-u + \omega - \eta S^z) + \eta^2 S^- K^- \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

que satisfaz a relação de Y-B:

$$R_{12}(u - v)L_1(u)L_2(v) = L_2(v)L_1(u)R_{12}(u - v). \quad (3.12)$$

Desta forma podemos definir a matriz de transferência como:

$$t(u) = \text{tr} \pi(T(u)) = \pi(A(u) + D(u)). \quad (3.13)$$

Pode-se mostrar a partir da relação (2.1) que a matriz de transferência comuta para diferentes valores do parâmetro espectral, isto é:

$$[t(u), t(v)] = 0, \quad \forall u, v. \quad (3.14)$$

o que significa que o modelo é integrável.

Além disso, pode-se obter diretamente da matriz de transferência (3.13) o Hamiltoniano (3.1) através da seguinte relação:

$$H = t(0) + \frac{1}{2}\omega\eta + \alpha I^2 + \delta J^2 + \gamma IJ \quad (3.15)$$

onde  $I = N_a + 2N_c$  é uma constante obtida a partir das quantidades  $N$  e  $J$  expressa por  $I = (2N + J)/3$ , lembrando das seguintes identificações que foram feitas entre os parâmetros:

$$\begin{aligned}
\mu_a &= -\omega\eta, \\
\mu_c &= -\mu_b = \omega\eta, \\
\Omega &= \frac{\eta^2}{2}, \\
\alpha &= \frac{4U_{aa} - U_{bb} + U_{bc}}{4}, \\
\delta &= \frac{U_{bb}}{4}, \\
\gamma &= -\frac{U_{bc}}{4}.
\end{aligned}$$

Portanto, devido a existência da equação (3.15), se resolvermos o problema de autovalores da matriz de transferência (3.13) saberemos como diagonalizar o Hamiltoniano (3.1). Com isto o problema agora se reduz a usarmos o MEIQ para então, como vimos, chegar as EAB:

$$-\frac{(v_i - \omega - \eta s_z)(v_i + \omega + \eta k)}{(v_i - \omega + \eta s_z)(v_i + \omega - \eta k)} = \prod_{i \neq j}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad i, j = 1, \dots, M, \quad (3.16)$$

e conseqüentemente também obtém-se a energia,  $E$ , do Hamiltoniano (3.1):

$$\begin{aligned}
E &= (u_- - \eta m_z)(u_+ - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} + \\
&- (u^- + \eta m_z)(u^+ - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i} + \\
&- \frac{1}{2}u^- \eta + \alpha I^2 + \beta J^2 + \gamma IJ.
\end{aligned} \quad (3.17)$$

Acima, cada conjunto  $\{v_i, i = 1 \dots M\}$  são soluções das EAB e parametrizam um autovetor da matriz de transferência e, assim como, do Hamiltoniano (3.1) com energia dada pela equação (3.17).

## 3.2 Modelo para três átomos diferentes $a$ , $b$ e $c$

Neste modelo usamos uma outra combinação de operadores de criação e aniquilação para a realização dos geradores das álgebras  $su(2)$  e  $su(1, 1)$ , a saber:

$$\begin{aligned} S^+ &= c^\dagger d, & S^- &= d^\dagger c, & S^z &= \frac{N_c - N_d}{2}, \\ K^+ &= \frac{(a^\dagger b^\dagger)}{2}, & K^- &= \frac{(ab)}{2}, & K^z &= \frac{N_a + N_b + 1}{2}, \end{aligned}$$

com essa construção constata-se de maneira simples que o Hamiltoniano (3.4) está relacionado com a matriz de transferência da seguinte forma:

$$H = t(u) - u^- \eta + \alpha I^2 + \beta J^2 + \delta P^2 + \gamma IJ + \rho IP + \theta JP, \quad (3.18)$$

onde lembramos que fazemos a identificação:

$$\mu_a = u^- \eta, \quad \mu_c = -\mu_b = u^+ \eta, \quad \Omega = \frac{\eta^2}{2}. \quad (3.19)$$

Podemos usar novamente a metodologia da seção anterior e como pseudovácuo o produto de estados  $(|0\rangle = |k\rangle \otimes |\phi\rangle$  com  $|k\rangle$  sendo o menor peso do estado da álgebra  $su(1, 1)$  de peso  $k$ , ou seja  $K^z |k\rangle = k |k\rangle$  e  $\phi$  é o maior estado da álgebra  $su(2)$  com peso  $m_z$ ), para encontrar as EAB:

$$-\frac{(v_i - \omega - \eta m_z)(v_i + \omega + \eta k)}{(v_i - \omega + \eta m_z)(v_i + \omega - \eta k)} = \prod_{i \neq j}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad i, j = 1, \dots, M, \quad (3.20)$$

e as energias do Hamiltoniano (3.4) são dadas por:

$$\begin{aligned} E &= (u_- - \eta m_z)(u_+ - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} + \\ &- (u^- + \eta m_z)(u^+ - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i} + \\ &- u^- \eta + \alpha I^2 + \beta J^2 + \delta P^2 + \gamma IJ + \rho IP + \theta JP. \end{aligned} \quad (3.21)$$

### 3.3 Realização para o modelo Homonuclear-molecular

Como vimos na apresentação do Hamiltoniano do modelo homonuclear-molecular, o modelo AAAB, o termo de interconversão é ponderado por um acoplamento que depende da densidade de átomos. Essa característica está ligada, como veremos em seguida, a realização com apenas um modo da álgebra  $sl(2)$  que nos permite construir operadores de Lax para sistemas com átomos idênticos.

A realização da álgebra de Y-B que nos permitirá chegar ao Hamiltoniano da eq.(3.6) é dada por  $\pi(T(u)) = L(u)$ , na forma:

$$L(u) = \eta^{-1}GL^b(u - \delta - \eta^{-1})L^A(u + w), \quad (3.22)$$

com  $G = \text{diag}(-1, +1)$ . Onde os operadores de Lax  $L^b(u)$  e  $L^A(u)$ , assumem as seguintes realizações:

$$L^b(u) = \begin{pmatrix} u + \eta N^b & b \\ b^+ & \eta^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

em função dos operadores bosônicos  $b$  e  $b^+$  com  $N_b = b^+b$ , obedecendo as relações de comutação:

$$[b, b^+] = I, \quad [b, b] = [b^+, b^+] = 0. \quad (3.24)$$

e,

$$L^A(u) = \begin{pmatrix} u + \frac{\eta}{2}A_0 & \eta A_- \\ -\eta A_+ & u - \frac{\eta}{2}A_0 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

No segundo operador Lax os elementos de matriz são geradores da álgebra  $sl(2)$ . Cujas relações comutação são:

$$[A_-, A_+] = A_0 \quad [A_0, A_{\pm}] = \pm 2A_{\pm} \quad (3.26)$$

Esta álgebra possui uma realização que nos interessa em particular pois pode ser efetuada com um único modo de oscilador bosonico ( $[a, a^+] = I$ ) da seguinte maneira [30]:

$$A_0 = \alpha_0(N_a) \quad A_- = \alpha_-(N_a)a^l \quad A_+ = (a^+)^l\alpha_-(N_a). \quad (3.27)$$

As relações de comutação implicam que as funções  $\alpha_0(N_a)$  e  $\alpha_-(N_a)$  são reais e satisfazem as seguintes equações:

$$(N_a + 1)_l \alpha_-^2(N_a) - (N_a - l + 1)_l \alpha_-^2(N_a - l) = \alpha_0(N_a) \quad N_a - l \geq 0 \quad (3.28)$$

$$(N_a + 1)_l \alpha_-^2(N_a) = \alpha_0(N_a), \quad \alpha_-^2(N_a - l) = 0, \quad 0 \leq N_a < l \quad (3.29)$$

$$\alpha_0(N_a) = \alpha_0(N_a - l) + 2, \quad N_a - l \geq 0 \quad (3.30)$$

$$\alpha_0(N_a) = \alpha_0(N_a + l) - 2, \quad N_a \geq 0. \quad (3.31)$$

Analisamos esse conjunto de equações nos limites e obtemos:

$$\alpha_0(N_a) = 2 \left[ \frac{N_a}{l} \right] + \alpha_0(N_a \text{ mod } l), \quad (3.32)$$

$$\alpha_-(N_a) = \sqrt{\frac{1}{(N_a + 1)_l} \left( \left[ \frac{N_a}{l} \right] + \alpha_0(N_a \text{ mod } l) \right) \left( \left[ \frac{N_a}{l} \right] + 1 \right)}, \quad (3.33)$$

onde  $N_a = a^+a$  e  $l \in \mathbb{N}$ . Os termos com *mod l* acima derivam de um operador que chamamos de  $R$ , esse operador comuta com todas as potências de  $a$  e  $a^+$  sua definição é:

$$R := \frac{l-1}{2} + \sum_{m=1}^{l-1} \frac{\exp(-(2\pi i m/l)n)}{\exp(2\pi i m/l) - 1} \quad \text{para } l > 1$$

$$R := 0 \quad \text{para } l = 1.$$

e atua no elemento de base  $|n_a\rangle$  como  $R|n_a\rangle = n_a \text{ mod } l |n_a\rangle$ , a função  $\alpha_0(R)$  é uma função do espectro de  $R$ . Para  $n = r < l$ , temos:

$$\frac{1}{l}(N_a - R)|r\rangle = 0|r\rangle \quad (3.34)$$

A realização da álgebra  $sl(2)$  nos fornece os seguintes resultados para os valores dos

geradores:

$$\begin{aligned}
A_0 &= \frac{2}{l}(N_a - R) + \alpha_0(R) \\
A_- &= \sqrt{\frac{1}{(N_a + 1)_l} \left(\frac{1}{l}(N_a - R)\right) \left(\frac{1}{l}(N_a - R) + 1\right)} a^l \\
A_+ &= A_-^\dagger
\end{aligned} \tag{3.35}$$

daqui vemos que  $A_0 = \alpha_0(R)$  onde  $\alpha_0(R)|r\rangle = \alpha_0(r)|r\rangle$ .

Nosso modelo é um caso particular para  $l = 3$ . Para este caso podemos verificar que o Hamiltoniano (3.6) está relacionado com a matriz de transferência  $t(u) = \text{tr } \pi(T(u))$ . Para o operador  $L(u)$  da eq.3.22, pelos procedimentos usuais, encontra-se a matriz de transferência,

$$t(u) = (\eta^{-1}\delta^{-2} - N_b)(\omega + \frac{\eta}{2}A_0) + \eta^{-2}\omega - \frac{A_0}{2}\eta^{-1} + bA_+ + b^+A_- \tag{3.36}$$

Faremos as seguintes identificações:

$$\begin{aligned}
\eta &= 9U_a + U_b - 3U_{ab}, \\
6(\omega + \delta) &= (18U_a - 2U_b)N - \eta\rho + 18\mu_a - 6\mu_b, \\
36\eta^{-1}\omega\delta + 72\omega\eta^{-2} &= \eta\rho^2 + [(4U_b - 6U_{ab})N + 6(\mu_b - 3\mu_a + \omega)]\rho + \\
&\quad + 4U_bN^2 + 12(\mu_b + \omega)N,
\end{aligned} \tag{3.37}$$

com  $\rho \equiv \rho(R) = 3\alpha_0(R) - 2R$ .

Na eq. 3.36 com  $u = 0$ , para  $l = 3$ ,  $N_b = \frac{1}{6}(2N + \rho - 3A_0)$  e usando (3.35) temos a seguinte expressão para  $t(0)$  :

$$\begin{aligned}
t(0) &= (9U_a + U_b - 3U_{ab})\frac{A_0^2}{4} + \frac{1}{2}(\omega + \delta - \frac{\eta}{6}(2N + \rho))A_0 + \eta^{-1}\omega(\delta + 2\eta^{-1}) - \\
&\quad - \frac{\omega}{6}(2N + \rho) + ba^+a^+a^+\alpha_-(N_a) + \alpha_-(N_a)b^+aaa
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Usando as identificações em 3.37, verifica-se que:

$$H = t(0) \quad (3.39)$$

Seja  $|0\rangle_b$  o estado de vácuo de Fock e seja  $|r\rangle_A$  o estado de menor peso da álgebra  $sl(2)$  onde  $r = 0, 1, 2$  são os valores esperados de  $R$  para  $l = 3$  e  $N = nl + r$ , onde  $n \in N$ . No produto de estados  $|\phi\rangle = |r\rangle_A \otimes |0\rangle_b$  podemos aplicar o MEIQ para encontrar as EAB seguintes:

$$\frac{(1 - \eta v_i + \eta \delta)(v_i + w + \frac{\eta}{2}\alpha_0(r))}{v_i + w - \frac{\eta}{2}\alpha_0(r)} = \prod_{i \neq j}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta} \quad i, j = 1, \dots, M, \quad (3.40)$$

e a Energía do Hamiltoniano (3.6):

$$E = \eta^{-1}(\delta + \eta^{-1})(w + \frac{\eta}{2}\alpha_0(r)) \prod_{i=1}^M \frac{v_i - \eta}{v_i} + \eta^{-2}(w - \frac{\eta}{2}\alpha_0(r)) \prod_{i=1}^M \frac{v_i + \eta}{v_i} \quad (3.41)$$

Podemos dar a este modelo uns resultados a mais, como uma introdução a Dinâmica clássica

O Hamiltoniano (3.6) tem  $N_j$  e  $\Theta_j$  ( $j = a, b$ ), as variáveis quânticas, que satisfazem as relações canônicas:

$$[\Theta_a, \Theta_b] = [N_a, N_b] = 0, \quad [N_j, \Theta_k] = i\delta_{jk}I, \quad (3.42)$$

Transformamos os operadores  $a$  e  $b$  via a representação fase-número:

$$j = \exp(i\Theta_j)\sqrt{N_j}, \quad j^+ = \sqrt{N_j}\exp(-i\Theta_j),$$

logo definimos as variáveis:

$$z = \frac{(N_a - 3N_b)}{N},$$

$$\phi = \frac{N(3\Theta_a - \Theta_b)}{6}, \quad (3.43)$$

$$(3.44)$$

sendo  $N = N_a + 3N_b$  onde:

$$[z, \phi] = iI. \quad (3.45)$$

$z$  representa a diferença da fração de ocupação atômica e  $\phi$  a diferença de fase.

Usamos  $N$  e (3.44) para transformar os operadores numero da seguinte forma:

$$N_a = \frac{N(z+1)}{2} \quad (3.46)$$

$$N_b = \frac{N(1-z)}{6}. \quad (3.47)$$

O Hamiltoniano, usando as transformações, fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H = & \frac{U_{aa}}{4}N^2(1+z)^2 + \frac{U_{bb}}{36}N^2(1-z)^2 + \frac{U_{ab}}{12}N^2(1+z)(1-z) + \frac{\mu_a}{2}N(1+z) + \frac{\mu_b}{6}N(1-z) + \\ & + \Omega \alpha_-(N_a) \frac{N^2(1+z)\sqrt{1-z^2}}{2\sqrt{3}} \cos(6\phi/N). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Também podemos escrevê-la:

$$H = \alpha z^2 + \beta z + \gamma + (1+z)\sqrt{1-z^2} \cos(6\phi/N) \quad (3.49)$$

onde usamos estes novos parâmetros

$$\begin{aligned} \alpha &= \Delta \left( \frac{U_{aa}}{2} + \frac{U_{bb}}{18} - \frac{U_{ab}}{6} + \frac{\mu_a}{N} - \frac{\mu_b}{3N} \right) \\ \beta &= \Delta \left( U_{aa} - \frac{U_{bb}}{9} \right) \\ \gamma &= \Delta \left( \frac{U_{aa}}{2} + \frac{U_{bb}}{18} + \frac{U_{ab}}{6} + \frac{\mu_a}{N} + \frac{\mu_b}{3N} \right) \end{aligned} \quad (3.50)$$

e

$$\Delta = \frac{\sqrt{3}}{\alpha_- N_a \Omega}.$$

# Capítulo 4

## Análise clássica e quântica para um modelo de CBE heteronuclear-molecular

Vamos apresentar neste capítulo uma análise clássica e quântica do modelo de CBE heterotriatômico molecular do tipo AABC, introduzido no capítulo anterior. Escolhemos em particular este modelo entre os três apresentados, por se tratar do caso mais simples obtido, além do fato de que CBEs heterotriatômico moleculares formados por dois átomos de uma espécie e um átomo de outra espécie já foram obtidos experimentalmente[13].

O Hamiltoniano deste modelo é descrito pela equação:

$$\begin{aligned} H = & U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{cc}N_c^2 + U_{ab}N_aN_b + U_{ac}N_aN_c + U_{bc}N_bN_c + \\ & + \mu_aN_a + \mu_bN_b + \mu_cN_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger baa), \end{aligned} \quad (4.1)$$

que descreve um CBE heterotriatômico molecular. É um sistema constituído por duas espécies distintas de átomos sendo uma do tipo  $a$  e outra do tipo  $b$  que podem se combinar para formar uma molécula triatômica chamada de  $c$ . Os parâmetros  $U_{ij}$  são as amplitudes de espalhamento de onda- $S$ ,  $\mu_i$  ( $i = a, b, c$ ) são os potenciais externos,  $\Omega$  é a amplitude de interconversão de átomos e moléculas e  $N_i$  é o operador número de átomos e moléculas, isto é  $N_a = a^\dagger a$  (número de átomos do tipo  $a$ ),  $N_b = b^\dagger b$  (número de átomos do tipo  $b$ ) e

$N_c = c^\dagger c$  (número de moléculas). Este Hamiltoniano comuta com  $J = N_a - 2N_b$ , sendo  $J$  a diferença entre os modos atômicos e  $N = N_a + N_b + 3N_c$ .

Este Hamiltoniano atua no espaço de Fock, que é gerado pelos vetores (não normalizados):

$$|N_a, N_b, N_c\rangle = (a^\dagger)^{N_a} (b^\dagger)^{N_b} (c^\dagger)^{N_c} |0\rangle, \quad (4.2)$$

onde  $|0\rangle$  é o vácuo no espaço de Fock.

No que segue faremos inicialmente uma análise clássica e posteriormente uma análise quântica deste Hamiltoniano para conhecer as propriedades físicas do modelo, com particular ênfase no estado fundamental do sistema. As técnicas utilizadas são, basicamente, generalizações daquelas empregadas no estudo de um modelo de CBE hetero-diatômico-molecular (maiores detalhes podem ser obtidos no Apêndice A).

## 4.1 Análise Clássica

Sejam as variáveis quânticas  $N_j, \phi_j$  ( $j = a, b, c$ ) satisfazendo as relações canônicas

$$[\phi_j, \phi_k] = [N_j, N_k] = 0 \quad (4.3)$$

$$[N_j, \phi_k] = i\delta_{jk}I \quad (4.4)$$

Fazemos a mudança de variável dos operadores  $j$

$$j = e^{i\phi_j} \sqrt{N_j} \quad (4.5)$$

e após, a seguinte troca de variáveis

$$z = \frac{(N_a + N_b - 3N_c)}{N} \quad (4.6)$$

$$\phi = \frac{N(2\phi_a + \phi_b - \phi_c)}{6} \quad (4.7)$$

tal que  $z$  e  $\phi$  são variáveis canonicamente conjugadas. Com isso, temos o seguinte Hamiltoniano, válido no limite clássico, onde  $N$  é grande

$$H = \frac{4\Omega N^2}{36} \left( \lambda z^2 + 2(\alpha - \lambda)z + \beta + (z + c_+) \sqrt{(1-z)(z+c_-)} \cos\left(\frac{6\phi}{N}\right) \right), \quad (4.8)$$

sendo:

$$\begin{aligned} \lambda &= \Delta(4U_{aa} + U_{bb} + U_{cc} + 2U_{ab} - 2U_{ac} - U_{bc}), \\ \alpha &= \Delta(4U_{aa}(c_+ + 1) + U_{bb}(c_- + 1) + U_{ab}(c_+ + c_- + 2) - U_{ac}(c_+ + 1) \\ &\quad - U_{bc} \frac{(1 + c_-)}{2} + \frac{3}{N}(2\mu_a + \mu_b - \mu_c)), \\ \beta &= \Delta(4U_{aa}c_+^2 + U_{bb}c_-^2 + U_{cc} + 2U_{ab}c_+c_- + 2U_{ac}c_+ + U_{bc}c_- + \\ &\quad + \frac{6}{N}(2\mu_a c_+ + \mu_b c_- + \mu_c)), \end{aligned}$$

onde temos que levar em consideração que:

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{4\Omega} \\ c_+ &= 1 + k \\ c_- &= 1 - 2k \\ k &= \frac{J}{N}, \quad k \in [-2, 1] \end{aligned} \quad (4.9)$$

sendo  $k$  a diferença hetero-atômica normalizada.

#### 4.1.1 Equações de movimento e pontos fixos

Encontramos os pontos fixos do sistema a partir das equações de movimento:

$$\begin{aligned}
\frac{dz}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \phi} = \frac{-2}{3} \Omega N (c_+ + z) \sqrt{(c_- + z)(1 - z)} \sin\left(\frac{6\phi}{N}\right) \\
-\frac{d\phi}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{4\Omega N^2}{36} \left( 2\lambda z + 2(\alpha - \lambda) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{2(c_- + z)(1 - z) + (c_+ + z)(1 - z) - (c_+ + z)(c_- + z)}{2\sqrt{(c_- + z)(1 - z)}} \cos\left(\frac{6\phi}{N}\right) \right),
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Usando a condição

$$\frac{\partial H}{\partial \phi} = \frac{\partial H}{\partial z} = 0, \tag{4.11}$$

determinamos os pontos fixos no espaço de parâmetros ( $\lambda$  e  $\alpha$ ).

Vamos restringir a análise ao intervalo  $\phi \in [0, N\pi/3)$  por motivos de periodicidade das soluções. Para facilitar a notação, nos cálculos que seguem, vamos definir as funções  $f(z)$  e  $g(z)$

$$f(z) = \lambda z + \alpha - \lambda \tag{4.12}$$

$$g(z) = -\frac{2(c_- + z)(1 - z) + (c_+ + z)(1 - z) - (c_+ + z)(c_- + z)}{4\sqrt{(c_- + z)(1 - z)}} \tag{4.13}$$

O domínio de  $g(z)$  depende de  $k$ , a diferença hetero-atômica normalizada, que tem um papel importante na construção da função  $g(z)$ . Por exemplo:

★ para  $k \leq 0$ , temos que  $g(z)$  é divergente em  $z = 1$ ,

★ para  $k > 0$ , temos que  $g(z)$  é divergente em  $z = 2k - 1$  e  $z = 1$ .

Visto que  $k$  afeta o domínio e a forma da função  $g(z)$ , esta propriedade afetará o tipo de solução da equação que determina os pontos fixos (4.11), por isso devemos tratar os casos  $k < 0$ ,  $k = 0$  e  $k > 0$  separadamente.

### 4.1.2 Caso positivo: $0 < k \leq 1$

Neste caso o domínio de  $g(z)$  é  $z \in (2k - 1, 1)$  e  $g(z)$  diverge em  $z = 2k - 1$  e  $z = 1$ . Aqui temos:

$\star\phi = 0$  e  $z$  é solução de:

$$f(z) = g(z), \quad (4.14)$$

que pode admitir uma, duas ou três soluções.

$\star\phi = \frac{N\pi}{6}$  e  $z$  é solução de:

$$f(z) = -g(z), \quad (4.15)$$

que pode admitir uma, duas ou três soluções.

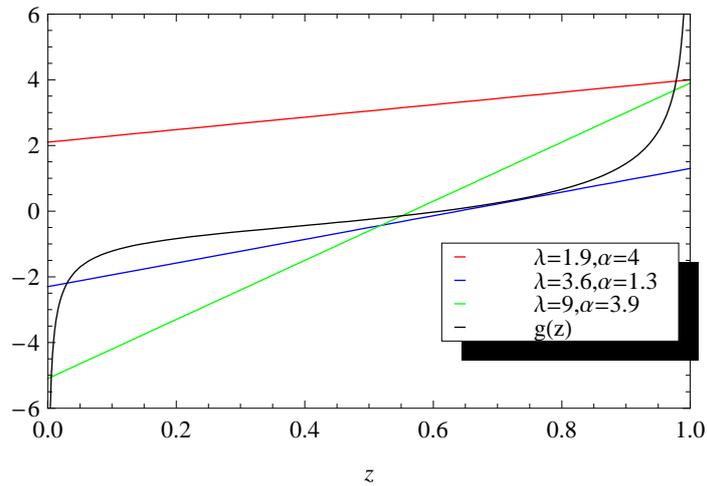


Figura 4.1: Solução gráfica da equação (4.14) para valores distintos de  $\lambda$  e  $\alpha$

### 4.1.3 Caso Zero: $k = 0$

O domínio de  $g(z)$  neste caso é  $z \in (-1, 1)$  e  $g(z)$  é divergente para  $z = 1$ , mas finita para  $z = -1$ . Isto nos dá:

★  $\phi = 0$   $z$  é solução de:

$$f(z) = g(z), \quad (4.16)$$

que admite nenhuma, uma ou duas soluções.

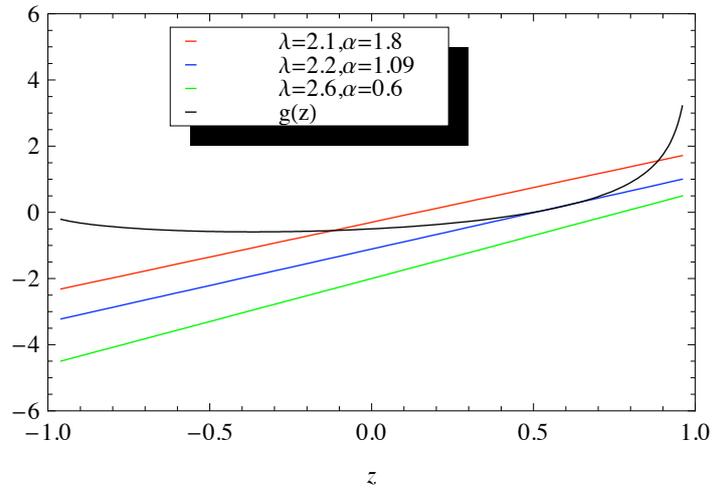


Figura 4.2: Comportamento da equação (4.16) para três valores diferentes de  $\lambda$  e  $\alpha$

★  $\phi = \frac{N\pi}{6}$  e  $z$  é solução de:

$$f(z) = -g(z), \quad (4.17)$$

que pode admitir nenhuma, uma ou duas soluções.

★  $z = -1$  que anula a primeira equação de (4.10) e reduz a segunda equação para a seguinte relação linear entre os parâmetros de acoplamento:

$$\lambda = \frac{\alpha}{2}, \quad (4.18)$$

que admite somente uma solução.

#### 4.1.4 Caso Negativo: $-2 \leq k < 0$

Neste caso o domínio de  $g(z)$  é  $z \in [-1, 1)$  e  $g(z)$  é divergente para  $z = 1$ , mas é finito para  $z = -1$ . Então podemos fazer a seguinte classificação:

★  $\phi = 0$  e  $z$  é solução de:

$$f(z) = g(z), \quad (4.19)$$

que admite nenhuma, uma ou duas soluções.

★  $\phi = \frac{N\pi}{6}$  e  $z$  é solução de:

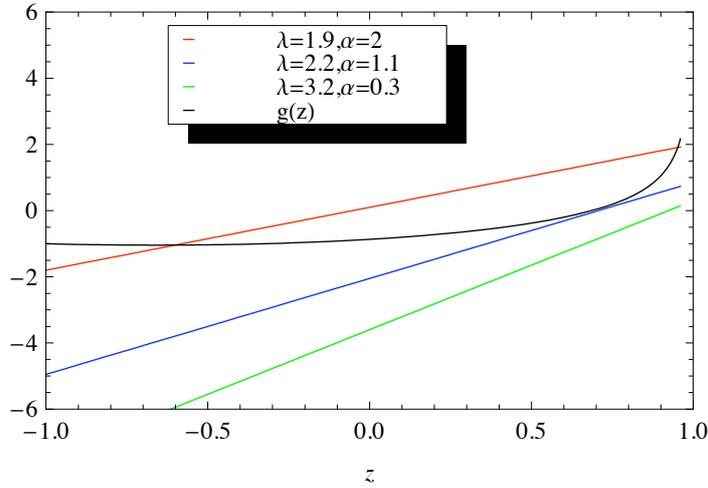


Figura 4.3: Comportamento da equação (4.19) para três valores diferentes de  $\lambda$  e  $\alpha$

$$f(z) = -g(z), \quad (4.20)$$

que pode admitir nenhuma, uma ou duas soluções.

★  $z = c_+$ , que anula a primeira equação de (4.10) e reduz a segunda para:

$$\lambda = \frac{\alpha}{k+2} + \frac{\sqrt{-3k(k+2)}}{2(k+2)} \cos\left(\frac{6\phi}{N}\right), \quad (4.21)$$

onde  $\phi$  é a solução de:

$$\cos\left(\frac{6\phi}{N}\right) = -\frac{2\sqrt{-3k(k+2)}}{3k} \left(\lambda - \frac{\alpha}{k+2}\right), \quad (4.22)$$

para a qual tem-se uma ou duas soluções, como ilustrado na Figura (4.4).

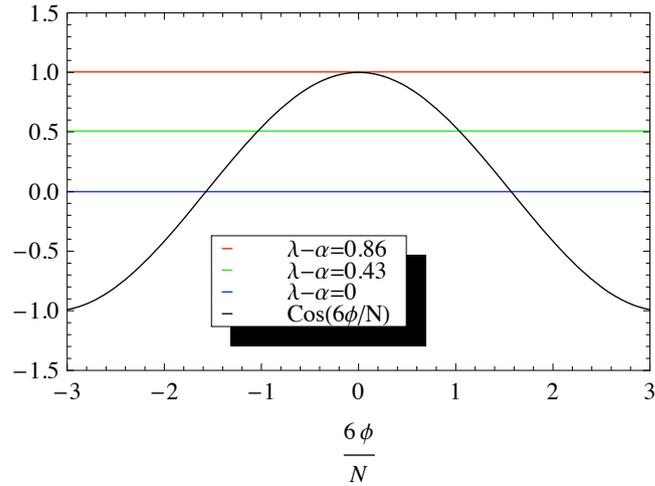


Figura 4.4: Comportamento da função (4.22) para três valores diferentes de  $\lambda$  e  $\alpha$ , para  $k = -1$

#### 4.1.5 Diagrama de parâmetros e curvas de nível

É possível organizar todos os tipos diferentes de soluções da equação (4.11) em um diagrama de parâmetros, dividindo o espaço de parâmetros em diferentes regiões, para cada caso de  $k$  estudado. Para o caso de  $k$  positivo, para construir este diagrama, nós observamos que a fronteiras entre as regiões ocorre quando  $f$  é a linha tangente à  $\pm g$ ; ou seja, para valores de  $\lambda$  e  $\alpha$  tais que:

$$\lambda = \pm \frac{dg}{dz} \Big|_{z_0},$$

$$f(z_0) = \pm g(z_0).$$

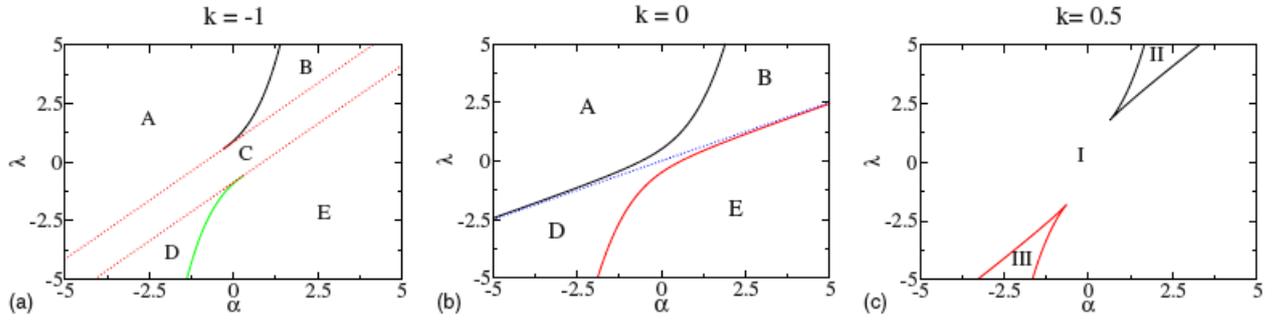


Figura 4.5: Diagrama de parâmetros identificando os tipos diferentes de soluções da equação (4.11) para  $k = -1, 0, 0.5$ .

Este procedimento determina as fronteiras no espaço de parâmetros, que são apresentados na fig. (4.5(c)) para  $k = 0.5$ .

Analogamente, é possível determinar as fronteiras no espaço de parâmetros para os outros dois casos. Das equações dadas por (4.18) e (4.21), nós observamos o aparecimento de novas fronteiras dadas pelas condições  $\lambda = (\alpha \mp g(-k-1))/(k+2)$  para  $k$  negativo e  $\lambda = \alpha/2$  para  $k = 0$ . As fronteiras no espaço de parâmetros são apresentadas na fig. (4.5(a)) e fig. (4.5(b)) para  $k = -1$  e  $k = 0$ , respectivamente. Observe que as fronteiras adicionais, que delimitam a região C, para  $k = -1$  são reduzidas a uma única fronteira para  $k = 0$ , a qual não está presente para  $k = 0.5$ . Assim, nós temos um panorama diferente para os diagramas de parâmetros, dependendo se a diferença hetero-atômica normalizada  $k$  é positiva, zero ou negativa. Podemos resumir o comportamento típico dos diagramas de parâmetros da forma seguinte: quando  $k$  é negativo, o diagrama é dividido em 5 regiões: na região A não existe solução para  $z$  quando  $\phi = 0$  e existe uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/6$ .

Na região B existem duas soluções para  $z$  quando  $\phi = 0$  e uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/6$ . Na região C existe uma solução para  $z$  quando  $\phi = 0$ , uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/6$  e duas soluções para  $\phi$  quando  $z = -k - 1$ . Na região D(E) existe uma solução para  $z$  quando  $\phi = 0$  e duas (nenhuma) solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/6$ . Para o caso de  $k = 0$ , a região C desaparece, restando apenas quatro regiões: A, B, D, E explicadas anteriormente. Quando  $k$  é positivo o diagrama é dividido em três regiões: na região I existe uma solução para  $z$  quando  $\phi = 0$  e uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/6$ .

Na região *II* existem três soluções para  $z$  quando  $\phi = 0$  e uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/6$ . Na região *III* existe uma solução para  $z$  quando  $\phi = 0$  e três soluções para  $z$  quando  $\phi = N\pi/6$ .

Para auxiliar na compreensão da dinâmica clássica é útil plotamos as curvas de nível do Hamiltoniano (4.8). As curvas de nível são curvas de energia constante do Hamiltoniano no espaço de fase. As figuras (4.6) são mostradas para os três casos  $k = -1$ ,  $k = 0$  e  $k = 0.5$ , ilustrando o comportamento nas diferentes regiões. Observamos que o padrão das curvas de nível é diferente para os casos de  $k$  negativo e zero se comparados ao caso de  $k$  positivo. É importante salientar que este estudo também nos permite identificar, de forma simples, se os pontos fixos obtidos estão associados a máximos, mínimos ou pontos de sela.

## 4.2 Análise Quântica

Neste capítulo faremos uma análise da dinâmica quântica e do gap do modelo. Em particular analisaremos o caso onde o Hamiltoniano não possui termos de espalhamento, ou seja, no limite onde  $U_{ij} = 0$ .

$$H = \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a a). \quad (4.23)$$

Apesar do Hamiltoniano simplificar consideravelmente, este ainda permanece suficientemente não trivial, permitindo captar as principais diferenças entre os casos de  $k$  positivo, zero e negativo. Este limite, chamado de limite sem espalhamento, corresponde a utilizar  $\lambda = 0$  na análise clássica. Observando os diagramas de parâmetros na figura (4.5), vemos que existem duas bifurcações para  $k$  negativo e três bifurcações para  $k = 0$ . Para  $k$  positivo, não existem bifurcações na linha  $\lambda = 0$ .

Especificamente, para  $k = -1$  os pontos de bifurcação ocorrem em  $(\alpha, \lambda) = (-0.86, 0)$  e  $(\alpha, \lambda) = (0.86, 0)$ , que correspondem a uma bifurcação associada a um máximo e a um mínimo, respectivamente.

Quando  $k = 0$ , as bifurcações estão em  $(\alpha, \lambda) = (-0.5, 0)$ ,  $(0, 0)$  e  $(0.5, 0)$ . O ponto  $(\alpha, \lambda) = (-0.5, 0)$  corresponde a uma bifurcação de um máximo, o ponto  $(\alpha, \lambda) = (0, 0)$  corresponde a uma bifurcação de ponto de sela e finalmente o ponto  $(\alpha, \lambda) = (0.5, 0)$  corresponde a uma bifurcação de um mínimo. De todos estes pontos estaremos interessados em analisar com atenção o ponto  $(\alpha, \lambda) = (0.86, 0)$  para  $k = -1$  e o ponto  $(\alpha, \lambda) = (0.5, 0)$  para  $k = 0$ , porque nestes casos as bifurcações dos pontos fixos no espaço de fase são associadas ao estado fundamental do sistema quântico.

### 4.2.1 Dinâmica quântica

A evolução temporal de um estado é dada por  $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\phi\rangle$  onde  $U(t)$  é o operador de evolução temporal definido assim  $U(t) = \sum_{m=0}^M |m\rangle\langle m| \exp^{-iE_m t}$ , onde  $|m\rangle$  é um autoestado com energia  $E_m$  e  $|\phi\rangle$  representa o estado inicial, onde usamos a notação  $|\phi\rangle = |N_a, N_b, N_c\rangle$ .

Usando a diagonalização exata do Hamiltoniano, calculamos o valor esperado da diferença entre o número de átomos e o número de moléculas, dado por:

$$\langle z(t) \rangle = \frac{1}{N} \langle \Psi(t) | N_a + N_b - 3N_c | \Psi(t) \rangle \quad (4.24)$$

Nesta análise fixamos  $N$  e  $J$ .

Resultados para a dinâmica quântica do valor esperado para  $z$  são mostrados na (fig.4.7), para os casos de  $k = -1, 0$  e  $k = 0.5$ , respectivamente. As condições iniciais utilizadas estão explicitadas na figura. Nós fixamos o parâmetro  $\Omega = 1$  e usamos  $\mu_a$  como o parâmetro de acoplamento variável.

Em termos das variáveis clássicas, isto corresponde a variar o parâmetro  $\alpha$  no Hamiltoniano clássico (4.8). No caso  $k = -1$ , (fig.4.7(a)), vemos que para  $\alpha < 0.86$  existem oscilações irregulares em  $z$ , análogas ao que ocorre para  $\alpha < 0.5$  para  $k = 0$ , (fig.4.7(b)). Quando aumentamos  $\alpha$  em direção ao valor de transição  $\alpha = 0.86$ , para  $k = -1$  e  $\alpha = 0.5$  para  $k = 0$ , ocorre uma mudança para oscilações localizadas, muito pronunciadas nos casos (a) e (b). Para o caso  $k = 0.5$  (fig.4.7(c)), o cenário é totalmente diferente, exibindo um comportamento do tipo colapso e ressurgimento, sem mudanças abruptas na amplitude de  $z$ .

## 4.3 Transições de Fase Quânticas, *TFQ*

As transições de fase quânticas, diferentemente das transições de fase clássicas, ocorrem a temperatura de zero absoluto e se originam devido a flutuações quânticas do sistema. Elas podem ser identificadas pela variação de algum parâmetro de controle, como por exemplo o campo magnético ou o potencial químico, entre outros. Um exemplo típico desse tipo

de transição seria a que ocorre nos cupratos semicondutores que podem ser levados de uma fase isolante a uma fase supercondutora pela dopagem de portadores de carga.

Uma forma simples de se identificar uma TFQ seria através do gap de energia, i.e. a diferença entre o valor de energia do primeiro estado excitado e do estado fundamental do sistema. No que segue, estudamos o gap para o Hamiltoniano AABC, com o objetivo de identificar o ponto onde ocorre a TFQ. Existe, na literatura, hipóteses de que pontos de TFQ correspondem a pontos fixos na análise clássica do modelo e queremos testar isto para o presente Hamiltoniano.

### 4.3.1 Gap de energia

O gap de energia é definido como a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental do Hamiltoniano, ou seja:

$$\Delta E = E^1 - E^0. \quad (4.25)$$

O ponto onde o gap é mínimo é o ponto de TFQ, ou, rigorosamente, pré transição de fase quântica que, como veremos, coincide com um ponto fixo da análise clássica (4.5). Através da diagonalização do Hamiltoniano (4.23) é possível determinar o gap do sistema em função da variável  $\alpha$ .

O ponto crítico do sistema se aproxima de  $\alpha \approx 0.86$  para  $k = -1$  e também se aproxima para  $\alpha \approx 0.5$  para  $k = 0$ , conforme a figura (4.8). Verificamos também que quando  $N$  aumenta, o mínimo do gap se aproxima de zero e neste ponto  $\alpha$  é o ponto crítico, indicando uma TFQ.

Concluindo, os pontos de TFQ obtido na análise do gap para os casos de  $k$  negativo e zero correspondem a pontos fixos de bifurcação na análise clássica do sistema. Além disso, estes pontos apresentam mudanças abruptas na dinâmica quântica do sistema.

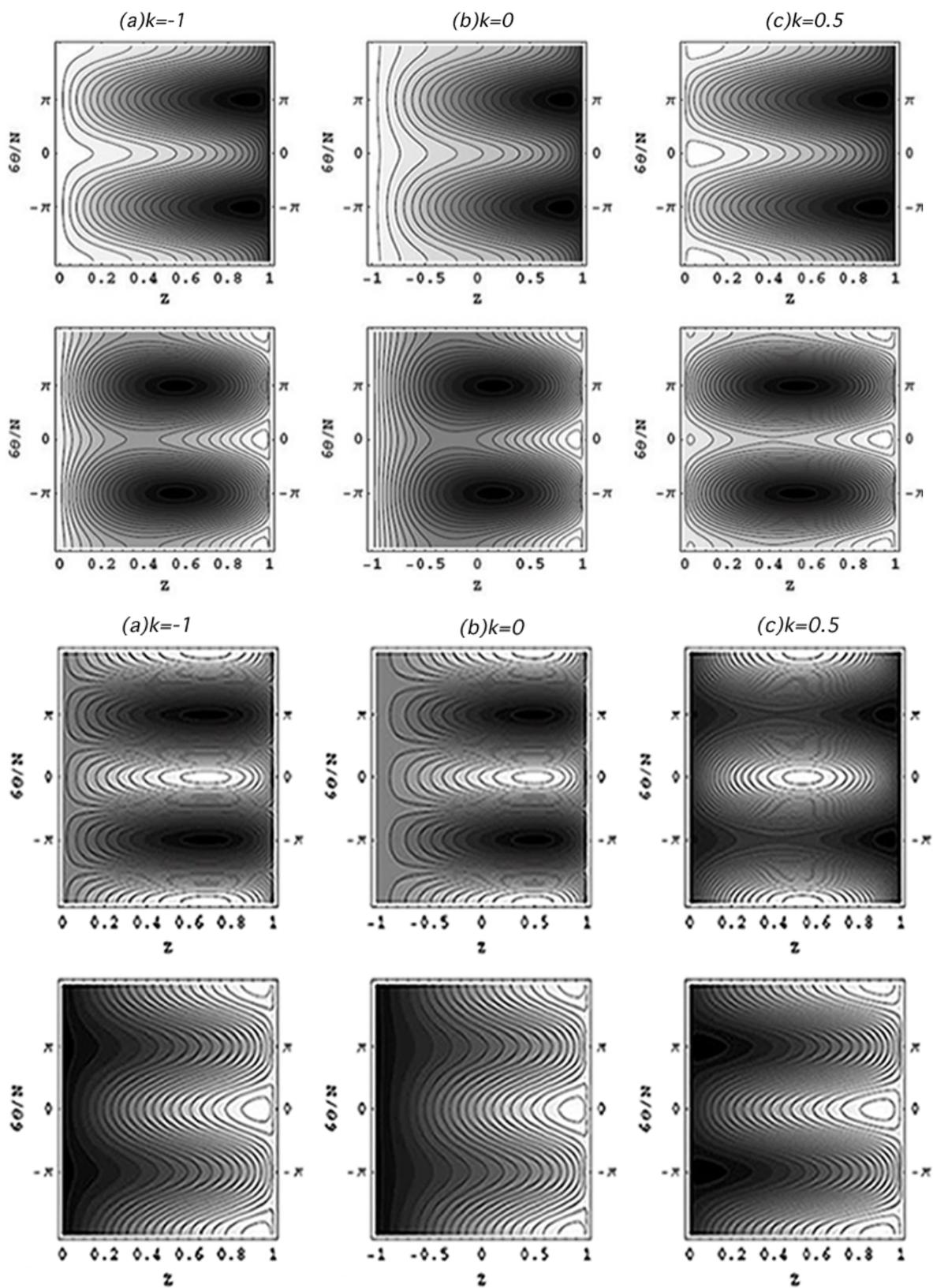


Figura 4.6: Curvas de nível para o Hamiltoniano (4.1). Aqui temos usado para: (a)  $k = -1$  à esquerda  $(\lambda, \alpha) = (0, -1.0), (5, 2.5), (0, 0)$  e  $(0, 1.5)$ ; (b)  $k = 0$  no meio  $(\lambda, \alpha) = (0, -1), (2.5, 2.5), (0, 0)$  e  $(0, 1.5)$ ; (c)  $k = 0.5$  à direita  $(\lambda, \alpha) = (0, -1.5), (5, 2.5), (-5, -2.5)$ , e  $(0, 1.5)$

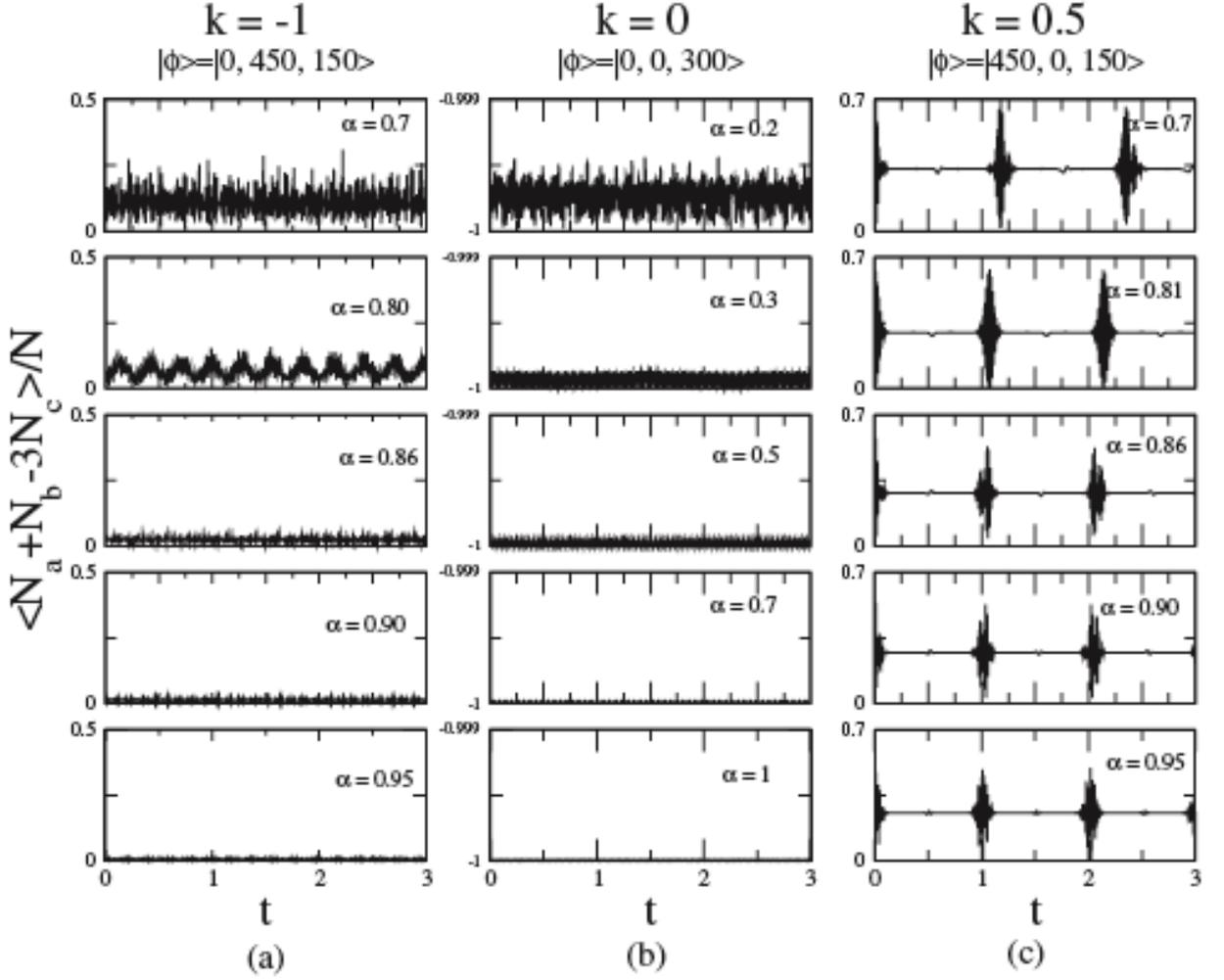


Figura 4.7: Evolução temporal do valor esperado de  $z$  para o Hamiltoniano (4.23) com  $N = 900$ , para (a)  $k = -1$  o estado inicial  $|0, 450, 150\rangle$ ; para (b)  $k = 0$  e estado inicial  $|0, 0, 300\rangle$ ; para (c)  $k = 0.5$  com estado inicial  $|450, 0, 150\rangle$ .

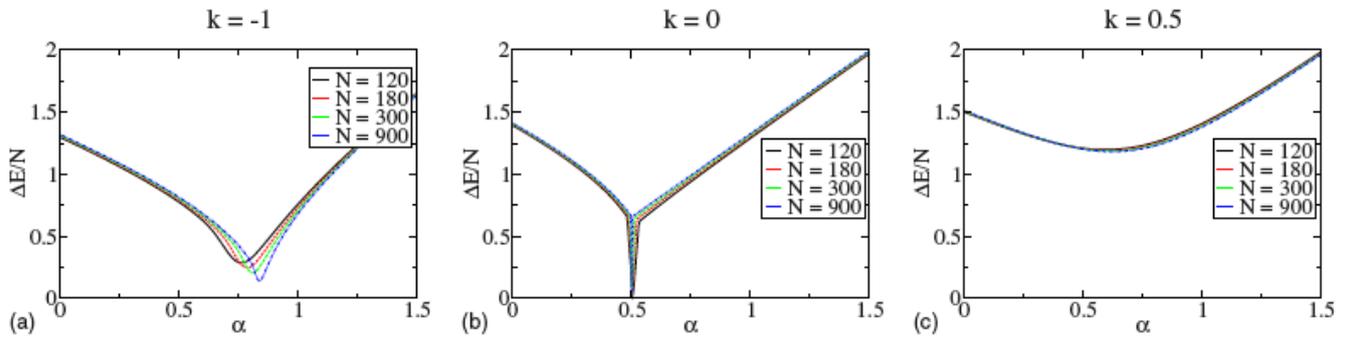


Figura 4.8: Gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental em função de  $\alpha$  para (a)  $k = -1$ ; (b)  $k = 0$ ; (c)  $k = 0.5$ , para diferentes valores de  $N$ ; usamos  $\Omega = 1$

# Capítulo 5

## Conclusões

Neste trabalho introduzimos novos modelos integráveis que descrevem a interconversão de átomos e moléculas em CBE homo e hetero-triatômico moleculares. Isto foi possível explorando diferentes realizações das álgebras  $su(2)$ ,  $su(1, 1)$  e representações multibosônicas de  $sl(2)$ . Estes modelos foram resolvidos exatamente utilizando o método algébrico do ansatz de Bethe: as equações do ansatz de Bethe e suas energias foram derivadas.

Para o modelo mais simples obtido, o CBE hetero-triatômico molecular formado por dois átomos de uma espécie e um átomo de outra espécie (modelo AABC), fizemos um análise clássica e quântica, e encontramos que diferentes cenários podem ser obtidos, dependendo se diferença hetero-atômica normalizada  $k$ , característica de modelos heteronucleares, é negativa, zero ou positiva.

No Cap. 1 apresentamos um breve histórico teórico e experimental dos condensados: a obtenção destes e os métodos utilizados).

No Cap. 2 discutimos a integrabilidade e a solução exata dos modelos, num contexto mais formal de matrizes de transferência. Apresentamos também as realizações das álgebras  $su(2)$ ,  $su(1, 1)$  e  $Y[gl(2)]$  usadas nas estruturas algébricas dos modelos.

No Cap. 3 introduzimos três modelos para CBE homo e hetero-triatômico moleculares: o modelo AABC que descreve a interconversão de átomos em moléculas ( e vice-versa)

para o caso em que dois átomos são de uma espécie e um átomo é de outra espécie; o modelo ABCD que descreve a interconversão átomos-moléculas para o caso em que os três átomos são de espécies distintas e o modelo homo-triatômico molecular, em que os três átomos são da mesma espécie. As equações do ansatz de Bethe e as energias para os modelos foram obtidas.

No Cap. 4 fizemos uma análise clássica e uma análise quântica do modelo mais simples, o modelo AABC. Encontramos que o espaço de parâmetros pode ser dividido em diferentes regiões, dependendo se  $k$  é negativo, zero ou positivo. A existência de diferentes regiões origina dinâmicas qualitativamente diferentes, especialmente para os casos de  $k$  negativo e  $k = 0$  se comparados à  $k$  positivo. Mudanças abruptas nas dinâmicas quânticas para os casos de  $k$  negativo e  $k = 0$  são observadas. Fizemos também uma análise do gap de energia, que permitiu identificar os pontos de transição de fase quânticas do modelo.

Em relação a possíveis trabalhos futuros na área, existem várias possibilidades:

- (i) Uma seria explorar a existência de modelos integráveis que descrevam a interconversão de átomos em moléculas (e vice-versa) em estados quadri-atômicos de Efimov, estudados recentemente em [19].
- (ii) Outra possibilidade seria investigar a existência de formas alternativas das equações do ansatz de Bethe, de forma similar ao que ocorre com o modelo integrável que descreve o tunelamento e auto-aprisionamento em CBE atômicos, [32].
- (iii) Finalmente, também seria muito interessante resolver as equações do ansatz de Bethe numericamente e verificar se é possível identificar as TFQ através de mudanças abruptas no comportamento das soluções destas equações.

## Apêndice

# Apêndice A

## Modelo ABC

Neste apêndice vamos revisar brevemente algumas das principais técnicas existentes para fazer uma análise clássica e quântica de modelos de CBE integráveis. Para isto, vamos utilizar o modelo de CBE hetero-diatômico molecular conhecido como modelo ABC descrito abaixo. Este estudo se baseia na referencia [31] Este modelo descreve duas espécies diferentes de átomos  $a$  e  $b$  que se combinam para produzir uma molécula  $c$ . O Hamiltoniano é:

$$\begin{aligned} H = & U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{cc}N_c^2 + U_{ab}N_aN_b + U_{ac}N_aN_c + U_{bc}N_bN_c + \mu_aN_a + \mu_bN_b + \mu_cN_c + \\ & + \Omega(a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger ba), \end{aligned} \tag{A.1}$$

onde  $a^\dagger$ ,  $a$ ,  $b^\dagger$  e  $b$  são os operadores de criação e destruição de átomos, e  $c^\dagger$  e  $c$  são os operadores de criação e destruição de moléculas,  $\Omega$  é a amplitude de conversão de átomos e moléculas, os parâmetros  $U_{ij}$  são as amplitudes de espalhamento de onda- $S$  das interações átomo-átomo, átomo-molécula e molécula-molécula,  $\mu_i$  ( $i = a, b, c$ ) são os potenciais externos e  $N_i$  é o operador número.

## A.1 Integrabilidade

Para este modelo adotamos a realização da álgebra  $su(1, 1)$  especificada na seção (2.2.4) junto com (2.28) dada por:

$$K^+ = a^+b^+, \quad K^- = a b \quad e \quad K^z = \frac{N_a + N_b + 1}{2} \quad (\text{A.2})$$

O Hamiltoniano (A.14) é integrável como já foi visto na seção 2.1. Logo é fácil verificar que a matriz  $R$  (3.35) satisfaz a equação de Y-B (2.2).

Usando o operador de Lax (2.33) da álgebra  $Y[gl(2)]$ , podemos construir o Hamiltoniano em função da matriz de transferência e fica da seguinte forma:

$$H = \sigma + \delta(N/2 + 1/2) + \lambda(N/2 + 1/2)^2 + \rho I + \nu I^2 + \xi I(N/2 + 1/2) + \eta^{-1} \omega \tilde{t}(0, 0) \quad (\text{A.3})$$

temos que:

$$\frac{d\tilde{t}(0, 0)}{du} = 2 - \eta(\eta + \alpha)(N/2 + 1/2) - \eta\gamma I - \eta\beta \quad (\text{A.4})$$

e as constantes de acoplamento do novo Hamiltoniano estão relacionadas com as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}
\eta &= \frac{(U_{aa} + U_{bb} + U_{cc} + U_{ab} - U_{ac} - U_{bc})}{\omega} \\
\alpha &= \frac{U_{cc} - U_{aa} - U_{bb} - U_{ab}}{\omega} \\
\beta &= \frac{(2U_{aa} + 2U_{bb} + 2U_{ab} - U_{ac} - U_{bc} + 2\mu_c - 2\mu_a - 2\mu_b)}{2\omega} \\
\gamma &= \frac{2U_{bb} - 2U_{aa} + U_{ac} - U_{bc}}{2\omega} \\
\sigma &= \frac{U_{aa} + U_{bb} + U_{ab} - 2\mu_a - 2\mu_b}{4} \\
\delta &= \frac{2\mu_c - U_{ac} - U_{bc}}{2} \\
\lambda &= U_{cc} \\
\rho &= \frac{U_{bb} - U_{aa} + \mu_a - \mu_b}{2} \\
\nu &= \frac{U_{aa} + U_{bb} - U_{ab}}{4} \\
\xi &= \frac{U_{ac} - U_{bc}}{2}.
\end{aligned}$$

Logo usando as equações (2.29, 2.32) aplicadas ao pseudovácuo encontramos os autovalores, sendo:

$$a(u, M) = (u + \eta\kappa)(1 - \eta u - \eta(\alpha(M + \kappa) + \gamma(2\kappa - 1) + \beta)), \quad e \quad d(u, M) = (u - \eta\kappa). \quad (\text{A.5})$$

Seguindo o método algébrico usa-se a equação (2.19) para a energia do modelo:

$$\begin{aligned}
E(\vec{v}) &= \sigma + \delta(M + \kappa) + \lambda(M + \kappa)^2 + \rho(2\kappa - 1) + \nu(2\kappa - 1)^2 + \xi(2\kappa - 1)(M + \kappa) + \\
&+ \eta^{-1}\kappa\omega \left[ (1 - \eta(\alpha(M + \kappa) + \gamma(2\kappa - 1) + \beta)) \prod_{i=1}^M \frac{\nu_i - \eta}{\nu_i} - \prod_{i=1}^M \frac{\nu_i + \eta}{\nu_i} \right] \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

## A.2 Análise Clássica e Quântica

As variáveis quânticas  $N_j$  e  $\Theta_j$  ( $j = a, b, c$ ) satisfazem as seguintes relações canônicas:

$$[\Theta_j, \Theta_k] = [N_j, N_k] = 0 \quad (\text{A.7})$$

$$[N_j, \Theta_k] = i\delta_{jk}I \quad (\text{A.8})$$

Fazemos primeiro a mudança de variáveis para a representação do numero de fase:

$$j = e^{i\phi_j} \sqrt{N_j} \quad (\text{A.9})$$

$$j^\dagger = \sqrt{N_j} e^{-i\phi_j} \quad (\text{A.10})$$

e com esta mudança, podemos transformar a ultima parte do Hamiltoniano na seguinte:

$$\begin{aligned} a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a &= \sqrt{N_a} e^{-i\phi_a} \sqrt{N_b} e^{-i\phi_b} e^{i\phi_c} \sqrt{N_c} + \sqrt{N_c} e^{-i\phi_c} e^{i\phi_b} \sqrt{N_b} e^{i\phi_a} \sqrt{N_a} \\ &= 2 \cos(\phi_a + \phi_b - \phi_c) \sqrt{N_a N_b N_c}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

agora escrevemos o argumento do *cos* como:

$$(\phi_a + \phi_b - \phi_c) = \frac{4\phi}{N}$$

e as relações seguintes:

$$\begin{aligned} J &= N_a - N_b \\ N &= N_a + N_b + 2N_c \\ z &= \frac{(N_a + N_b - 2N_c)}{N}, \end{aligned}$$

onde  $J$  é a diferença hetero-atômica entre o número de átomos do tipo  $a$  e  $b$ ,  $z$  representa a diferença entre o número relativo de átomos nos condensados e  $\phi$  representa uma diferença de fase. Sabemos que  $z$  e  $\phi$  tem que ser variáveis canonicamente conjugadas, isto é:

$$[z, \phi] = iI$$

Logo utilizamos (A.12) e sendo  $k = \frac{2J}{N}$  obtemos:

$$\begin{aligned} N_a &= \frac{N(k+1+z)}{4} \\ N_b &= \frac{N(-k+1+z)}{4} \\ N_c &= \frac{N(1-z)}{4} \end{aligned} \tag{A.12}$$

usando  $k_+ = 1+k$  e  $k_- = 1-k$  temos:

$$\sqrt{N_a N_b N_c} = \frac{N^{3/2}}{4^{3/2}} \sqrt{(1-z)(z+k_+)(z+k_-)}. \tag{A.13}$$

Voltamos para o Hamiltoniano (A.1) substituindo as equações (A.13) e (A.11), escrevemos da seguinte forma:

$$H = z^2 \lambda + z(\alpha - \lambda) + (\lambda - 2\alpha + \beta) + \sqrt{(1-z)(z+k_+)(z+k_-)} \cos\left(\frac{4\phi}{N}\right), \tag{A.14}$$

onde

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\sqrt{N}}{2\Omega} \left( \frac{U_{aa} + U_{bb} + U_{cc} + U_{ab} - U_{ac} - U_{bc}}{4} \right) \\ \alpha &= \frac{\sqrt{N}}{2\Omega} \left( \frac{1+k}{2} U_{aa} + \frac{1-k}{2} U_{bb} + \frac{U_{ab}}{2} - \frac{1+k}{4} U_{ac} - \frac{1-k}{4} U_{bc} + \frac{1}{2N} (\mu_a + \mu_b - \mu_c) \right) \\ \beta &= \frac{\sqrt{N}}{2\Omega} \left( (1+k)^2 U_{aa} + (1-k)^2 U_{bb} + (1-k)^2 U_{ab} + \frac{2}{N} ((1+k)\mu_a + (1-k)\mu_b) \right). \end{aligned}$$

### A.2.1 Pontos Fixos

Agora vamos encontrar as equações de movimento através das derivadas parciais do Hamiltoniano que também nos darão os pontos fixos do sistema:

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \phi} \quad e \quad -\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial H}{\partial z}, \tag{A.15}$$

e os pontos fixos estão determinados pela condição:

$$\frac{\partial H}{\partial \phi} = \frac{\partial H}{\partial z} = 0, \quad (\text{A.16})$$

logo usando (A.14) encontramos a igualdade

$$\begin{aligned} & 2z\lambda + \alpha - \lambda + \frac{(1-z)(z+k_-) + (1-z)(z+k_+) - (z+k_+)(z+k_-)}{2\sqrt{(1-z)(z+k_+)(1-k_-)}} \cos\left(\frac{4\phi}{N}\right) = \\ & = -\frac{4}{N} \sqrt{(1-z)(z+k_+)(z+k_-)} \sin\left(\frac{4\phi}{N}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

A condição dos pontos fixos pode nos dar mais informação se separamos ela dependendo de  $k$  e de  $\phi$ . No gráfico (A.1) podemos ver o comportamento da função  $g(z)$  para diferentes valores de  $k$ . Logo quando graficada junto com a função  $f(z)$  pode-se ver o numero de soluções para cada caso. No gráfico (A.1), ilustra-se o comportamento da função  $g(z)$

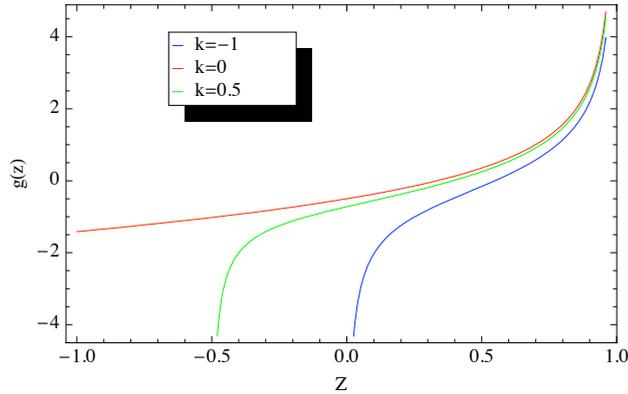


Figura A.1: Comportamento da função  $g(z)$  da equação A.18 para três valores diferentes de  $k$

para diferentes valores de  $k$ . Isto faz com que seja necessário tratar os três casos de  $k < 0$ ,  $k = 0$  e  $k > 0$  separadamente. Analisamos os seguintes casos:

★ Caso  $k \neq 0$  temos duas análises:

★ para  $\phi = 0$ , em (A.17) a seguinte solução:

$$\begin{aligned} 2z\lambda + \alpha - \lambda &= -\frac{(1-z)(z+k_-) + (1-z)(z+k_+) - (z+k_+)(z+k_-)}{2\sqrt{(1-z)(z+k_+)(z+k_-)}} \\ f(z) &= g(z) \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

★ para  $\phi = \frac{N\pi}{4}$ , esta:

$$2z\lambda + \alpha - \lambda = \frac{(1-z)(z+k_-) + (1-z)(z+k_+) - (z+k_+)(z+k_-)}{2\sqrt{(1-z)(z+k_+)(z+k_-)}}$$

$$f(z) = -g(z) \tag{A.19}$$

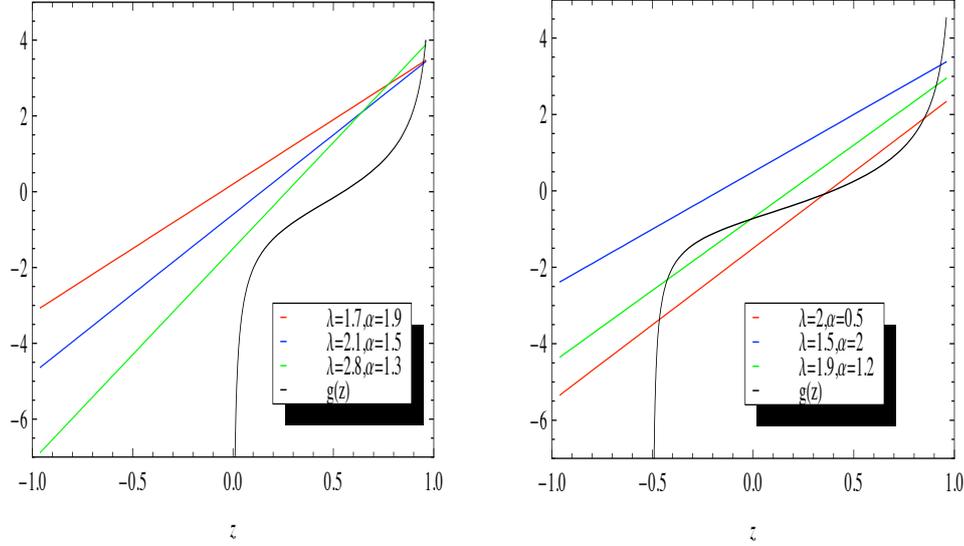


Figura A.2: Solução gráfica da equação (A.18). A intersecção entre a reta  $f(z)$  e a curva  $g(z)$  para diferentes valores de  $\lambda$  e  $\alpha$ . Para este caso podemos tomar dois valores de  $k$ , um sendo  $k = -1$  (a) e outro  $k = 0.5$  (b).

No gráfico (A.2 a) vemos que para  $k = -1$  somente existe um máximo local para as três retas que seria uma solução, mas para o caso de  $k = 0.5$  pode admitir uma, duas ou três soluções.

★Caso  $k = 0$ : Da equação (A.18) temos:

$$2z\lambda + \alpha - \lambda = \frac{-(1-3z)}{2\sqrt{1-z}} \quad (\text{A.20})$$

e para a equação (A.19) temos:

$$2z\lambda + \alpha - \lambda = \frac{(1-3z)}{2\sqrt{1-z}} \quad (\text{A.21})$$

Podemos ver no gráfico (A.3) que admite uma ou duas soluções. Por conveniência definimos:

$$f(z) = 2z\lambda + \alpha - \lambda \quad (\text{A.22})$$

$$g(z) = -\frac{(1-3z)}{2\sqrt{1-z}} \quad (\text{A.23})$$

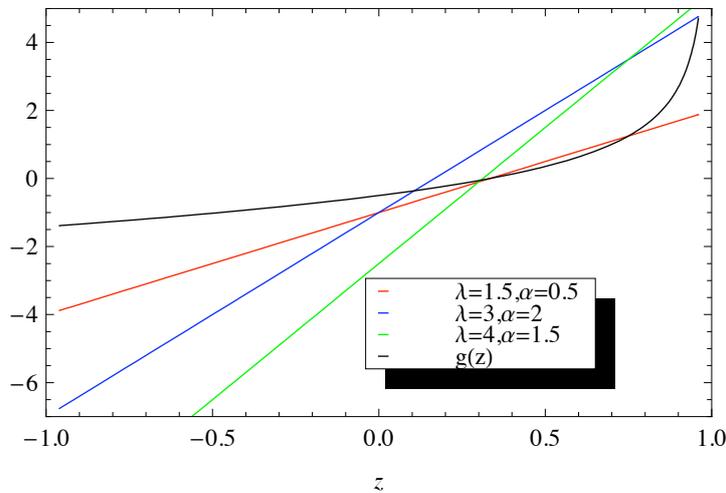


Figura A.3: Solução gráfica da equação (A.20) para  $k = 0$ . A intersecção entre a reta  $f(z)$  e a curva  $g(z)$  para diferentes valores de  $\lambda$  e  $\alpha$

## A.2.2 Diagrama de parâmetros

O diagrama no espaço de parâmetros serve para identificar os tipos diferentes de soluções para a equação (A.16), dividindo o espaço de parâmetros em diferentes regiões, para cada caso de  $k$ , analisado acima. Considerando  $f(z)$  e  $g(z)$ , a fronteira entre as regiões ocorre quando  $f(z)$  é uma linha tangente a  $g(z)$  em algum valor de  $z_0$ . Uma análise padrão

mostra que isto ocorre quando  $\lambda = g'(z_0)$ . Exigindo que  $f(z_0) = g(z_0)$ , encontramos uma relação que determina a fronteira.

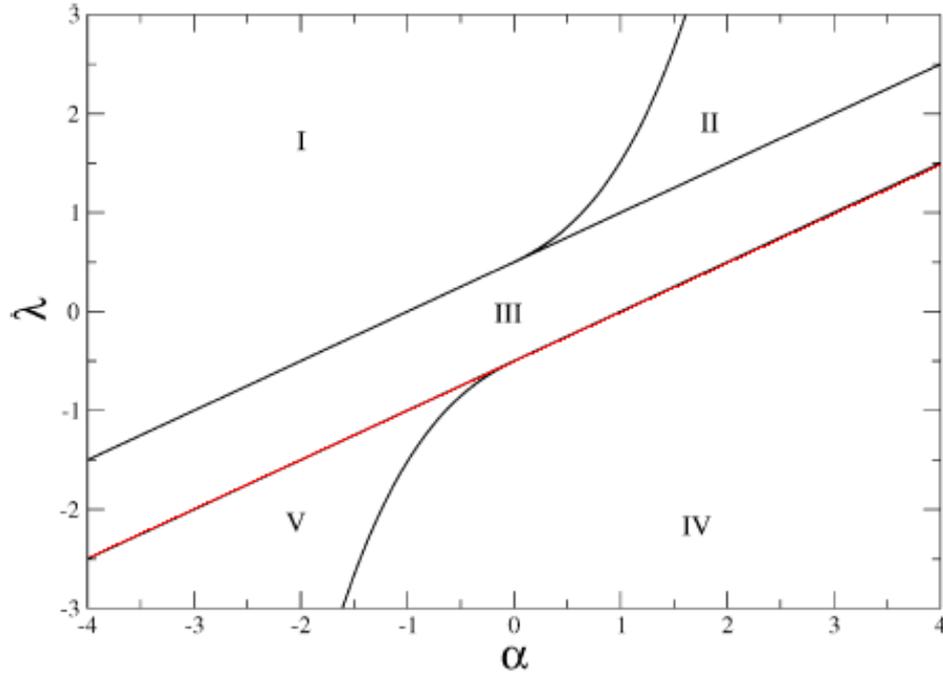


Figura A.4: Diagrama de parâmetros identificando diferentes tipos de soluções da equação A.16 onde  $k=0$ . Na região I não tem solução para  $z$  quando  $\phi = 0$ , e uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/4$ . Na região II tem duas soluções para  $z$  quando  $\phi = 0$ , e uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/4$ . Na região III tem uma solução quando  $\phi = 0$ , uma solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/4$ , e duas soluções para  $\phi$  quando  $z = -1$ . Na região IV tem uma solução para  $z$  quando  $\phi = 0$ , e não tem solução para  $z$  quando  $\phi = N\pi/4$ . Na região V existe uma solução para  $z$  quando  $\phi = 0$ , e duas soluções para  $z$  quando  $\phi = N\pi/4$ . O limite que separa as regiões II e III é dada por  $\lambda = (\alpha + 1)/2$ , em quanto que a equação  $\lambda = (\alpha - 1)/2$  separa as regiões III e IV. O limite entre as regiões I e II, e as regiões IV e V foram obtidas numericamente.

### A.2.3 Dinâmica Quântica

Investigamos a dinâmica quântica do Hamiltoniano no limite de não espalhamento onde  $U_{ij}$  para todos os  $i, j = a, b, c$ :

$$H = \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \Omega(a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a), \quad (\text{A.24})$$

Para fazer a análise quântica usamos a ideia da evolução temporal, então temos:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\phi\rangle, \quad (\text{A.25})$$

onde  $U(t)$  é o operador evolução temporal:

$$U(t) = \sum_{m=0}^M |m\rangle\langle m| \exp(-iE_m t), \quad (\text{A.26})$$

e  $a_n = \langle \Psi_n | \phi \rangle$  sendo  $|\phi\rangle$  o estado inicial. Através da diagonalização calculamos o valor esperado de  $z(t)$ , sendo  $z$  introduzido na parte clássica como a diferença entre átomos e moléculas  $z = (N_a + N_b - 2N_c)/N$  para este caso teríamos:

$$\langle z(t) \rangle = \frac{1}{N} \langle \Psi(t) | N_a + N_b - 2N_c | \Psi(t) \rangle. \quad (\text{A.27})$$

Usando a última equação junto com os autovalores e autovetores obtidos diretamente da diagonalização numérica do Hamiltoniano podemos investigar a dinâmica quântica do valor esperado  $z(t)$ .

Um estudo do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental também pode ser feito, utilizando também a diagonalização exata do Hamiltoniano. Maiores informações podem ser obtidas em [31].

# Referências Bibliográficas

- [1] E. A. Cornell and C. E. Wieman, **Rev. Mod. Phys.** **74** (2002) 875;
- [2] J. R. Anglin and W. Ketterle, **Nature** **416**, (2002) 211;
- [3] E. Cornell, Very cold indeed: the nanokelvin physics of Bose-Einstein condensation. **Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology**, Washington, v. 101, n. 4, p. 419-434, July/Aug. 1996.
- [4] A. Einstein, Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 22, p. 261-267, (1924);
- [5] A. Einstein, Quantentheorie de einatomigen idealen Gases - Zweite Abhandlung **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 1, p. 3-14, (1925);
- [6] S. N. Bose, Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese **Zeitschrift for Physik**, Berlin, v. 26, p. 178-181, (1924);
- [7] W. Ketterle, Nobel lecture: when atoms behave as waves: Bose-Einstein Condensation and the atom laser. **Rev. Mod. Phys.**, Melville, v. 74, n. 4, p. 1131-1151, (2002);
- [8] D. S. Durfee, W. Ketterle, Experimental studies of Bose-Einstein condensation. **Optics Express**, Washington, v. 2, n. 8, p. 299-313, Apr. 1998;
- [9] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, **Science** **275** (1997) 637;

- [10] B. Damski, L. Santos, E. Tiemann, M. Lewenstein, S. Kotochigova, P. Julienne, and P. Zoller, **Phys. Rev. Lett.** **90** (2003) 110401;
- [11] D. Wang, J. Qi, M. F. Stone, O. Nikolayeva, H. Wang, B. Hattaway, S. D. Gensemer, P. L. Gould, E. E. Eyler, and W. C. Stwalley, **Phys. Rev. Lett.** **93**, (2004) 243005;
- [12] G. Thalhammer, G. Barontini, L.D. Sarlo, J. Catani, F. Minardi and M. Inguscio, **Phys. Rev. Lett.** **100** (2008) 210402;
- [13] J. Catani, L.D. Sarlo, G. Barontini, F. Minardi and M. Inguscio, **Phys. Rev.** **A77** (2008) 011603(R);
- [14] H. Wang e W. C. Stwalley, **J. Chem. Phys.** **108**, 5767 (1998);
- [15] M. G. Kozlov e L. N. Labzowsky, **J. Phys.** **B 28**, 1933 (1995);
- [16] G. Barontini, C. Weber, F. Rabatti, J. Catani, G. Thalhammer, M. Inguscio, and F. Minardi, **Phys. Rev. Lett.** **103** (2009); 043201.
- [17] J. Herbig, T. Kraemer, M. Mark, T. Weber, C. Chin, H.-C. Nagerl and R. Grimm, **Science** **301** (2003) 1510;
- [18] G. Santos, A. Foerster, I. Roditi, Z. V. T. Santos e A. P. Tonel, **J. Phys. A: Math. Theor.** **41** No 29 (25 July 2008) 295003 (9pp);
- [19] J. von Stecher, J. P. D’Incao and Chris H. Greene, **Nature Physics****5** (2009) 417;
- [20] J. Catani, Private communication related to work in collaboration with G. Barontini, F. Rabati, G. Talhammer, C. Weber, F. Minardi and M. Inguscio;
- [21] H. Q. Zhou, J. Links, M. Gould and R. McKenzie, **J.Math.Phys.** **44** (2003), 4690
- [22] J. Links, H.-Q. Zhou, R. H. McKenzie e M. D. Gould, **J. Phys.** **A36** (2003) R63-R104;
- [23] A. Foerster, J. Links, H.-Q. Zhou, in Classical and quantum nonlinear integrable systems: theory and applications, edited by A. Kundu (**IOP Publishing, Bristol and Philadelphia, 2003**) pp. 208-233;

- [24] J. Dukelsky, G. Dussel, C. Esebbag and S. Pittel, **Phys. Rev. Lett.** **93** (2004) 050403;
- [25] G. Ortiz, R. Somma, J. Dukelsky and S. Rombouls, **Theoretical and Mathematical Physics** **151** (2007) 831;
- [26] A. Kundu, **Theoretical and Mathematical Physics** **151** (2007) 831;
- [27] A. Foerster, E. Ragoucy; **Nuclear Physics B** **777** (2009) 373-403;
- [28] V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov, and G. Izergin; Quantum inverse scattering method and correlation functions (Cambridge University Press, 1993, Cambridge).
- [29] L.D. Faddeev, **Int. J. Mod. Phys. A** **10** (1995) 1845.
- [30] Tomasz Goliński, Maciej Horowski, Anatol Odziejewicz, Aneta Slizewska, **Jour. Math. Phys.** **48**, 023508 (2009).
- [31] M. Duncan, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, N. Oelkers, A. P. Tonel; **Nuclear Physics B** **767** (2007) 227-249.
- [32] A. P. Tonel, J. Links and A. Foerster, **Journal of Physics A: Mathematical and General** **38**; (2005) 1235