

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

**Modelos de Condensados de Bose-Einstein Exatamente Solúveis \***

Gilberto Nascimento Santos Filho

Tese realizada sob orientação da Prof<sup>a</sup>.  
Dr<sup>a</sup>. Angela Foerster e apresentada ao  
Instituto de Física da UFRGS em preen-  
chimento parcial dos requisitos para a ob-  
tenção do título de Doutor em Física.

Porto Alegre

Julho - 2007

---

\* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Este trabalho é dedicado

à minha família.

# Agradecimentos

★ À orientadora Angela Foerster, pela dedicação demonstrada e pelo estímulo constante oferecido e, acima de tudo, pela amizade durante este período.

★ Aos colaboradores: Jon Links, Sílvio R. Dahmen e Arlei Tonel que tiveram uma contribuição muito importante neste trabalho.

★ À minha mãe: Maria dos Santos.

★ Aos professores e funcionários do IF, que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

*Muito Obrigado.*

# Resumo

Investigamos nesta tese dois modelos integráveis para condensados de Bose-Einstein. Começamos com um modelo simples que descreve o tunelamento Josephson entre dois condensados de Bose-Einstein. Alguns aspectos matemáticos deste modelo tais como sua solução exata através do método algébrico do ansatz de Bethe são discutidos. Usando uma análise clássica, estudamos as equações de movimento e as curvas de nível do hamiltoniano. Finalmente, a dinâmica quântica do modelo é investigada usando diagonalização exata do hamiltoniano. Em ambas análises, a existência de um limiar de acoplamento entre uma fase não localizada e uma fase de auto-aprisionamento é evidente, em concordância qualitativa com os experimentos. Consideramos subsequente um modelo para um condensado de Bose-Einstein atômico-molecular. Por meio da álgebra de Yang-Baxter e do método algébrico do ansatz de Bethe sua integrabilidade é estabelecida e a solução do ansatz de Bethe, bem como os autovalores da energia são obtidos. Usando uma análise clássica, determinamos os pontos fixos do sistema no espaço de fase. Encontramos que os pontos fixos de bifurcação separam naturalmente o espaço dos parâmetros de acoplamento em quatro regiões. Estas quatro regiões originam as dinâmicas qualitativamente diferentes. Mostramos então, que esta classificação também vale para a dinâmica quântica. Finalmente, investigamos as transições de fase quânticas destes modelos utilizando os conceitos de emaranhamento, gap de energia e fidelidade.

# Abstract

In this thesis we investigate two integrable models for Bose-Einstein condensates. We begin with a simple model that describes Josephson tunneling between two Bose-Einstein condensates. We discuss some mathematical aspects of this model such as its exact solvability through the algebraic Bethe ansatz. Then using a classical analysis, we study the equations of motion and the level curves of the Hamiltonian. Finally, the quantum dynamics of the model is investigated using direct diagonalisation of the Hamiltonian. In both of these analyses, the existence of a threshold coupling between a delocalised and a self-trapped phase is evident, in qualitative agreement with experiments. We consider subsequently a model for atomic-molecular Bose-Einstein condensates. By means of the Yang-Baxter algebra and the algebraic Bethe ansatz its integrability is established and the Bethe ansatz solution as well as the energy eigenvalues are obtained. Then using a classical analysis we determine the phase space fixed points of the system. It is found that bifurcations of the fixed points naturally separate the coupling parameter space into four regions. The different regions give rise to qualitatively different dynamics. We then show that this classification holds true for the quantum dynamics. Finally, we investigate the quantum phase transitions of these models using the concepts of entanglement, energy gap and fidelity.

# Sumário

<b>1. Introdução</b> . . . . .	1
<b>2. Modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados</b> . . . . .	8
2.1 Hamiltoniano . . . . .	9
2.2 Integrabilidade e solução exata . . . . .	10
2.3 Dinâmica clássica . . . . .	13
2.3.1 Hamiltoniano . . . . .	13
2.3.2 Pontos fixos e curvas de nível . . . . .	14
2.4 Dinâmica quântica . . . . .	19
2.5 Conclusão . . . . .	22
<b>3. Modelo para condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular</b> .	23
3.1 Hamiltoniano . . . . .	24
3.2 Integrabilidade e solução exata . . . . .	25
3.3 Dinâmica clássica . . . . .	28
3.3.1 Hamiltoniano . . . . .	28
3.3.2 Pontos fixos . . . . .	29
3.3.3 Curvas de nível . . . . .	33
3.4 Dinâmica quântica . . . . .	36
3.5 Conclusão . . . . .	38
<b>4. Transições de fase quânticas</b> . . . . .	39
4.1 Introdução . . . . .	40
4.2 Emaranhamento . . . . .	41
4.3 Modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados . . . . .	42
4.3.1 Entropia de Emaranhamento . . . . .	42
4.3.2 Gap de Energia . . . . .	44
4.3.3 Fidelidade . . . . .	45
4.4 Modelo para condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular . . . .	48

---

4.4.1	Entropia de emaranhamento . . . . .	48
4.4.2	Gap de Energia . . . . .	50
4.4.3	Fidelidade . . . . .	51
4.5	Conclusão . . . . .	53
<b>5.</b>	<b>Conclusões . . . . .</b>	<b>55</b>
5.1	Considerações Finais . . . . .	56
5.2	Perspectivas para o futuro . . . . .	58
5.3	Trabalhos publicados e em preparação . . . . .	58
<b>A.</b>	<b>Representação matricial dos hamiltonianos . . . . .</b>	<b>59</b>
A.1	Dois condensados de Bose-Einstein acoplados . . . . .	59
A.1.1	$N = 2$ . . . . .	60
A.1.2	$N = 10$ . . . . .	62
A.2	Condensado de Bose-Einstein atômico-molecular . . . . .	64
A.2.1	$N = 2$ . . . . .	65
A.2.2	$N = 3$ . . . . .	66
A.2.3	$N = 9$ . . . . .	67
A.2.4	$N = 10$ . . . . .	67
<b>B.</b>	<b>Realizações da álgebra de Yang-Baxter . . . . .</b>	<b>69</b>
<b>C.</b>	<b>Método algébrico do ansatz de Bethe . . . . .</b>	<b>71</b>
<b>D.</b>	<b>Trabalhos publicados . . . . .</b>	<b>74</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>92</b>

## Capítulo 1

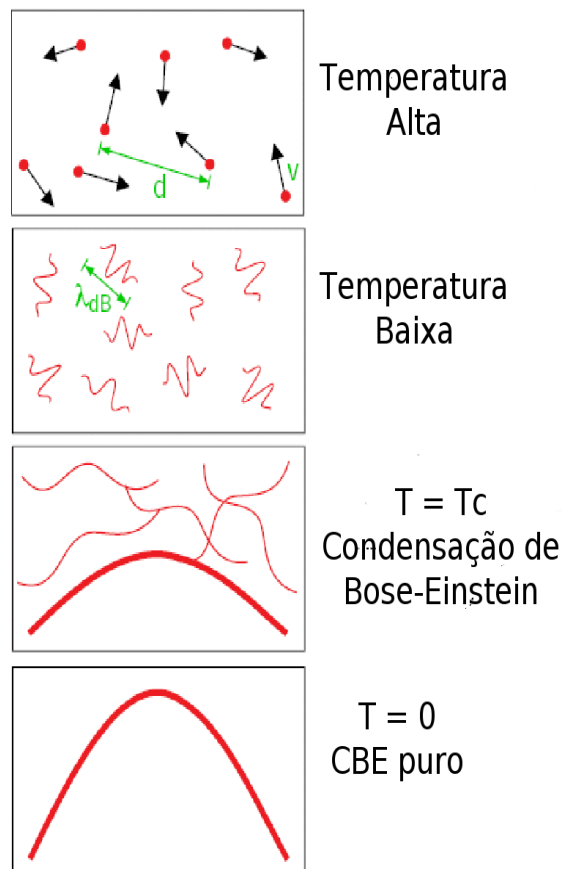
# Introdução



A condensação de Bose-Einstein foi prevista por Bose e Einstein [1, 2, 3] em 1925 como uma transição de fase quântica em um gás de bósons na qual todos os bósons passam a ocupar o estado fundamental formando um gás quântico degenerado. Desde a predição teórica até a realização experimental em 1995, foi preciso aproximadamente 70 anos de estudo e aprimoramento das técnicas utilizadas nos laboratórios. A obtenção do condensado de Bose-Einstein em gases atômicos diluídos abriu a possibilidade de investigar o comportamento de uma nova classe de sistemas quânticos, diferentes dos supercondutores, do hélio líquido e dos lasers. Subseqüentemente o fenômeno tem sido cada vez mais investigado, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Nesta tese nos concentraremos no desenvolvimento e na aplicação de métodos algébricos e numéricos na análise de alguns modelos simples que estão no foco de estudo de muitas correntes teóricas: um modelo de dois condensados de Bose-Einstein para átomos que explica, qualitativamente, o tunelamento Josephson e um modelo de condensados de Bose-Einstein envolvendo átomos e moléculas. Antes de iniciar este estudo, vamos revisar alguns conceitos básicos da condensação de Bose-Einstein, bem como apresentar alguns resultados experimentais importantes.

A condensação de Bose-Einstein é baseada essencialmente na natureza ondulatória das partículas, ou seja, é um fenômeno bem típico da Mecânica Quântica. Para explicar de forma simples o que ocorre, vamos utilizar o argumento de Ketterle [4, 5]: considerando um gás de átomos fracamente interagentes, em altas temperaturas ou a temperatura ambiente podemos tratar os átomos como bolas de bilhar que se chocam dentro de um certo volume. À medida que baixamos a temperatura, os átomos podem ser tratados como pacotes de onda com comprimento de onda de de Broglie  $\lambda_{dB}$ . À medida que resfriamos o gás, o comprimento de onda de de Broglie aumenta. Quando atinge-se a temperatura crítica  $T = T_c$ , o comprimento de onda de de Broglie é comparável a distância média entre os átomos, os pacotes de onda se entrelaçam e ocorre a condensação de Bose-Einstein. Resfriando ainda mais o gás, próximo a 0K, os átomos mais energéticos desaparecem e ficamos com um condensado puro. Na Fig. 1.1 ilustramos este comportamento.

Desde a previsão de Bose e Einstein, técnicas experimentais a base de lasers e resfriamento evaporativo usando ondas de rádio frequência (rf) foram desenvolvidas e somente em 1995 as primeiras realizações experimentais dos condensados de Bose-Einstein (CBE) foram obtidas por [6, 7, 8] usando vapores de átomos do grupo dos metais alcalinos  $^{87}\text{Rb}$ ,  $^7\text{Li}$  e  $^{23}\text{Na}$ . Átomos alcalinos são apropriados para métodos a base de laser porque sua transição óptica pode ser excitada por lasers disponíveis e porque eles têm uma estrutura interna de níveis de energia favorável para resfriamento a temperaturas de  $\mu\text{K}$ . Apesar disto, não foi possível a obtenção dos CBE usando apenas a técnica de resfriamento por laser pois esta técnica funciona bem apenas em baixas densidades, onde absorção e colisões induzidas por

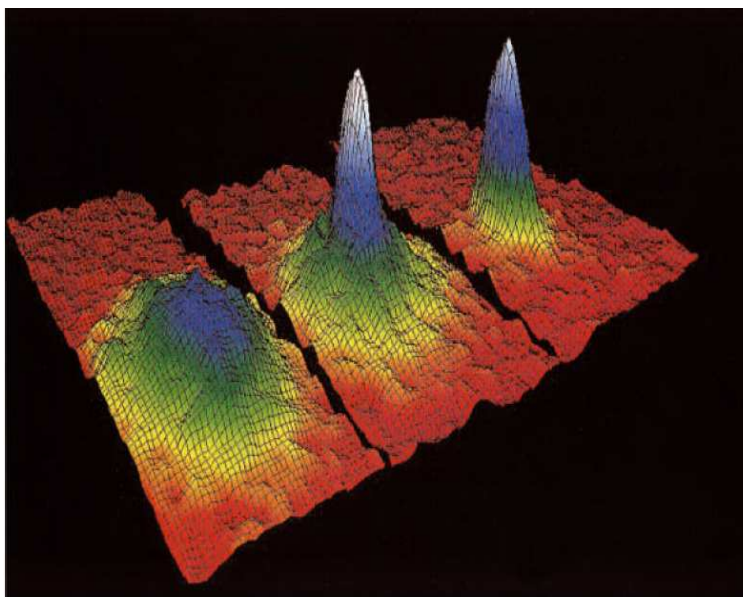


**Fig. 1.1:** 1) Em temperaturas altas ou ambiente podemos tratar os átomos como bolas de bilhar, desprezando a interação entre eles. 2) Em temperatura baixa a extensão espacial do pacote de onda é da mesma ordem de grandeza de  $\lambda_{dB}$ . 3) Em  $T = T_c$ , a distância média entre os átomos é comparável ao comprimento de onda de de Broglie  $\lambda_{dB} \approx d$ , os pacotes de onda se entrelaçam e ocorre a condensação de Bose-Einstein. 4) Próximo a  $T = 0K$  temos um condensado puro. Figura extraída do artigo do Ketterle et al. [4, 5].

luz são eliminadas. Somente combinando a técnica de resfriamento por laser com a técnica de resfriamento evaporativo, que exige uma alta densidade e alta taxa de colisão entre os átomos, a condensação de Bose-Einstein foi obtida. Uma vez aprisionados por uma armadilha magnéto-ótica<sup>1</sup> e resfriados por lasers usa-se a técnica de evaporação por rf que joga os átomos mais quentes para fora da armadilha, levando os átomos mais frios a temperatura e densidade de transição para a condensação. Muitos experimentos atingiram a condensação

<sup>1</sup> Tradução de MOT- Magneto-Optical Trap.

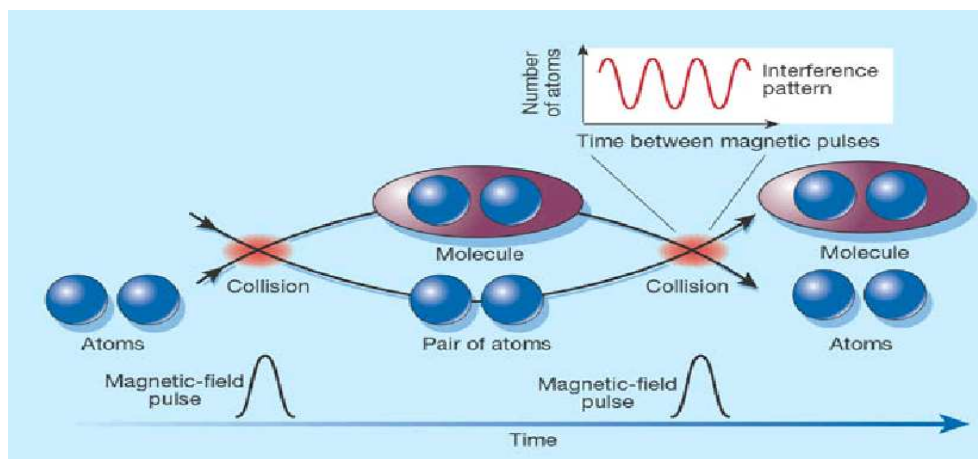
em temperaturas entre  $500nK$  e  $2\mu K$  à densidades entre  $10^{14}$  e  $10^{15}$  átomos por centímetro cúbico. Na Fig. 1.2 mostramos, por exemplo, como um condensado pode ser identificado, através de um aumento súbito na densidade dos átomos de  $^{87}Rb$  [9, 10].



**Fig. 1.2:** *Observação da formação de um condensado de Bose-Einstein por técnicas de imagem. A figura mostra uma seqüência de imagens da nuvem de  $^{87}Rb$  se expandindo após a armadilha ser desligada. À esquerda temos a nuvem a uma temperatura  $T \approx 400nK$ , acima de  $T_c$ . No centro temos a nuvem de átomos à  $T \approx 200nK$  imediatamente após o condensado ter se formado (identificado por um pico na densidade de átomos). À direita, temos um CBE quase puro a uma temperatura de  $T \approx 50nK$ . Figura extraída do artigo do Cornell [10].*

Além da densidade e da temperatura a interação entre os átomos é muito importante na obtenção dos CBE. Os átomos no condensado interagem e se espalham, sendo o comprimento de espalhamento o parâmetro que dá a força da interação. Como os átomos estão a baixíssimas temperaturas o espalhamento é de baixa energia e o comprimento de espalhamento de onda-s é o parâmetro que determina a força da interação. Após a realização experimental dos primeiros condensados atômicos, foram realizadas inúmeras tentativas de obtenção de moléculas ultra frias nos CBE pois a produção de um condensado a partir de um gás molecular aplicando os métodos já consagrados na obtenção dos condensados atômicos é muito difícil devido ao fato que quanto mais pesadas as partículas, mais baixa é a tempe-

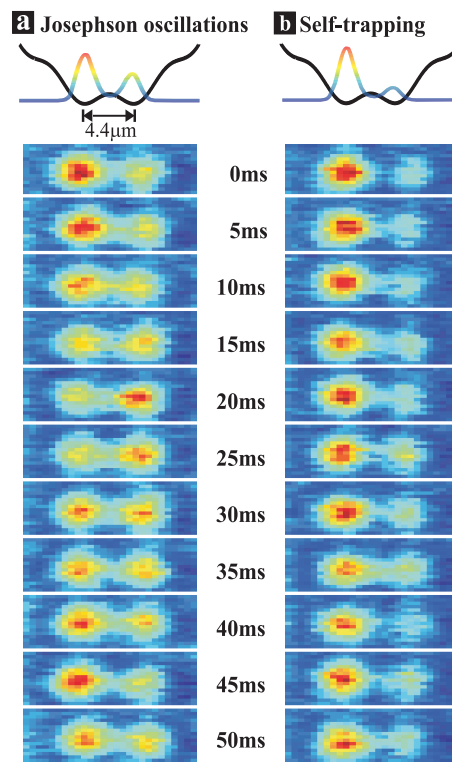
ratura de transição para a obtenção do condensado. Além disso, moléculas possuem uma estrutura de níveis de energia rotacionais e vibracionais, dificultando a utilização da técnica de resfriamento por laser [11]. Moléculas ultra frias foram produzidas num CBE através da ressonância de Feshbach, já conhecida da Física de altas energias, onde átomos em colisão se unem para formar um estado ligado molecular durante um curto intervalo de tempo e se separam formando novamente um estado não ligado. Aplicando pulsos magnéticos próximos da ressonância de Feshbach num condensado de  $^{85}\text{Rb}$  [12] uma mistura coerente de átomos e moléculas diatômicas foi obtida no condensado. Estes condensados são chamados de condensados de Bose-Einstein atômico-molecular (CBE-AM). A Fig. 1.3 ilustra, em linhas gerais, a formação de um CBE-AM. Usando a ressonância de Feshbach foram produzidos CBE-AM a partir de condensados de diferentes partículas como  $^{133}\text{Cs}$ ,  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{87}\text{Rb}$ , [13, 14, 15].



**Fig. 1.3:** Formação de moléculas em um CBE usando pulsos magnéticos próximos da ressonância de Feshbach. No primeiro pulso a energia de colisão é modificada pelo campo magnético de forma que a energia de ligação de um estado ligado molecular é atingida, com a formação de uma superposição coerente de átomos e moléculas, (CBE-AM). No segundo pulso a superposição é quebrada e o número de átomos no condensado é medido. Figura extraída do artigo do Zoller [11].

Além da utilização dos condensados de Bose-Einstein para a produção de moléculas ultra frias em um CBE-AM, diversos outros estudos e aplicações destes condensados têm sido realizados. Entre eles, citamos em particular o fenômeno do tunelamento Josephson e o auto-aprisionamento entre dois condensados [16, 17, 18]. O fenômeno de tunelamento (efeito Josephson) previsto por B. D. Josephson [19] em 1962 e verificado pela primeira

vez por [20], descreve o tunelamento de elétrons entre dois supercondutores separados por uma fina camada isolante. Para o caso dos condensados de Bose-Einstein, técnicas experimentais permitem dividir um condensado de forma a se obter um duplo poço potencial, com os mínimos separados por uma distância de aproximadamente  $4.4\mu\text{m}$  e uma barreira de potencial entre eles (valor específico para o caso do  $^{87}\text{Rb}$ ) [17, 18]. A não linearidade da interação entre os átomos que tunelam pela barreira de potencial determina os regimes dinâmicos observados. Na Fig. 1.4 mostramos as situações de tunelamento Josephson (lado esquerdo) e auto-aprisionamento (lado direito) entre dois condensados.



**Fig. 1.4:** *Observação experimental direta de tunelamento e auto-aprisionamento em dois CBE mostrando dois regimes dinâmicos diferentes. São feitas medidas da densidade dos átomos "in loco" através do espalhamento de luz. Do lado esquerdo observamos os átomos tunelando de um condensado para outro. Do lado direito observamos o fenômeno de auto-aprisionamento quando os átomos ficam aprisionados em um dos condensados. Figura extraída do artigo de Albiez et al. [17].*

Do ponto de vista teórico, existem diferentes técnicas e modelos para explicar os fenômenos envolvendo os condensados de Bose-Einstein, como por exemplo as equações de Gross-Pitaevskii, aproximação de campo médio, entre outros. Uma ferramenta importante na

evolução dos aspectos teóricos dos condensados tem sido o desenvolvimento e a aplicação de técnicas matemáticas potentes, que estão se tornando cada vez mais importantes para uma melhor compreensão da complexidade destes sistemas físicos. O estudo destes fenômenos é extremamente difícil, já que muitas vezes não se pode aplicar métodos aproximados, como por exemplo a teoria de perturbações e a teoria de campo médio, devido a grandes flutuações quânticas que ocorrem. Assim, neste contexto a técnica das soluções exatas de modelos físicos tem recentemente atraído muita atenção da comunidade, já que ela evita aproximações. O estudo de soluções exatas de modelos tem sua origem no trabalho de Bethe de 1931 no modelo de Heisenberg [21]. Posteriormente, este campo recebeu grandes contribuições de Yang [22], Baxter [23], Faddeev e Takhtajam [24] e Lieb e Wu [25], entre outros e tem prosperado muito. Trabalhos recentes em nanogrãos levaram a área de modelos exatamente solúveis para uma audiência nova e muito maior, quando a solução exata do modelo BCS (Bardeen, Cooper e Schrieffer) foi obtida por Richardson [26]. Neste cenário, modelos exatamente solúveis para condensados de Bose-Einstein foram propostos e alguns casos particulares foram investigados [27, 28, 29, 30, 31, 32].

Nesta tese vamos nos concentrar no estudo de dois modelos exatamente solúveis que estão no foco de muitas correntes teóricas e que descrevem fenômenos relacionados aos CBE e CBE-AM, tais como tunelamento Josephson, auto-aprisionamento e a dinâmica de conversão de átomos em moléculas e vice-versa. O objetivo é fazer um estudo completo destes modelos, desde a sua solução exata, discutindo também as dinâmicas clássica e quântica e investigando as transições de fase quânticas. A tese está organizada da seguinte forma: No capítulo 2 estudamos a integrabilidade e a solução exata de um hamiltoniano simples que descreve dois condensados acoplados por tunelamento Josephson. Fazemos também uma análise da dinâmica clássica e quântica do modelo. No capítulo 3 utilizamos os mesmos métodos para investigar um modelo que descreve a conversão de átomos e moléculas em um CBE-AM. No capítulo 4 fazemos uma análise das transições de fase quânticas destes modelos (estudados nos capítulos 2 e 3) utilizando os conceitos de gap, emaranhamento e fidelidade. Parte dos resultados obtidos nos capítulos 2, 3 e 4 é original e constitui a principal contribuição do autor para a área.

## Capítulo 2

# Modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados

## 2.1 Hamiltoniano

O hamiltoniano integrável mais geral que descreve dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson é dado por [31]

$$H = U_1 N_1^2 + U_2 N_2^2 + U_{12} N_1 N_2 + \mu_1 N_1 + \mu_2 N_2 - \frac{\varepsilon_j}{2} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), \quad (2.1)$$

onde  $a_i^\dagger$  e  $a_i$  são os operadores de criação e destruição de átomos e  $N_i = a_i^\dagger a_i$ , ( $i = 1, 2$ ) são os operadores número de átomos em cada condensado. Como o hamiltoniano (2.1) não depende explicitamente do tempo e comuta com o número total de átomos  $N = N_1 + N_2$  temos que  $N$  é conservado. Os parâmetros  $U_1$  e  $U_2$  são as amplitudes de espalhamento de onda- $s$  entre os átomos nos condensados 1 e 2, respectivamente, enquanto que  $U_{12}$  é a amplitude de espalhamento de onda- $s$  entre os átomos dos dois condensados. Os  $\mu_i$ 's são os potenciais externos e  $\varepsilon_j$  é a amplitude de tunelamento de átomos entre um condensado e o outro.

Para uma escolha particular dos parâmetros  $U$ 's e  $\mu_i$ 's,

$$U_1 = U_2 = -\frac{U_{12}}{2} = \frac{K}{8}, \quad (2.2)$$

$$\mu_1 = -\mu_2 = -\frac{\Delta\mu}{2}, \quad (2.3)$$

temos que o hamiltoniano (2.1) pode ser escrito na forma

$$H = \frac{K}{8} (N_1 - N_2)^2 - \frac{\Delta\mu}{2} (N_1 - N_2) - \frac{\varepsilon_j}{2} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), \quad (2.4)$$

com  $K > 0$  indicando uma interação repulsiva entre os átomos.

Este modelo (2.4) apesar de muito simples, descreve propriedades físicas importantes dos condensados de Bose-Einstein, como por exemplo o fenômeno de tunelamento e o autoaprisionamento. Ele foi estudado em [27, 33, 34, 35] onde foram definidos três regimes diferentes cujos limites dependem da razão entre os parâmetros  $K$  e  $\varepsilon_j$ ,

- Rabi  $\rightarrow K/\varepsilon_j \ll 1/N$ ,
- Josephson  $\rightarrow 1/N \ll K/\varepsilon_j \ll N$ ,
- Fock  $\rightarrow K/\varepsilon_j \gg N$ .

Nas próximas seções iremos mostrar que o hamiltoniano (2.4) é integrável, apresentar a solução exata e discutir as dinâmicas clássica e quântica do modelo.



## 2.2 Integrabilidade e solução exata

Vamos mostrar nesta seção que o hamiltoniano (2.4) é integrável, apresentar as equações do ansatz de Bethe e os autovalores de energia do modelo em questão. Começamos definindo a matriz  $R$  com invariância  $SU(2)$

$$R(u) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(u) & c(u) & 0 \\ 0 & c(u) & b(u) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

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. É fácil verificar que a matriz  $R$  (2.5) satisfaz a equação de Yang-Baxter

$$R_{12}(u - v)R_{13}(u)R_{23}(v) = R_{23}(v)R_{13}(u)R_{12}(u - v). \quad (2.6)$$

No que segue vamos trabalhar com a notação usual onde, por exemplo  $R_{jk}(u)$  denota a matriz  $R$  agindo não trivialmente sobre o  $j$ -ésimo e  $k$ -ésimo espaços e como identidade nos espaços restantes.

O próximo passo é encontrar uma matriz de monodromia  $T(u)$ ,

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

tal que a álgebra de Yang-Baxter para a matriz de monodromia seja obedecida

$$R_{12}(u - v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u - v). \quad (2.8)$$

Seguindo [31, 36] escolhemos a seguinte realização para a matriz de monodromia (2.7).

$$L(u) = \pi(T(u)) = L_1^a(u + \omega)L_2^a(u - \omega), \quad (2.9)$$

escrita em termos dos operadores  $L_i^a$  (Apêndice A)

$$L_i^a(u) = \begin{pmatrix} u + \eta N_i & a_i \\ a_i^\dagger & \eta^{-1} \end{pmatrix} \quad i = 1, 2. \quad (2.10)$$

Acima  $\omega$  é um parâmetro arbitrário, a ser escolhido posteriormente. Explicitamente, temos:

$$L(u) = \begin{pmatrix} (u + \omega + \eta N_1)(u - \omega + \eta N_2) + a_2^\dagger a_1 & (u + \omega + \eta N_1)a_2 + \eta^{-1}a_1 \\ (u - \omega + \eta N_2)a_1^\dagger + \eta^{-1}a_2^\dagger & a_1^\dagger a_2 + \eta^{-2} \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Pode-se mostrar que o operador  $L$  (2.11) satisfaz a álgebra

$$R_{12}(u-v)L_1(u)L_2(v) = L_2(v)L_1(u)R_{12}(u-v), \quad (2.12)$$

e, portanto, é fácil checar que a álgebra de Yang-Baxter (2.8) para a matriz de monodromia  $T$  também é obedecida. Uma representação explícita dos elementos da matriz de monodromia  $T(u)$  (2.7) pode ser obtida de (2.9), (2.10) e (2.11). Encontramos

$$A(u) = (u + \omega + \eta N_1)(u - \omega + \eta N_2) + a_2^\dagger a_1, \quad (2.13)$$

$$B(u) = (u + \omega + \eta N_1)a_2 + \eta^{-1}a_1, \quad (2.14)$$

$$C(u) = (u - \omega + \eta N_2)a_1^\dagger + \eta^{-1}a_2^\dagger, \quad (2.15)$$

$$D(u) = a_1^\dagger a_2 + \eta^{-2}. \quad (2.16)$$

Finalmente, definindo a matriz de transferência  $t(u)$  da forma usual como

$$t(u) = \pi(\text{tr}T(u)) = A(u) + D(u), \quad (2.17)$$

temos que a matriz de transferência pode ser escrita explicitamente como

$$t(u) = u^2 + u\eta N + \eta^2 N_1 N_2 + \eta\omega(N_2 - N_1) + a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2 + \eta^{-2} - \omega^2. \quad (2.18)$$

Usando a álgebra de Yang-Baxter para a matriz de monodromia (2.8) pode-se mostrar que a matriz de transferência comuta para diferentes valores do parâmetro espectral,  $[t(u), t(v)] = 0$ , isto é, o modelo é integrável.

Agora, é direto mostrar que o hamiltoniano (2.4) para os dois CBE acoplados pode ser obtido a partir da matriz de transferência  $t(u)$  e sua derivada através da seguinte expressão

$$H = -\kappa \left( t(u) - \frac{1}{4}(t'(0))^2 - ut'(0) - \eta^{-2} + \omega^2 - u^2 \right), \quad (2.19)$$

onde usamos

$$t'(0) = \left. \frac{dt}{du} \right|_{u=0} = \eta N, \quad (2.20)$$

e a seguinte identificação foi feita entre os parâmetros

$$\frac{K}{4} = \frac{\kappa\eta^2}{2}, \quad \frac{\Delta\mu}{2} = -\kappa\eta\omega, \quad \frac{\varepsilon_j}{2} = \kappa.$$

Aplicando o método algébrico do ansatz de Bethe (Apêndice B), encontramos as equações do ansatz de Bethe (EAB)

$$\eta^2(v_i^2 - \omega^2) = \prod_{j \neq i}^N \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad (2.21)$$

e o espectro de autovalores de energia do hamiltoniano (2.4)

$$E = -\kappa \left( \eta^{-2} \prod_{i=1}^N \left( 1 + \frac{\eta}{v_i - u} \right) - \frac{\eta^2 N^2}{4} - u\eta N - u^2 \right. \\ \left. - \eta^{-2} + \omega^2 + (u^2 - \omega^2) \prod_{i=1}^N \left( 1 - \frac{\eta}{v_i - u} \right) \right). \quad (2.22)$$

Surpreendentemente, a expressão acima é independente do parâmetro espectral  $u$ , que pode ser escolhido arbitrariamente. Cada conjunto  $\{v_i, i = 1, \dots, N\}$ , solução das EAB, parametriza um autovetor da matriz de transferência e, conseqüentemente do hamiltoniano (2.4) com energia dada pela eq. (2.22). Assim, resolver o problema de autovalores da matriz de transferência fica reduzido a resolver as EAB.

## 2.3 Dinâmica clássica

Nesta seção vamos fazer uma análise clássica do modelo (2.4) para condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson. Em particular vamos estudar os pontos fixos e as curvas de nível.

### 2.3.1 Hamiltoniano

Sejam  $N_j, \phi_j$ , ( $j = 1, 2$ ) operadores quânticos satisfazendo as relações de comutação canônicas

$$[\phi_j, \phi_k] = [N_j, N_k] = 0, \quad [N_j, \phi_k] = i\delta_{jk}, \quad (j, k = 1, 2).$$

Usando o fato que

$$[\exp(i\phi_j), N_k] = \delta_{jk} \exp(i\phi_j) \Rightarrow \exp(i\phi_j) N_j = (N_j + 1) \exp(i\phi_j)$$

fazemos uma transformação dos operadores bosônicos  $a_j, a_j^\dagger$ , ( $j = 1, 2$ ), para

$$a_j = \exp(i\phi_j) \sqrt{N_j}, \quad (2.23)$$

$$a_j^\dagger = \sqrt{N_j} \exp(-i\phi_j), \quad (2.24)$$

tal que as relações de comutação canônicas de Heisenberg sejam preservadas. Aplicando esta transformação (2.23,2.24) ao hamiltoniano (2.4) e definindo os operadores.

$$z = \frac{1}{N}(N_1 - N_2), \quad (2.25)$$

$$\phi = \frac{N}{2}(\phi_1 - \phi_2), \quad (2.26)$$

de modo que  $(z, \phi)$  sejam variáveis canonicamente conjugadas, isto é,

$$[z, \phi] = i.$$

No limite clássico onde  $N$  é grande, mas ainda finito, podemos equivalentemente considerar o hamiltoniano [37, 38]

$$H(z, \phi) = \frac{\varepsilon_j N}{2} \left( \frac{\lambda}{2} z^2 - \beta z - \sqrt{1 - z^2} \cos(2\phi/N) \right), \quad (2.27)$$

onde

$$\lambda = \frac{KN}{2\varepsilon_j}, \quad (2.28)$$

$$\beta = \frac{\Delta\mu}{\varepsilon_j}, \quad (2.29)$$

com  $z$  representando a diferença do número relativo de átomos nos condensados e  $\phi$  representando uma diferença de fase entre os dois condensados.

O Hamiltoniano (2.27) obedece as seguintes simetrias

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = -H(z, \phi + \pi N/2)|_{-\lambda, -\beta}, \quad (2.30)$$

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = -H(-z, \phi + \pi N/2)|_{-\lambda, \beta}, \quad (2.31)$$

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = H(-z, \phi)|_{\lambda, -\beta}, \quad (2.32)$$

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = H(z, -\phi)|_{\lambda, \beta}. \quad (2.33)$$

Vemos das simetrias (2.32,2.33) que para o caso particular  $\beta = 0$  o hamiltoniano (2.27) é simétrico em relação a origem do espaço de fase. Além disso, devido a simetria (2.31), no que segue iremos nos restringir a  $\lambda \geq 0$ .

### 2.3.2 Pontos fixos e curvas de nível

Agora, considerando o hamiltoniano (2.27) como clássico vamos investigar seus pontos fixos. A dinâmica clássica é dada pelas equações de Hamilton

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\varepsilon_j N}{2} \left( \lambda z - \beta + \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos(2\phi/N) \right), \quad (2.34)$$

$$\dot{z} = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = -\varepsilon_j \left( \sqrt{1-z^2} \sin(2\phi/N) \right), \quad (2.35)$$

e os pontos fixos são determinados pela condição

$$\frac{\partial H}{\partial \phi} = \frac{\partial H}{\partial z} = 0. \quad (2.36)$$

Isto leva a seguinte classificação:

- $\phi = 0$  e  $z \neq \pm 1$  é uma solução de

$$\lambda z - \beta = -\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}, \quad (2.37)$$

que possui apenas uma solução real para  $\lambda \geq 0$ .

- $\phi = N\pi/2$  e  $z \neq \pm 1$  é uma solução de

$$\lambda z - \beta = \frac{z}{\sqrt{1-z^2}}. \quad (2.38)$$

que possui uma, duas ou três soluções reais para  $\lambda \geq 0$ .

A simetria do hamiltoniano (2.27) e das equações de Hamilton (2.34,2.35) em relação a troca  $(z, \phi) \rightarrow (-z, -\phi)$ , quando  $\beta = 0$ , sugere o aparecimento de uma bifurcação de forquilha [39]. Esta bifurcação ocorre em  $\phi = N\pi/2$  e  $\lambda = 1$ , quando passamos de uma para três soluções. Uma das soluções sempre ocorre em  $z_{bif} = 0$  para qualquer valor de  $\lambda$ . As outras duas soluções são simétricas em relação a  $z_{bif}$  e são dadas pela equação abaixo,

$$z = \pm \sqrt{1 - \frac{1}{\lambda^2}}, \quad z \neq \pm 1; \quad \lambda > 1. \quad (2.39)$$

Os pontos críticos (2.39) são máximos locais, enquanto que  $z_{bif}$  é um máximo para  $0 \leq \lambda \leq 1$  e um ponto de sela para  $\lambda > 1$ . Devido a mudança da estabilidade do ponto crítico  $z_{bif} = 0$  após o ponto de bifurcação e o aparecimento de dois pontos críticos, esta bifurcação é chamada de *bifurcação de forquilha supercrítica\**. Como esta bifurcação ocorre quando variamos os dois parâmetros,  $\lambda$  e  $\beta$ , dizemos que ela tem codimensão 2.

Quando  $\phi = N\pi/2$  e  $\lambda = 0$ , em (2.38), temos sempre uma solução para qualquer valor de  $\beta$ . Esta solução é um máximo local e é dada por

$$z = -\frac{\beta}{\sqrt{1 + \beta^2}}, \quad z \neq \pm 1. \quad (2.40)$$

Quando  $\phi = 0$  e  $\lambda \geq 0$ , em (2.37), temos sempre um mínimo local para qualquer valor de  $\beta$ . Na Fig. 2.1 mostramos as soluções de (2.38) para  $\beta = 0$  e para  $\lambda = 0$ , enquanto que na Fig. 2.5 vemos as curvas de nível do hamiltoniano (2.27) para  $\beta = 0$  e valores de  $\lambda > 1$ . A parte mais clara na Fig. 2.5, as duas ilhas em  $\phi = N\pi/2$  são os máximos e a parte mais escura, em  $\phi = 0$ , é o mínimo. O ponto de sela está entre os dois máximos em  $\phi = N\pi/2$  e  $z_{bif} = 0$ .

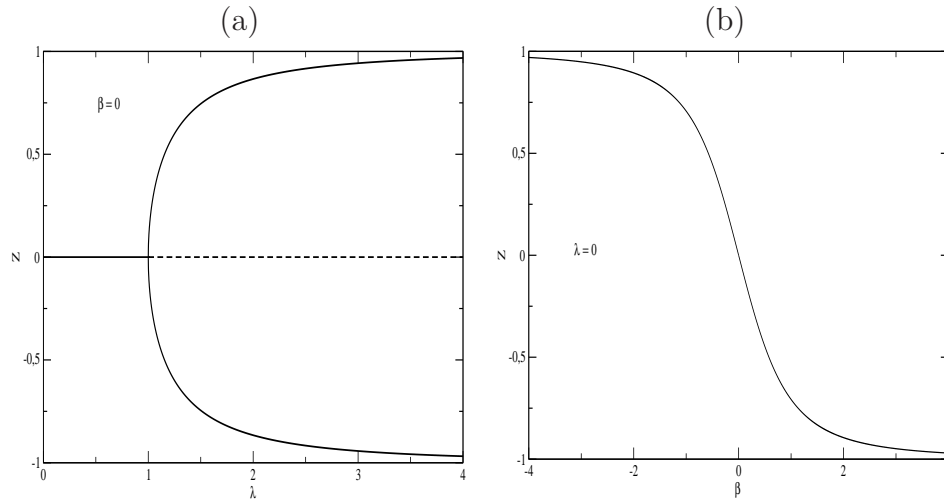
A variação do número de soluções da equação (2.38), para  $\phi = N\pi/2$ , em função do valor dos parâmetros  $\lambda$  e  $\beta$ , permite-nos dividir o espaço de parâmetros em duas regiões. Considerando  $f(z) = \lambda z - \beta$  e  $g(z) = z(1 - z^2)^{-1/2}$ , a fronteira entre as regiões ocorre quando  $f(z)$  é a linha tangente a  $g(z)$  em algum valor  $z_0$ . Uma análise padrão mostra que isto ocorre quando  $\lambda = g'(z_0) = (1 - z_0^2)^{-3/2}$ . Exigindo que  $f(z_0) = g(z_0)$ , encontramos a relação

$$\lambda = (1 + |\beta|^{2/3})^{3/2} \quad (2.41)$$

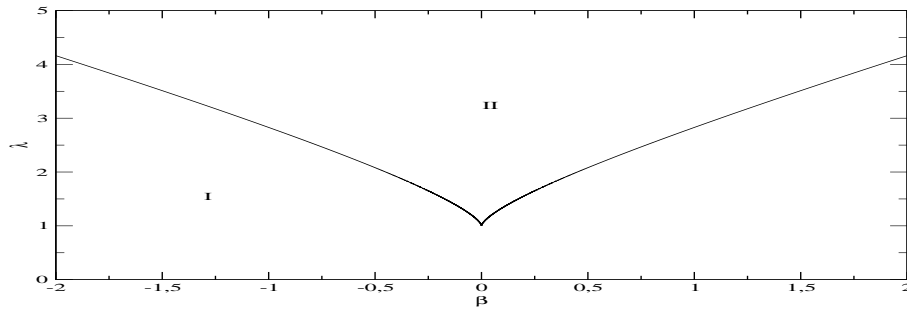
que determina a fronteira. Este resultado é apresentado na Fig. 2.2.

---

\* Para  $\lambda < 0$  e  $\phi = 0$  ocorre o inverso, dois mínimos locais simétricos em relação a  $z_{bif} = 0$  desaparecem após  $\lambda \geq -1$  e a estabilidade de  $z_{bif} = 0$  muda de ponto de sela para mínimo local. Neste último caso temos uma *bifurcação de forquilha subcrítica*



**Fig. 2.1:** Pontos fixos do hamiltoniano (2.27). Em (a),  $\beta = 0$  vemos uma bifurcação de forquilha supercrítica: temos uma solução em  $z_{bif} = 0$  (um máximo local para  $0 \leq \lambda \leq 1$  e um ponto de sela para  $\lambda > 1$ , linha tracejada). Para  $z \neq 0$  temos dois máximos locais simétricos em relação a  $z_{bif}$ . Em (b),  $\lambda = 0$ : temos uma solução (um mínimo local para todo valor de  $\beta$ ).



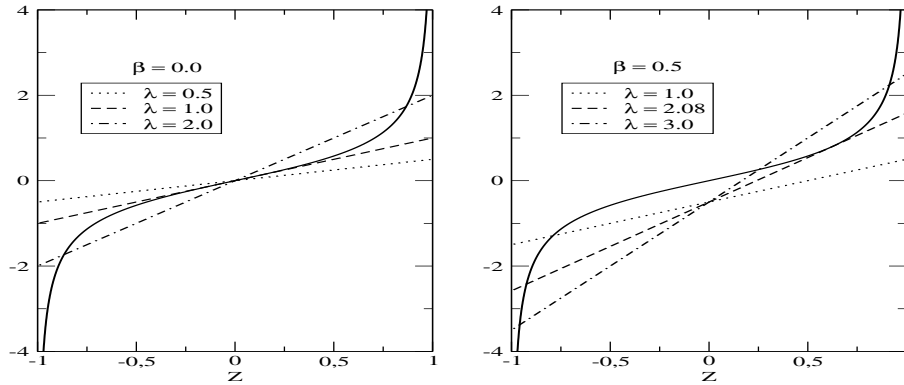
**Fig. 2.2:** Diagrama no espaço de parâmetros identificando os tipos diferentes de soluções para a equação transcendental (2.38).

Para cada região temos,

- Região I: Neste caso, temos apenas uma solução real para a qual o hamiltoniano (2.27) atinge um máximo local.
- Região II: Neste caso, temos três soluções reais. Vemos que devido a simetria (2.32), para  $\beta = 0$ , duas soluções são sempre simétricas em relação a  $z = 0$ . Estas duas

soluções são máximos locais do hamiltoniano. A outra solução é um ponto de sela localizado em  $z = 0$ . Quando o potencial externo é ligado,  $\beta \neq 0$ , a simetria das soluções em relação a  $z = 0$  é quebrada e o ponto de transição de uma região para outra é deslocado de acordo com a curva que separa as duas regiões. Sobre a fronteira (2.41) temos duas soluções para  $\lambda \neq 1$  e uma solução para  $\lambda = 1$  e  $\beta = 0$ .

Na Fig. 2.3 ilustramos dois exemplos de soluções da eq. (2.38) para diferentes valores de  $\beta$  e  $\lambda$  nas regiões I, II e na fronteira. Vemos que para  $\beta = 0$  podemos ter uma ou três soluções, enquanto que para  $\beta \neq 0$  podemos ter uma, duas ou três soluções, dependendo do valor de  $\lambda$ .



**Fig. 2.3:** Solução gráfica da equação transcendental (2.38) para  $\lambda > 0$ . As intersecções das retas (lado esquerdo da eq.(2.38)) com a curva (lado direito da eq.(2.38)) para diferentes valores de  $\lambda$  representam as soluções para cada caso. Para  $\beta = 0$  temos uma solução para  $\lambda \leq 1$  e três soluções para  $\lambda > 1$ . Para  $\beta = 0.5$  temos uma solução para  $\lambda < 2.08$ , duas soluções para  $\lambda = 2.08$  e três soluções para  $\lambda > 2.08$ .

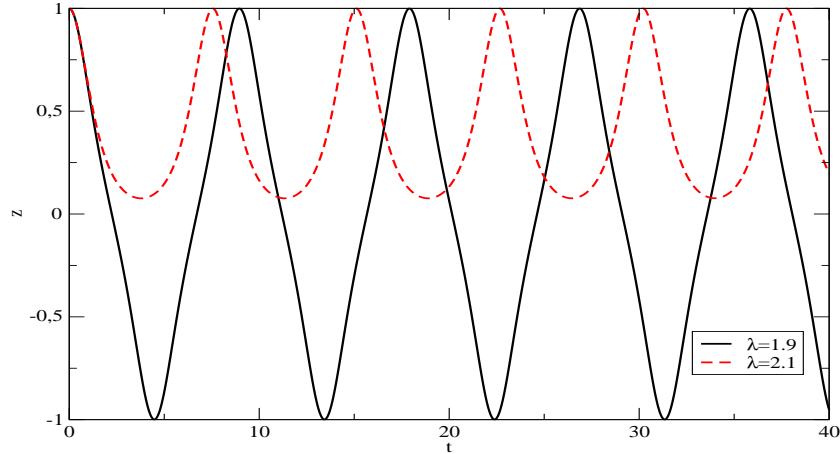
Vamos agora estudar a dinâmica clássica. No que segue vamos considerar as equações de Hamilton (2.34,2.35) na ausência do potencial externo  $\Delta\mu = 0$  ou, equivalentemente  $\beta = 0$ . Vamos integrar as eqs. (2.34,2.35) para encontrar a evolução temporal do número relativo de átomos  $z$ , usando a condição inicial  $z(0) \approx 1$  e  $\phi(0) = 0$ . Plotando  $z$  contra o tempo, é evidente que existe um acoplamento de transição  $\lambda_t = 2$  separando dois comportamentos distintos. Esta mudança na dinâmica pode ser vista na Fig. 2.4:

- para  $\lambda < 2$  o sistema oscila entre  $z = -1$  e  $z = 1$  (oscilações completas). Aqui a evolução é deslocalizada.



- para  $\lambda > 2$  o sistema oscila entre  $z = 0$  e  $z = 1$ . Aqui a evolução é localizada.

A existência desta transição separando duas fases distintas na dinâmica clássica em  $\lambda_t = 2$  foi observada pela primeira vez por G. Milburn em [40].

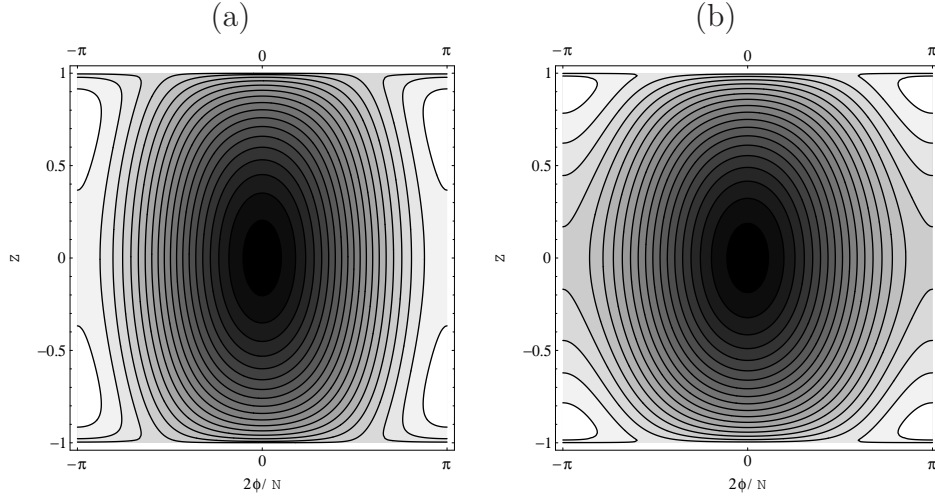


**Fig. 2.4:** *Evolução temporal do número relativo de átomos  $z$ . A linha sólida é para  $\lambda = 1.9$  e a linha tracejada é para  $\lambda = 2.1$ . O valor de acoplamento para a transição entre a fase deslocalizada e a fase localizada ocorre em  $\lambda_t = 2.0$ . Estamos usando  $N = 100$ ,  $\varepsilon_j = 1$  e as condições iniciais  $z(0) \approx 1$  e  $\phi(0) = 0$ .*

Também podemos visualizar esta mudança na dinâmica clássica através das curvas de nível, que são curvas de energia constante do hamiltoniano (2.27) no espaço de fase. Na Fig. 2.5 plotamos as curvas de nível para diferentes valores de  $\lambda$  antes e após o ponto de transição. Observamos claramente dois cenários distintos:

- $\lambda < 2$ : Neste caso, partindo da condição inicial  $z(0) \approx 1$  e  $\phi(0) = 0$  temos uma órbita fechada com oscilações completas no intervalo  $z \in (-1, 1)$  indicando uma fase deslocalizada.
- $\lambda > 2$ : Neste caso, partindo da condição inicial  $z(0) \approx 1$  e  $\phi(0) = 0$  não temos oscilações completas, com  $z$  confinado no intervalo  $[0, 1)$ , indicando uma fase localizada (ou auto-aprisionada).

O acoplamento de transição  $\lambda_t = 2.0$  ( ou  $K/\varepsilon_j = 4/N$  em termos dos parâmetros originais) separa dois comportamentos da dinâmica bem distintos. Este mesmo valor para a transição entre uma fase deslocalizada e uma fase de auto-aprisionamento irá ocorrer também na dinâmica quântica, como será mostrado na próxima seção.



**Fig. 2.5:** *Curvas de nível do hamiltoniano (2.27) para (a)  $\lambda = 1.5$  (abaixo do ponto de transição) e (b)  $\lambda = 2.5$  (acima do ponto de transição). Usamos  $N = 100$ ,  $\beta = 0$  e  $\varepsilon_j = 1$ .*

## 2.4 Dinâmica quântica

Nesta seção estudaremos a dinâmica quântica do hamiltoniano (2.4) usando o método de diagonalização exata, que permite um estudo de todos os regimes de acoplamento. A evolução temporal de qualquer quantidade física é dada pelo operador evolução temporal  $U(t)$ ,

$$U(t) = \sum_{n=0}^N e^{-i\lambda_n t} |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|, \quad (2.42)$$

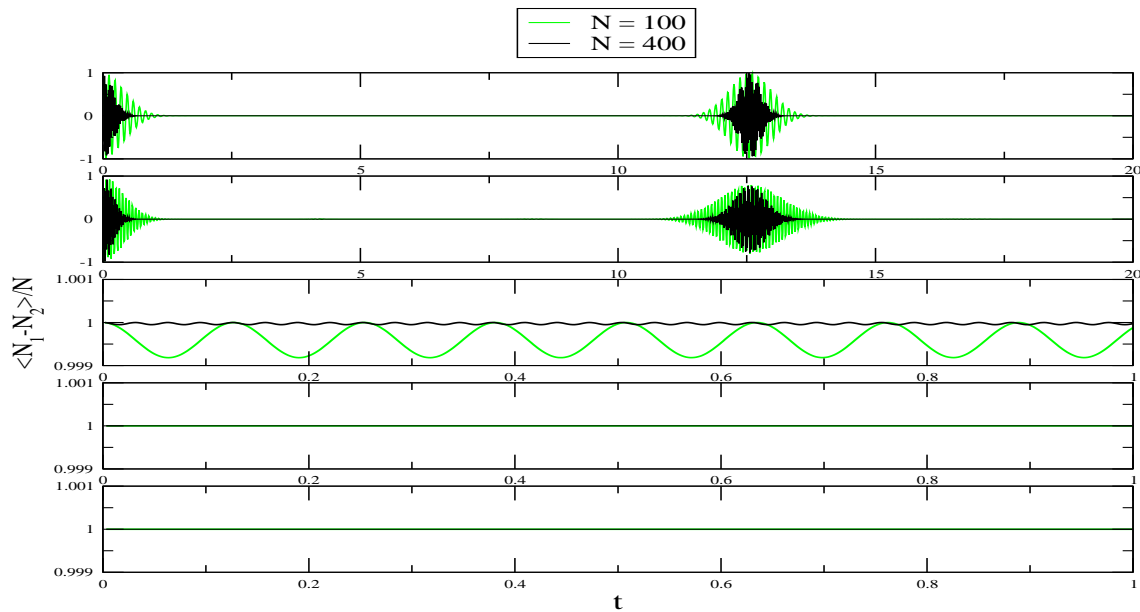
onde  $\lambda_n$  e  $|\Psi_n\rangle$  são os autovalores e autovetores do hamiltoniano (2.4). Portanto a evolução temporal de qualquer estado pode ser calculada por

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^N a_n e^{-i\lambda_n t} |\Psi_n\rangle, \quad (2.43)$$

onde  $a_n = \langle \Psi_n | \phi \rangle$  e  $|\phi\rangle$  representa o estado inicial. Usando as equações (2.42) e (2.43) podemos calcular a evolução temporal do valor esperado de qualquer observável representado por um operador auto-adjunto. A dependência temporal do valor esperado de qualquer operador  $A$  é calculada usando a expressão

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle. \quad (2.44)$$

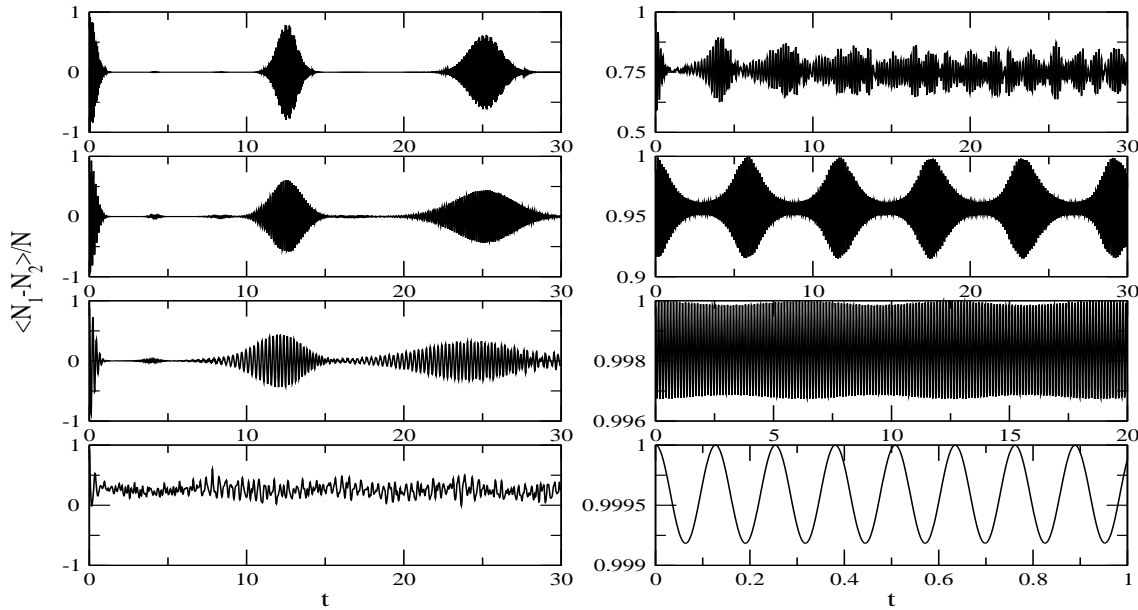
Usando (2.44) juntamente com os autovalores e autovetores obtidos diretamente da diagonalização numérica do hamiltoniano (2.4), investigaremos a dinâmica quântica do valor esperado do operador número relativo de átomos entre os condensados  $(N_1 - N_2)/N$  na ausência do potencial externo  $\Delta\mu = 0$  nos regimes Rabi, Josephson, Fock e em regimes intermediários. Na Fig. 2.6, verificamos que o comportamento qualitativo em cada região não depende do número total de átomos  $N$ .



**Fig. 2.6:** *Evolução temporal do valor esperado para o número relativo de átomos entre os dois condensados para diferentes razões dos parâmetros de acoplamento  $K/\varepsilon_j$ . De cima (regime Rabi) para baixo (regime Fock):  $K/\varepsilon_j = 1/N^2, 1/N, 1, N, N^2$  para  $N = 100, 400$  átomos e estado inicial  $|N, 0\rangle$ .*

Observamos também a existência de curvas do tipo "colapso e ressurgimento", presentes em experimentos/simulações [41]. Encontramos que no intervalo  $K/\varepsilon_j \in [1/N^2, 1/N]$ , próximo ao regime de Rabi, o tempo de colapso e ressurgimento é constante e igual a  $t_{cr} = 4\pi$ . No intervalo  $K/\varepsilon_j \in [1/N, 1]$  a dinâmica se altera, passando a apresentar oscilações harmônicas de pequena amplitude. A amplitude das oscilações diminui a medida que a razão  $K/\varepsilon_j$  aumenta em direção ao regime de Fock. Neste ponto os átomos permanecem localizados na configuração inicial dos condensados. O comportamento mais interessante na dinâmica quântica ocorre quando  $K/\varepsilon_j$  varia entre  $1/N$  e  $1$ , isto é, entre os regimes de Rabi e Josephson. Com o objetivo de visualizar melhor o que ocorre nesta região, apre-

sentamos na Fig. 2.7 a evolução temporal do valor esperado do operador número relativo de átomos entre os condensados para diversos valores intermediários de  $K/\varepsilon_j$  entre  $1/N$  e 1.



**Fig. 2.7:** Evolução temporal do valor esperado para o número relativo de átomos entre os dois condensados para diferentes razões dos parâmetros de acoplamento entre  $K/\varepsilon_j = 1/N$  e  $K/\varepsilon_j = 1$ . No lado esquerdo e de cima para baixo,  $K/\varepsilon_j = 1/N, 2/N, 3/N, 4/N$ . No lado direito e de cima para baixo,  $K/\varepsilon_j = 5/N, 10/N, 50/N, 1$ . Estamos usando  $N = 100$  átomos e estado inicial  $|N, 0\rangle$ .

Podemos verificar que quando  $K/\varepsilon_j < 4/N$  o valor médio do número relativo de átomos é zero e a amplitude de oscilação varia entre valores positivos e negativos. Isto significa que os átomos podem ir de um condensado ao outro (tunelamento). Quando  $K/\varepsilon_j = 4/N$  existe claramente uma mudança no comportamento da dinâmica. Quando  $K/\varepsilon_j > 4/N$  o valor médio do número relativo de átomos se torna diferente de zero (positivo) e a amplitude de oscilação diminui consideravelmente, variando apenas entre valores positivos. Aqui temos a situação em que os átomos ficam aprisionados em um dos condensados (auto-aprisionamento). Da Fig. 2.7 fica evidente que existe um acoplamento de transição em  $K/\varepsilon_j = 4/N$ , predito na análise clássica separando uma evolução deslocalizada ou com tunelamento ( $K/\varepsilon_j < 4/N$ ) de uma evolução localizada ou auto-aprisionada ( $K/\varepsilon_j > 4/N$ ).

## 2.5 Conclusão

Neste capítulo apresentamos a solução exata (equações do ansatz de Bethe e energias) para um modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson. Também fizemos uma análise das dinâmicas clássicas e quânticas do modelo e mostramos que, apesar da simplicidade aparente do modelo, propriedades físicas relevantes como o tunelamento e o auto-aprisionamento são observadas. Parte destes resultados é original e foi publicada em:

- Jon Links; Angela Foerster; Arlei Prestes Tonel; Gilberto Santos. The two-site Bose-Hubbard model. **Annales Henri Poincaré**, Basel, v. 7, n. 7/8, p. 1591-1600, Nov. 2006.

## Capítulo 3

# Modelo para condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular

### 3.1 Hamiltoniano

O hamiltoniano integrável mais geral que descreve a conversão de átomos em moléculas diatômicas e a dissociação destas moléculas, num condensado de Bose-Einstein com átomos idênticos é [31],

$$H = U_a N_a^2 + U_b N_b^2 + U_{ab} N_a N_b + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \Omega(a^\dagger a^\dagger b + b^\dagger a a), \quad (3.1)$$

onde  $a^\dagger$  e  $a$  são os operadores de criação e destruição de átomos enquanto que  $b^\dagger$  e  $b$  são os operadores de criação e destruição de moléculas, respectivamente. O número de átomos não ligados e o de moléculas são representados por  $N_a = a^\dagger a$  e  $N_b = b^\dagger b$ , respectivamente. Como o hamiltoniano (3.1) não depende explicitamente do tempo e comuta com o número total de átomos  $N = N_a + 2N_b$ , temos que  $N$  é conservado. Os parâmetros  $U_a$ ,  $U_b$  e  $U_{ab}$  descrevem a interação entre átomos, entre moléculas e entre átomos e moléculas, respectivamente. Os  $\mu_i$ 's são potenciais externos e  $\Omega$  é a amplitude de interconversão de átomos em moléculas e vice-versa. Note que a mudança no sinal  $\Omega \rightarrow -\Omega$  é equivalente a transformação unitária

$$b \rightarrow -b. \quad (3.2)$$

Na ausência das interações do tipo átomo-átomo, átomo-molécula e molécula-molécula,  $U_a = U_{ab} = U_b = 0$ , e do potencial externo  $\mu_b = 0$ , o hamiltoniano (3.1) tem a forma simplificada,

$$H = \mu_a N_a + \Omega(a^\dagger a^\dagger b + b^\dagger a a), \quad (3.3)$$

com o potencial externo  $\mu_a$  sendo considerado como a energia de ligação entre os átomos. Este hamiltoniano simplificado (3.3) foi estudado usando diferentes métodos, como diagonalização numérica [33], aproximação de campo médio [42] e o método algébrico do ansatz de Bethe [43]. Contudo, as interações do tipo átomo-átomo, átomo-molécula e molécula-molécula são particularmente importantes, uma vez que a introdução destes parâmetros torna o modelo mais realístico e próximo aos experimentos. Apesar de não se saber, em geral, os valores de  $U_b$  e  $U_{ab}$ , [45, 46], já existem algumas estimativas para o caso do  $^{85}\text{Rb}$  [44]. Neste capítulo vamos mostrar que a inclusão destes parâmetros produz consequências interessantes e não triviais.

## 3.2 Integrabilidade e solução exata

Mostraremos nesta seção que o hamiltoniano (3.1) é integrável e apresentaremos as equações do ansatz de Bethe e o espectro de autovalores de energia do modelo em questão.

Partimos da matriz  $R$  com invariância  $SU(2)$ , dependendo do parâmetro espectral  $u$ ,

$$R(u) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(u) & c(u) & 0 \\ 0 & c(u) & b(u) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

onde  $b(u) = u/(u + \eta)$ ,  $c(u) = \eta/(u + \eta)$  e  $\eta$  é um parâmetro arbitrário. A matriz  $R$  (3.4) satisfaz a equação de Yang-Baxter

$$R_{12}(u - v)R_{13}(u)R_{23}(v) = R_{23}(v)R_{13}(u)R_{12}(u - v), \quad (3.5)$$

com  $R_{jk}(u)$  agindo não trivialmente sobre os  $j$ -ésimo e  $k$ -ésimo espaços e como identidade sobre o espaço restante. Esta é a notação usual, já utilizada no capítulo anterior.

A partir da matriz  $R$  (3.4) devemos encontrar uma matriz de monodromia  $T(u)$ ,

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

tal que a álgebra de Yang-Baxter para a matriz de monodromia seja obedecida

$$R_{12}(u - v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u - v). \quad (3.7)$$

Seguindo [31, 36] escolhemos uma realização para a matriz de monodromia  $T(u)$  (3.6) em termos dos geradores da álgebra  $su(1|1)$  e do operador  $L$  (Apêndice A),

$$L(u) = \pi(T(u)) = \eta^{-1}gL^b(u - \delta - \eta^{-1})L^K(u), \quad (3.8)$$

onde  $g = \text{diag}(-, +)$ ,

$$L^b(u) = \begin{pmatrix} u + \eta N_b & b \\ b^\dagger & \eta^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

e

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

Explicitamente, temos



$$L(u) = \begin{pmatrix} -\eta^{-1}(u + \eta K^z)(u - \delta - \eta^{-1} + \eta N_b) + bK^+ & -K^-(u - \delta - \eta^{-1} + \eta N_b) - \eta^{-1}b(u - \eta K^z) \\ \eta^{-1}b^\dagger(u + \eta K^z) - \eta^{-1}K^+ & b^\dagger K^- + \eta^{-2}(u - \eta K^z) \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Pode-se mostrar que o operador  $L$  (3.8) satisfaz a álgebra

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

e conseqüentemente a álgebra de Yang-Baxter (3.7) também é obedecida.

Uma representação explícita dos elementos da matriz de monodromia  $T(u)$  (3.6) é obtida a partir de (3.8) e (3.11) com a identificação

$$A(u) = -\eta^{-1}(u + \eta K^z)(u - \delta - \eta^{-1} + \eta N_b) + bK^+, \quad (3.13)$$

$$B(u) = -K^-(u - \delta - \eta^{-1} + \eta N_b) - \eta^{-1}b(u - \eta K^z), \quad (3.14)$$

$$C(u) = \eta^{-1}b^\dagger(u + \eta K^z) - \eta^{-1}K^+, \quad (3.15)$$

$$D(u) = b^\dagger K^- + \eta^{-2}(u - \eta K^z). \quad (3.16)$$

Definindo a matriz de transferência de forma usual como

$$t(u) = \pi(\text{tr}T(u)) = \text{tr}L(u) = A(u) + D(u), \quad (3.17)$$

encontramos explicitamente

$$t(u) = -\eta^{-1}(u + \eta K^z)(u - \delta - \eta^{-1} + \eta N_b) + \eta^{-2}(u - \eta K^z) + bK^+ + b^\dagger K^-. \quad (3.18)$$

Usando a álgebra de Yang Baxter para a matriz de monodromia (3.7), pode-se mostrar que o modelo (3.1) é integrável, isto é, a matriz de transferência comuta a diferentes valores do parâmetro espectral,  $[t(u), t(v)] = 0$ . Em particular, escolhendo  $u = 0$  temos

$$t(0) = \delta K^z + b^\dagger K^- + bK^+ - \eta K^z N_b. \quad (3.19)$$

Utilizando uma realização da álgebra  $su(1|1)$  em termos dos operadores bosônicos canônicos,

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

a matriz de transferência (3.19) pode ser reescrita como

$$2\Omega t(0) = 2\Omega \left[ \delta - \eta \left( \frac{N}{2} + \frac{1}{4} \right) \right] K^z + 2\Omega \eta (K^z)^2 + \Omega (a^\dagger a^\dagger b + b^\dagger a a), \quad (3.20)$$

Agora, pode-se mostrar facilmente que o hamiltoniano (3.1) para condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular pode ser obtido a partir da matriz de transferência (3.20) através da seguinte relação

$$H = \sigma + \xi\mathcal{N} + \gamma\mathcal{N}^2 + 2\Omega t(0), \quad (3.21)$$

onde foi feita a seguinte identificação entre os parâmetros

$$\mathcal{N} = \frac{N}{2} + \frac{1}{4}, \quad (3.22)$$

$$\sigma = \frac{U_a - 2\mu_a}{4}, \quad (3.23)$$

$$\gamma = U_b, \quad (3.24)$$

$$\xi = \frac{2\mu_b - U_{ab}}{2}, \quad (3.25)$$

$$\eta = \frac{4U_a - 2U_{ab} + U_b}{2\Omega}, \quad (3.26)$$

$$\alpha = \frac{U_{ab} - U_b}{\Omega}, \quad (3.27)$$

$$\beta = \frac{U_{ab} + 4\mu_a - 2\mu_b - 4U_a}{4\Omega}, \quad (3.28)$$

$$\delta = (\alpha + \eta)\mathcal{N} + \beta. \quad (3.29)$$

Aplicando o método algébrico do ansatz de Bethe, de forma similar ao realizado no capítulo anterior, encontramos as equações do ansatz de Bethe

$$\frac{(v_i + \eta k)(1 + \eta\delta - \eta v_i)}{v_i - \eta k} = \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad (3.30)$$

e o espectro de energia do hamiltoniano (3.21)

$$E = \sigma + \xi\mathcal{N} + \gamma\mathcal{N}^2 + 2\Omega k(\eta^{-1} + \delta) \prod_{i=1}^M \frac{v_i - \eta}{v_i} - 2\Omega k\eta^{-1} \prod_{i=1}^M \frac{v_i + \eta}{v_i}. \quad (3.31)$$

### 3.3 Dinâmica clássica

Nesta seção vamos fazer uma análise clássica do modelo (3.1) para condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular. Em particular vamos estudar os pontos fixos e as curvas de nível.

#### 3.3.1 Hamiltoniano

Sejam  $N_j, \theta_j$ , ( $j = a, b$ ) operadores que satisfazem a relação de comutação canônica

$$[\theta_j, \theta_k] = [N_j, N_k] = 0, \quad [N_j, \theta_k] = i\delta_{jk}, \quad (j, k = a, b).$$

Usando o fato que

$$[\exp(i\phi_j), N_k] = \delta_{jk} \exp(i\phi_j) \Rightarrow \exp(i\theta_j)N_j = (N_j + 1) \exp(i\theta_j),$$

fazemos uma transformação dos operadores bosônicos  $j, j^\dagger$ , ( $j = a, b$ ) para

$$j = \exp(i\theta_j)\sqrt{N_j}, \quad (3.32)$$

$$j^\dagger = \sqrt{N_j} \exp(-i\theta_j), \quad (3.33)$$

tal que as relações de comutação canônicas de Heisenberg sejam preservadas. Aplicando esta transformação (3.32,3.33) ao hamiltoniano (3.1) e definindo os operadores,

$$z = \frac{1}{N}(N_a - 2N_b), \quad (3.34)$$

$$\theta = \frac{N}{4}(2\theta_a - \theta_b), \quad (3.35)$$

tal que  $z$  e  $\theta$  sejam variáveis canonicamente conjugadas, isto é,

$$[z, \theta] = i, \quad (3.36)$$

podemos escrever o hamiltoniano em termos das novas variáveis como

$$H = \Omega \left(\frac{N}{2}\right)^{3/2} \left[ \lambda z^2 + 2\alpha z + \beta + \sqrt{2(1-z)}(1+z) \cos\left(\frac{4\theta}{N}\right) \right], \quad (3.37)$$

onde

$$\lambda = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} - \frac{U_{ab}}{4} + \frac{U_b}{8} \right), \quad (3.38)$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} - \frac{U_b}{8} + \frac{\mu_a}{2N} - \frac{\mu_b}{4N} \right), \quad (3.39)$$

$$\beta = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} + \frac{U_{ab}}{4} + \frac{U_b}{8} + \frac{\mu_a}{N} + \frac{\mu_b}{2N} \right), \quad (3.40)$$

com  $z$  representando a diferença entre o número relativo de átomos no estado não ligado e o número relativo de átomos no estado ligado (moléculas diatômicas). O hamiltoniano (3.37) obedece as seguintes simetrias,

$$H(z, \theta)|_{\lambda, \alpha, \beta} = H(z, -\theta)|_{\lambda, \alpha, \beta}, \quad (3.41)$$

$$H(z, \theta)|_{\lambda, \alpha, \beta} = -H(z, \theta + N\pi/4)|_{-\lambda, -\alpha, -\beta} \quad (3.42)$$

No que segue, iremos restringir nossa análise para o caso  $\lambda > 0$ .

### 3.3.2 Pontos fixos

Agora, considerando o hamiltoniano (3.37) como um hamiltoniano clássico vamos investigar os pontos fixos do sistema. As equações de Hamilton podem ser obtidas da forma usual, e são dadas por

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \theta} = -2\Omega\sqrt{N}\sqrt{1-z}(1+z)\sin\left(\frac{4\theta}{N}\right), \quad (3.43)$$

$$-\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial z} = \Omega\left(\frac{N}{2}\right)^{3/2}\left[2\lambda z + 2\alpha + \frac{1-3z}{\sqrt{2(1-z)}}\cos\left(\frac{4\theta}{N}\right)\right]. \quad (3.44)$$

Os pontos fixos do sistema são determinados pela condição

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \frac{\partial H}{\partial z} = 0. \quad (3.45)$$

Devido a periodicidade das soluções, nos limitaremos a  $\theta \in [0, N\pi/2)$ . Isto nos leva a seguinte classificação:

- $\theta = \frac{N\pi}{4}$  e  $z$  é uma solução de

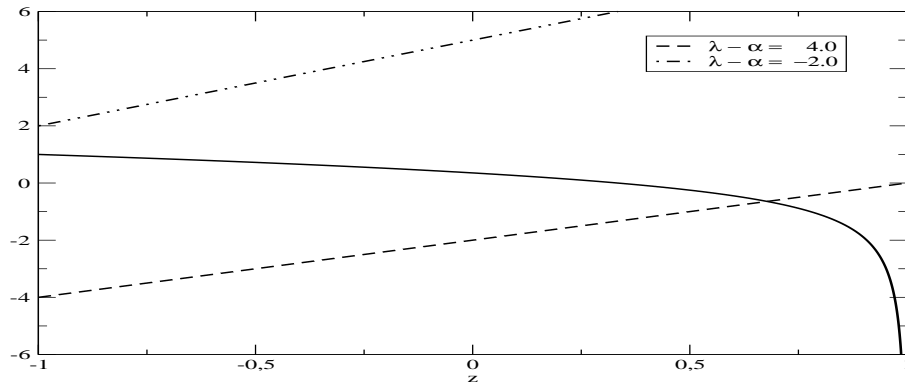
$$\lambda z + \alpha = \frac{1-3z}{2\sqrt{2(1-z)}} \quad (3.46)$$

que não tem solução para  $\lambda - \alpha < -1$  e tem uma solução (mínimo local) para  $\lambda - \alpha \geq -1$ . Este comportamento é ilustrado na Fig. 3.1.

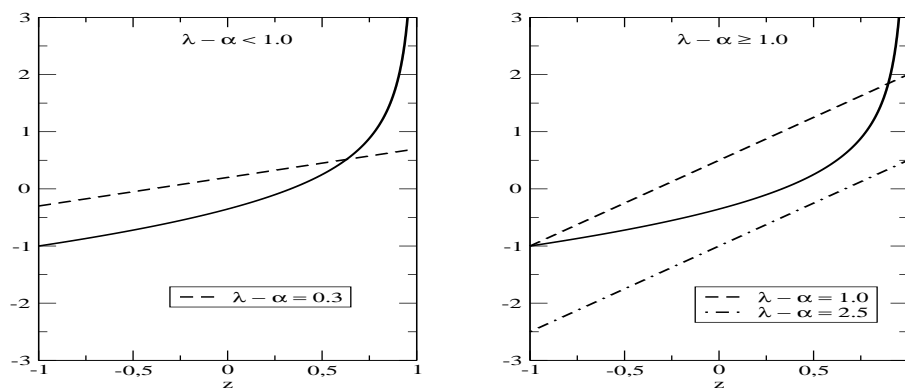
- $\theta = 0$  e  $z$  é uma solução de

$$\lambda z + \alpha = \frac{3z-1}{2\sqrt{2(1-z)}} \quad (3.47)$$

que tem uma solução (máximo local) para  $\lambda - \alpha < 1$ , enquanto que para  $\lambda - \alpha \geq 1$  apresenta duas soluções (um máximo local e um ponto de sela) ou nenhuma solução. Na Fig. 3.2 apresentamos um exemplo da solução gráfica da equação (3.47).



**Fig. 3.1:** Solução gráfica da equação transcendental (3.46). A intersecção entre a reta (lado esquerdo da eq.(3.46)) e a curva (lado direito da eq.(3.46)) para diferentes valores de  $\lambda - \alpha$  representa a solução para cada caso. Não existe solução para  $\lambda - \alpha < -1$  e encontramos uma solução para  $\lambda - \alpha \geq -1$ .



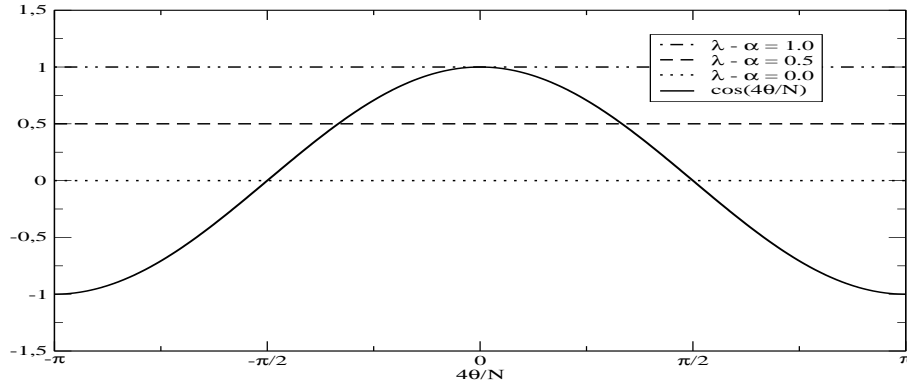
**Fig. 3.2:** Solução gráfica da equação transcendental (3.47). A intersecção entre a reta (lado esquerdo da eq.(3.47)) e a curva (lado direito da eq.(3.47)) para diferentes valores de  $\lambda - \alpha$  representa a solução (ou soluções) para cada caso. Temos apenas uma solução na figura do lado esquerdo ( $\lambda - \alpha < 1$ ), enquanto que podemos ter duas soluções ou nenhuma solução na figura do lado direito ( $\lambda - \alpha \geq 1$ ).

- $z = -1$  e  $\theta$  é uma solução de

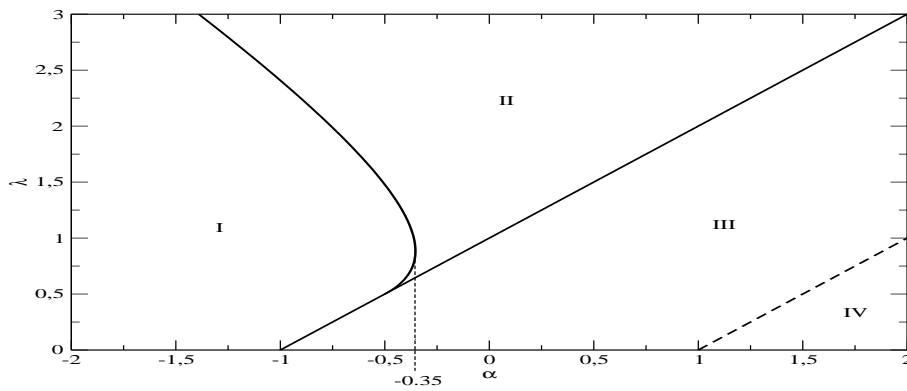
$$\cos\left(\frac{4\theta}{N}\right) = \lambda - \alpha \quad (3.48)$$

onde temos duas soluções do tipo ponto de sela para  $|\lambda - \alpha| < 1$ , conforme ilustramos na Fig. 3.3.

A análise dos pontos fixos apresentada acima nos permite dividir o espaço de parâmetros em quatro regiões, conforme a Fig. 3.4



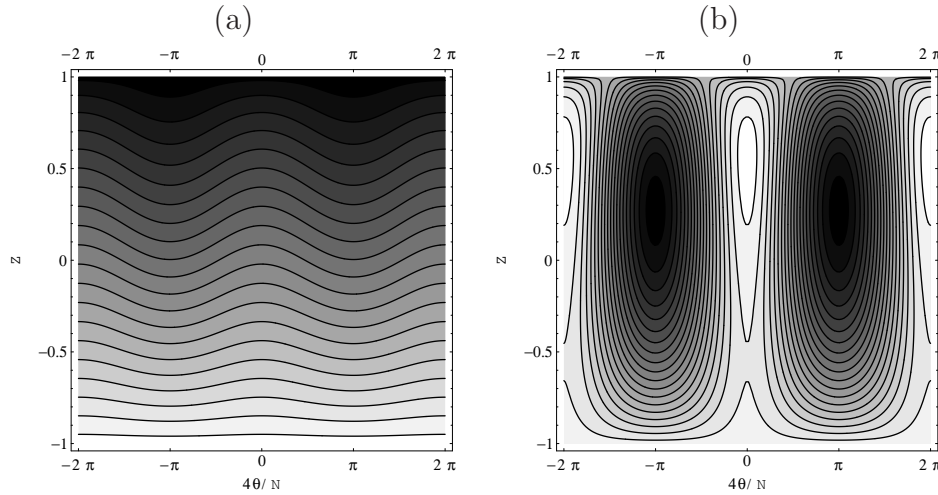
**Fig. 3.3:** Solução gráfica da equação transcendental (3.48). A intersecção da reta (lado direito da eq.(3.48)) com a curva (lado esquerdo da eq.(3.48)) para diferentes valores de  $\lambda - \alpha$  representa a solução (soluções) para  $z = -1$  e  $\theta \in [-\pi, \pi]$ . Temos uma solução em  $(z = -1, \theta = 0)$  para  $\lambda - \alpha = 1$  e duas soluções simétricas em  $(z = -1, 4\theta/N = \pm\theta_0)$  para  $|\lambda - \alpha| < 1$ . Não temos solução em  $z = -1$  para  $|\lambda - \alpha| > 1$ .



**Fig. 3.4:** Diagrama no espaço de parâmetros identificando os tipos diferentes de solução para a equação (3.47). Na região I não existe solução para  $z$  quando  $\theta = 0$ , e temos uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/4$ . Na região II existem duas soluções para  $z$  quando  $\theta = 0$ , e uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/4$ . Na região III existe uma solução para  $z$  quando  $\theta = 0$ , uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/4$  e duas soluções para  $\theta$  quando  $z = -1$ . Na região IV temos uma solução para  $z$  quando  $\theta = 0$  e nenhuma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/4$ . A fronteira separando as regiões II e III é dada por  $\lambda = \alpha + 1$ , enquanto que a fronteira separando as regiões III e IV é dada por  $\lambda = \alpha - 1$ . A fronteira entre as regiões I e II foi obtida numericamente.

### 3.3.3 Curvas de nível

Para visualizar melhor a dinâmica clássica, é útil plotar as curvas de nível do hamiltoniano (3.37). Uma vez que os pontos fixos alteram a topologia das curvas de nível, diferenças qualitativas podem ser observadas em cada uma das quatro regiões. Estes resultados são apresentados nas Figs. 3.5 e 3.6, onde por clareza usamos  $4\theta/N \in [-2\pi, 2\pi]$ .

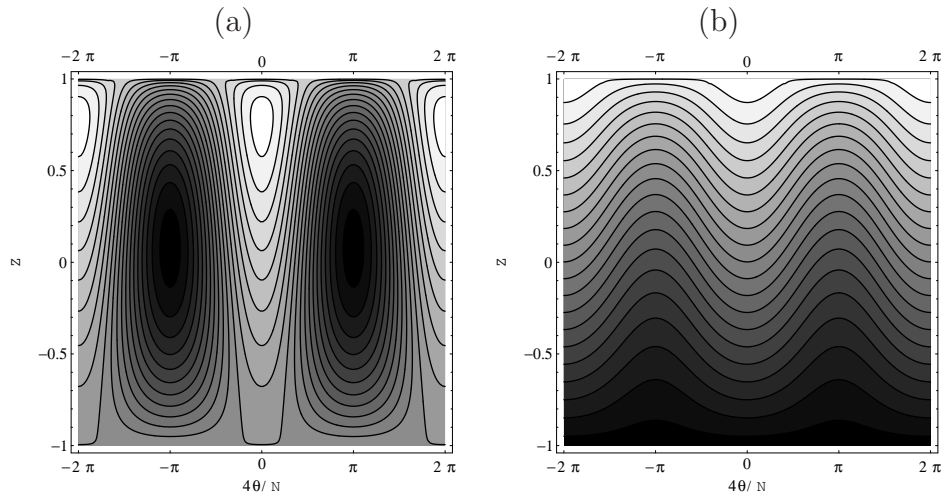


**Fig. 3.5:** *Curvas de nível do hamiltoniano (3.37), em (a) região I e (b) região II. Os valores dos parâmetros são  $\lambda = 1.0$ ,  $\alpha = -8.0$  para a região I e  $\lambda = 1.0$ ,  $\alpha = -0.2$  para a região II. Na região I observamos a presença de um mínimo local em  $4\theta/N = \pm\pi$ . Além do mínimo em  $4\theta/N = \pm\pi$ , dois pontos fixos adicionais (um máximo e um ponto de sela) podem ser observados na região II, aparecendo em  $\theta = 0$ .*

A Fig. 3.5a mostra o caráter típico das curvas de nível na região I. Se o estado inicial do sistema é  $z \approx 1$  então  $z$  deve permanecer próximo a 1 para todo tempo subsequente. Uma situação similar também ocorre se o estado inicial do sistema é  $z \approx -1$ . Em ambos os casos vemos que a evolução temporal do sistema é localizada. Quando os parâmetros de acoplamento são modificados e o sistema cruza a fronteira para a região II, dois novos pontos fixos, um máximo e um ponto de sela, surgem em  $\theta = 0$ . À medida que os parâmetros são alterados em direção à região III, o máximo move-se em direção a fronteira do espaço de fase  $z = 1$  enquanto que o ponto de sela aproxima-se de  $z = -1$ . Também os dois mínimos afastam-se da fronteira do espaço de fase  $z = -1$ , como esboçado na Fig. 3.5b. Na região II, se o estado inicial do sistema é  $z \approx -1$  a evolução do sistema ainda é localizada, mas para um estado inicial com  $z \approx 1$  a evolução torna-se deslocalizada. A Fig. 3.6a ilustra o



que acontece quando os parâmetros de acoplamento são variados da região II para a região III. O ponto de sela em  $\theta = 0$  aproxima-se de  $z = -1$ , atingindo a fronteira do espaço de fase exatamente quando os parâmetros de acoplamento estão na fronteira entre as regiões II e III. O ponto de sela sofre então uma bifurcação em dois pontos de sela ocorrendo em  $z = -1$  para diferentes valores de  $\theta$  na região III. Os dois mínimos se afastam de  $z = 1$  em direção a  $z = -1$ . Agora a dinâmica é deslocalizada para ambos os estados iniciais  $z \approx 1$  e  $z \approx -1$ . Movendo-se da região III em direção a região IV faz com que os dois pontos de sela para  $z = -1$  movam-se em direção a  $\theta = \pm N\pi/4$ . Os dois mínimos para  $\theta = \pm N\pi/4$  movem-se em direção a  $z = -1$ . Cada mínimo converge com um ponto de sela exatamente quando os parâmetros estão sobre as regiões III e IV. Variando os parâmetros de acoplamento na região IV encontramos que os mínimos para o hamiltoniano se localizam em  $z = -1$  e  $\theta = \pm N\pi/4$ , e o máximo local para  $\theta = 0$  fica próximo a  $z = 1$ , como mostrado na Fig. 3.6b. Para este caso a dinâmica é localizada para ambos os estados iniciais  $z \approx 1$  e  $z \approx -1$ .



**Fig. 3.6:** *Curvas de nível do hamiltoniano (3.37), em (a) região III e (b) região IV. Os valores dos parâmetros são  $\lambda = 1.0$ ,  $\alpha = 0.2$  para a região III e  $\lambda = 1.0$ ,  $\alpha = 3.0$  para a região IV. Na região III observamos a presença dos mínimos em  $4\theta/N = \pm\pi$  e um máximo em  $\theta = 0$ . Temos também pontos de sela quando  $z = -1$ . Na região IV apenas um ponto fixo (um máximo) aparece em  $\theta = 0$ , que sempre ocorre para  $z < 1$ . Um mínimo aparece agora em  $z = -1$ .*

A discussão acima fornece uma descrição geral qualitativa do comportamento dinâmico do hamiltoniano clássico (3.37) em termos das quatro regiões identificadas no espaço de

parâmetros, Fig. 3.4. Enfatizamos que as mudanças na dinâmica clássica que ocorrem quando cruzamos a fronteira entre duas regiões são suaves. Também não observamos nenhuma mudança abrupta na dinâmica clássica, como a observada no modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados do capítulo anterior (Fig. 2.4).

### 3.4 Dinâmica quântica

Nesta seção estudaremos a dinâmica quântica do hamiltoniano (3.1) usando o método da diagonalização exata. Em particular, iremos investigar o comportamento da dinâmica nas quatro regiões definidas na seção anterior. Como já vimos no capítulo anterior, a evolução temporal de qualquer quantidade física é dada pelo operador evolução temporal  $U(t)$ ,

$$U(t) = \sum_{n=0}^M e^{-i\lambda_n t} |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|, \quad (3.49)$$

onde  $\lambda_n$  e  $|\Psi_n\rangle$  são os autovalores e autovetores do hamiltoniano (3.1).

Portanto, a evolução temporal de qualquer estado pode ser calculada por,

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\phi\rangle. \quad (3.50)$$

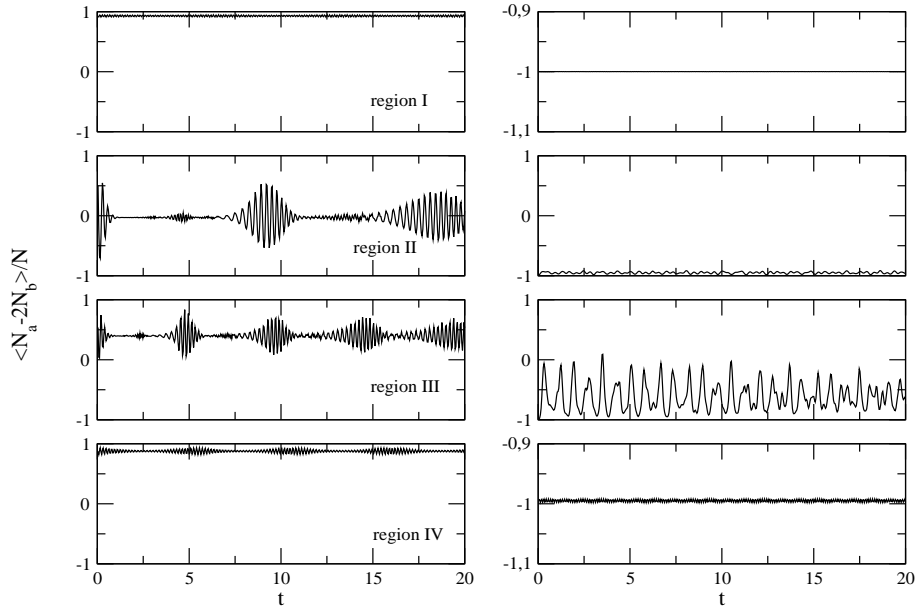
onde  $|\phi\rangle = |N_a, N_b\rangle$  representa o estado inicial com  $N_a$  átomos não ligados e  $N_b$  moléculas, tal que  $N_a + 2N_b = N$ . Usando as equações (3.49) e (3.50) calculamos o valor esperado da diferença entre o número de átomos não ligados e o número de moléculas no condensado,

$$\langle N_a(t) - 2N_b(t) \rangle = \langle \Psi(t) | N_a - 2N_b | \Psi(t) \rangle, \quad (3.51)$$

usando dois tipos de estados iniciais: um puramente atômico e um puramente molecular.

Na Fig. 3.7 plotamos o valor esperado da diferença entre o número de átomos não ligados e o número de moléculas para  $\lambda = 1.0$  e  $\alpha = -8.0, -0.2, 0.2, 3.0$ . Estes gráficos esboçam a dinâmica quântica para os casos onde o sistema está nas regiões I, II, III e IV, de cima para baixo, respectivamente. Podemos observar aspectos da dinâmica quântica, tais como oscilações de colapso e ressurgimento e oscilações não periódicas, que não são características da correspondente dinâmica clássica. Contudo, verificamos que a classificação baseada nos pontos fixos da análise clássica, que determina se a evolução dinâmica é localizada ou deslocalizada aplica-se também ao caso quântico. Em particular, na região II está claro que para um estado inicial atômico a evolução é completamente deslocalizada, enquanto que para um estado inicial molecular ela é localizada. Note que para o caso  $\lambda = 0$  (onde os parâmetros de interação são zero:  $U_a = U_{ab} = U_b = 0$ ) a dinâmica quântica já tinha sido estudada anteriormente (veja, por exemplo, [42, 43]). Neste caso, a região II não pode ser acessada. Mostrou-se, nestas referências, que a dinâmica é deslocalizada para  $|\alpha| < 1$  e localizada para os valores restantes de  $\alpha$  tanto para um estado inicial atômico quanto molecular. Estes resultados estão consistentes com os nossos. É importante salientar aqui um aspecto novo e surpreendente, que é a existência da região II no diagrama de parâmetros (Fig. 3.4

na análise clássica), onde a evolução para um estado inicial puramente molecular é bem localizada, enquanto que para um estado inicial puramente atômico a evolução é totalmente deslocalizada, tanto na dinâmica clássica quanto na dinâmica quântica. Conseqüentemente, a inclusão dos parâmetros de interação do tipo átomo-átomo, átomo-molécula e molécula-molécula ( $U_a$ ,  $U_{ab}$  e  $U_b$ ) produz uma dinâmica muito mais rica.



**Fig. 3.7:** *Evolução temporal do valor esperado da diferença entre o número de átomos e moléculas  $\langle N_a - 2N_b \rangle / N$  nas quatro regiões definidas no diagrama de parâmetros, para um estado inicial puramente atômico no lado esquerdo  $|N, 0\rangle$  e um estado inicial puramente molecular  $|0, N/2\rangle$  no lado direito. Estamos usando  $\lambda = 1.0$  e  $\alpha = -8.0, -0.2, 0.2, 3.0$  (ou, em termos das variáveis originais,  $N = 100$ ,  $\mu_a = \mu_b = 0$ ,  $\Omega = 1.0$ ,  $U_b = 1.0$ ,  $U_a = -0.881, 0.222, 0.278, 0.674$  e  $U_{ab} = -1.546, 0.660, 0.774, 1.566$ ), de cima para baixo.*

## 3.5 Conclusão

Neste capítulo apresentamos a solução exata para um modelo de condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular. Subseqüentemente, através de uma análise da dinâmica clássica determinamos os pontos fixos do espaço de fase do sistema e obtivemos também as curvas de nível. Esta análise possibilitou uma separação do espaço dos parâmetros em quatro regiões, com diferentes dinâmicas. Finalmente mostramos que esta classificação também continua válida para a dinâmica quântica. A maior parte destes resultados é original e foi publicada em

- Santos, G.; Tonel, A. P.; Foerster, A.; Links, J. Classical and quantum dynamics of a model for atomic-molecular Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, Melville, v. 73, n. 2, 023609 7p., Feb. 2006.

## Capítulo 4

# Transições de fase quânticas

## 4.1 Introdução

Neste capítulo estudaremos os modelos descritos nos Cap. 2 e 3 desta tese usando os conceitos de fidelidade, emaranhamento e gap no estudo de transições de fase quânticas.

Transições de fase quânticas (TFQ) ocorrem na temperatura de zero absoluto devido a flutuações quânticas quando variamos um parâmetro externo [47, 48, 49]. Existem diferentes técnicas matemáticas para se identificar as TFQ e, em particular os valores críticos dos parâmetros para os quais estas transições ocorrem.

Uma forma de se identificar uma TFQ é através do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental. O valor do parâmetro para o qual o gap se anula ou apresenta um mínimo identifica o parâmetro crítico da TFQ [47].

Outros conceitos como emaranhamento e fidelidade, que recentemente têm sido muito utilizados na teoria da Computação Quântica, também podem ser empregados na identificação das TFQ. Basicamente, o valor do parâmetro para o qual o emaranhamento apresenta um máximo ou uma mudança abrupta de comportamento identifica o parâmetro crítico de uma TFQ [68, 62, 63]. Analogamente, o ponto onde a fidelidade exibe um mínimo define um valor crítico para o parâmetro [56, 57]. Recentemente, TFQ foram estudadas em diversos modelos utilizando estas novas técnicas. Utilizando o conceito de emaranhamento, foram estudados os seguintes modelos: modelos de spin [48, 61, 68, 70], modelos de férmions fortemente correlacionados (modelo de Hubbard) [62, 64, 65, 68], modelo de Bose-Hubbard [57] e modelos de spin-bósons [60, 69]. Usando o conceito de fidelidade, foram estudados, por exemplo: modelo de Bose-Hubbard [56, 57], modelo de Dike e cadeia de spin XY [55], e um modelo que descreve um condensado de Bose-Einstein atômico-molecular com átomos distintos [71].

Neste contexto, para sistemas quânticos em que é possível fazer uma análise clássica, foi conjecturado por *Milburn et al* [50, 51] que quando encontramos uma bifurcação do tipo forquilha na análise clássica dos pontos fixos de um hamiltoniano, a entropia de emaranhamento do estado fundamental tem um máximo próximo a este ponto de bifurcação. Vimos no Cap. 2 que o modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson exibe um ponto de bifurcação de forquilha, sendo, portanto, um candidato natural para o estudo do emaranhamento.

No que segue faremos um estudo das TFQ utilizando os conceitos de entropia de emaranhamento, fidelidade e gap para os modelos descritos pelos hamiltonianos (2.4) e (3.1). Como o estudo do emaranhamento é um pouco mais sofisticado, vamos fazer uma revisão dos principais conceitos envolvidos antes de iniciar a análise das TFQ dos modelos em questão.

## 4.2 Emaranhamento

Nesta seção vamos estudar o emaranhamento dos modelos descritos pelos hamiltonianos (2.4) e (3.1) seguindo o trabalho original de *G. Milburn et al* [33]. A idéia básica aqui é decompor um sistema em subsistemas distinguíveis não isolados, tal que a interação entre estes subsistemas seja responsável pelo emaranhamento entre eles. Quando um sistema puder ser dividido em duas (três) partes dizemos que ele é um sistema “bipartite”, (“tripartite”), etc\*. Em princípio, os subsistemas podem estar espacialmente separados, ou então a separação ser proveniente de graus de liberdade diferentes. Para um sistema “bipartite” ou de dois modos a medida padrão de emaranhamento é a entropia de *von Neumann* do operador densidade reduzida de um dos dois subsistemas. O operador densidade reduzida de um subsistema é obtido tomando-se o traço parcial do operador densidade do sistema de dois modos  $\rho$  em relação ao outro subsistema. Mais especificamente, para dois subsistemas  $A$  e  $B$ , o operador densidade reduzida do subsistema  $A$ ,  $\rho_A$ , é dado por

$$\rho_A = \text{Tr}_B(\rho), \quad (4.1)$$

onde  $\text{Tr}_B$  é o traço parcial sobre o subsistema  $B$  e  $\rho$  é o operador densidade do sistema de dois modos. A entropia de emaranhamento de *von Neumann* é então definida por

$$\begin{aligned} E(\rho_A) &= -\text{Tr}[\rho_A \log(\rho_A)] \\ &= -\sum_{k=1}^d \lambda_k \log(\lambda_k), \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde o logaritmo é tomado na base 2,  $\{\lambda_k\}$  é o conjunto de autovalores do operador densidade reduzida  $\rho_A$  e  $d$  é a dimensão do espaço dos estados do subsistema  $A$ . Acima, o valor de  $E$  varia desde 0, para estados completamente separáveis, até  $\log(d)$ , para estados maximamente emaranhados, correspondendo a um operador densidade completamente misturado [33].

Para qualquer estado puro de um sistema de dois modos podemos usar a decomposição de *Schmidt* [33, 52] para escrever um estado geral  $|\Phi\rangle$  como

$$|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^D \Lambda_i |i_A\rangle |i_B\rangle, \quad (4.3)$$

onde  $\{|i_A\rangle\}$  são estados ortonormais do subsistema  $A$  e  $\{|i_B\rangle\}$  são estados ortonormais do subsistema  $B$ . Os  $\{\Lambda_i\}$  são números não negativos satisfazendo  $\sum_i \Lambda_i^2 = 1$  e são chamados números de *Schmidt*. O limite da soma,  $D$ , é a dimensão do subsistema de menor dimensão.

---

\* Para sistemas divididos em três ou mais subsistemas, não existe uma definição única de emaranhamento [52]



Vemos diretamente de (4.3) que tomando o traço parcial em relação a qualquer um dos subsistemas os operadores densidade reduzida dos dois subsistemas possuem os mesmos autovalores, e portanto,  $E(\rho_A) = E(\rho_B)$  quando as dimensões dos dois subsistemas são iguais. Vamos agora particularizar este estudo para os modelos estudados nos Caps. 2 e 3, respectivamente.

### 4.3 Modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados

Vamos agora fazer um estudo sistemático das TFQ do hamiltoniano (2.4) que descreve dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson

$$H = \frac{K}{8}(N_1 - N_2)^2 - \frac{\Delta\mu}{2}(N_1 - N_2) - \frac{\varepsilon_j}{2}(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1). \quad (4.4)$$

Mais especificamente, iremos analisar o comportamento do gap, do emaranhamento e da fidelidade do estado fundamental deste modelo.

#### 4.3.1 Entropia de Emaranhamento

Seguindo o trabalho de *G. Milburn et al* [33] e usando o fato que o número total de átomos é conservado,  $N = N_1 + N_2$ , podemos escrever um estado geral do sistema como

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n |n\rangle |N - n\rangle, \quad (4.5)$$

onde os  $\{c_n\}$  são números complexos e a notação acima implica que para  $n$  átomos no condensado 1 teremos  $N - n$  átomos no condensado 2. O operador densidade para o estado (4.5) é então escrito como

$$\begin{aligned} \rho &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= \sum_{m,n=0}^N c_m^* c_n |m\rangle |N - m\rangle \langle n| \langle N - n|. \end{aligned} \quad (4.6)$$

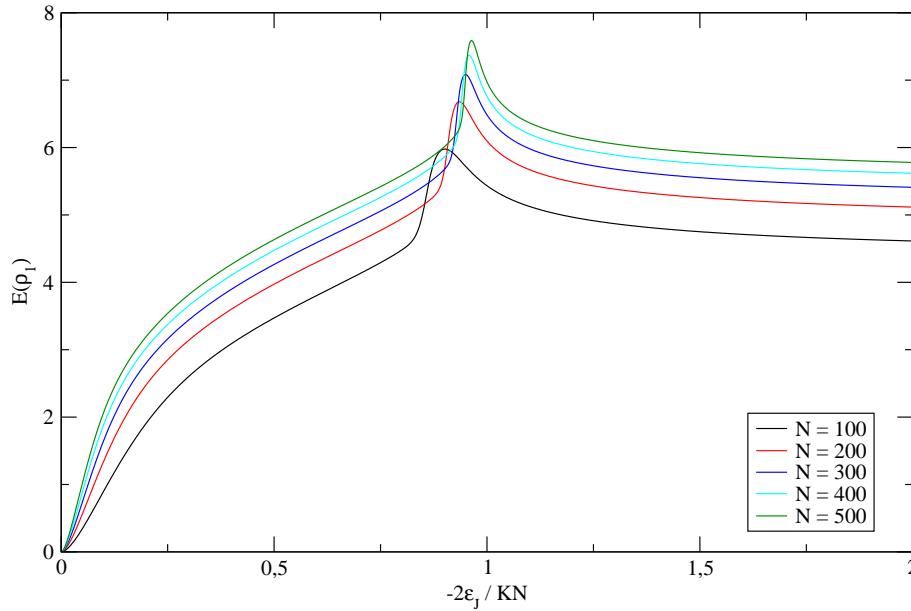
Tomando o traço parcial em relação ao condensado 2 encontramos o operador densidade reduzida, para o subsistema 1

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \text{Tr}_2(\rho) \\ &= \sum_{n=0}^N |c_n|^2 |n\rangle \langle n|. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Podemos ver que neste caso  $\rho_1$  é diagonal na base do espaço de *Fock*, com autovalores  $\lambda_n = |c_n|^2$ .

A entropia de emaranhamento de *von Neumann* é

$$E(\rho_1) = - \sum_{n=0}^N |c_n|^2 \log(|c_n|^2). \quad (4.8)$$



**Fig. 4.1:** Entropia de emaranhamento do estado fundamental em função de  $-\frac{1}{\lambda} = -\frac{2\varepsilon_J}{KN}$ , para  $K = -1$ ,  $\Delta\mu \approx 0$  e diferentes valores do número total de átomos  $N$ . À medida que  $N$  aumenta o máximo da entropia desloca-se para o ponto crítico  $-\lambda_c = 1$ .

Usando (4.8) juntamente com os autovetores obtidos da diagonalização exata do hamiltoniano (4.4), estudaremos a variação da entropia de emaranhamento em função da razão entre os parâmetros  $2\varepsilon_J / KN$  na ausência do potencial externo  $\Delta\mu = 0^*$ . Devido a representação matricial do hamiltoniano (4.4) ser uma matriz tridiagonal com  $h_{i,i+1} = h_{i+1,i}$ , o espectro dos autovalores do hamiltoniano não depende do sinal da amplitude de tunelamento (surgem termos quadráticos em  $\varepsilon_J$  no polinômio característico do hamiltoniano). Assim, quando passamos do caso repulsivo ( $K > 0$ ) para o caso atrativo ( $K < 0$ ), os autovalores apenas mudam de sinal, fazendo com que o máximo estado excitado do caso repulsivo seja o estado fundamental do caso atrativo e vice versa. Portanto, a entropia de emaranhamento

\* Utilizamos, de fato, um valor bem pequeno de  $\Delta\mu$  para evitar problemas numéricos.

(4.8) do estado fundamental para o caso atrativo é igual a entropia de emaranhamento do máximo estado excitado para o caso repulsivo. Uma vez que na Física o estado fundamental é, em geral, mais relevante do que o máximo estado excitado, analisaremos aqui apenas o caso atrativo. Obviamente que devido a essa simetria, os mesmos gráficos para a entropia do máximo estado excitado podem ser obtidos para o caso repulsivo. Cabe salientar que este estudo foi feito recentemente por *Pan e Draayer* em [67].

Na Fig. 4.1 mostramos a entropia de emaranhamento do estado fundamental versus  $-2\varepsilon_J/KN$  para o caso atrativo ( $K < 0$ ) e diferentes valores de  $N$ . Podemos verificar que a entropia de emaranhamento apresenta um máximo que se aproxima de  $-\lambda = 1^\ddagger$  à medida que o número total de átomos aumenta. Na análise clássica do hamiltoniano (4.4) para o caso repulsivo ( $K > 0$ ) feita no Cap. 2, encontramos que uma bifurcação de forquilha ocorria em  $\lambda = 1$  (Fig. 2.1). Isto corresponderia, no caso atrativo ( $K < 0$ ) a uma bifurcação em  $\lambda = -1$ . Este resultado confirma a conjectura de Milburn *et al* [50, 51], que sugere o aparecimento de um máximo na entropia de emaranhamento do estado fundamental sempre que na análise clássica do hamiltoniano surgir um ponto fixo de bifurcação do tipo forquilha. Gráficos semelhantes a este também foram obtidos por *Pan e Draayer* em [67] utilizando outros métodos.

É um fato bem estabelecido que sistemas infinitos sofrem uma transição de fase quântica quando o emaranhamento do estado fundamental, dependente de algum parâmetro, apresenta um extremo próximo a um valor crítico deste parâmetro. De fato, este é um dos procedimentos adotados na literatura para encontrar TFQ [60, 48, 62]. Portanto, para sistemas finitos, o aparecimento de um pico no emaranhamento do estado fundamental do modelo é um forte indicativo que o valor do parâmetro para o qual tende a ocorrer este pico ( $-\lambda_c = 1$ ) é um ponto de TFQ do sistema. Rigorosamente, este ponto é chamado de “ponto de pré-transição de fase quântica” [43, 56].

### 4.3.2 Gap de Energia

Uma outra possibilidade de se caracterizar transições de fase quânticas é pelo estudo do gap de energia  $\Delta E$ , definido como a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental do hamiltoniano, isto é

$$\Delta E = E^{(1)} - E^{(0)}. \quad (4.9)$$

Uma transição de fase quântica ocorre quando o gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental se anula no limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$  [47].

---

<sup>‡</sup> Lembramos aqui a definição de  $\lambda$ , dada no Cap. 2:  $\lambda = \frac{KN}{2\varepsilon_J}$  (ver eq. 2.28).

Os níveis de energia do hamiltoniano (4.4) variam continuamente à medida que variarmos os parâmetros  $K$ ,  $\Delta\mu$  e  $\varepsilon_J$ . Assim, fixando dois parâmetros e variando o terceiro, o valor deste parâmetro para o qual o gap de energia se anula no limite termodinâmico é o valor crítico. Assim, continuando a análise do caso atrativo, ( $K < 0$ ), consideraremos o comportamento do gap de energia quando variarmos a razão  $-2\varepsilon_J/KN$ , na ausência do potencial externo ( $\Delta\mu = 0$ ). Na Fig. 4.2 mostramos o gap entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental para  $\Delta\mu = 0$  e diferentes valores do número total de átomos  $N$ . Para  $0 < -2\varepsilon_J/KN < -1/\lambda_0$  o gap de energia está quase fechado<sup>†</sup>, isto é  $\Delta E \approx 0$ , e dizemos neste caso que os níveis são quase degenerados. À medida que  $N$  aumenta, o ponto em que o gap começa a abrir ( $\lambda_0$ ) aproxima-se do valor crítico  $-2\varepsilon_J/KN = 1$ . Como os níveis de energia se aproximam à medida que aumentamos o número total de átomos, inferimos que irá ocorrer uma transição de fase quântica quando  $N \rightarrow \infty$ , com o valor crítico  $\lambda_c = -1$  separando uma região sem gap de outra com gap. Este resultado está de acordo com [66], onde o gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental, obtido por diagonalização exata, apresenta um mínimo que se aproxima de um ponto crítico onde ocorre uma transição de fase quântica à medida que o número total de átomos no condensado aumenta. Portanto, para sistemas finitos, o aparecimento de um mínimo no gap de energia que tende a fechar à medida que aumentamos o número total de átomos é um indicador de uma transição de fase quântica no ponto onde isto ocorre ( $\lambda_c = -1$ ). Rigorosamente falando, é um ponto de “pré-transição de fase quântica”.

### 4.3.3 Fidelidade

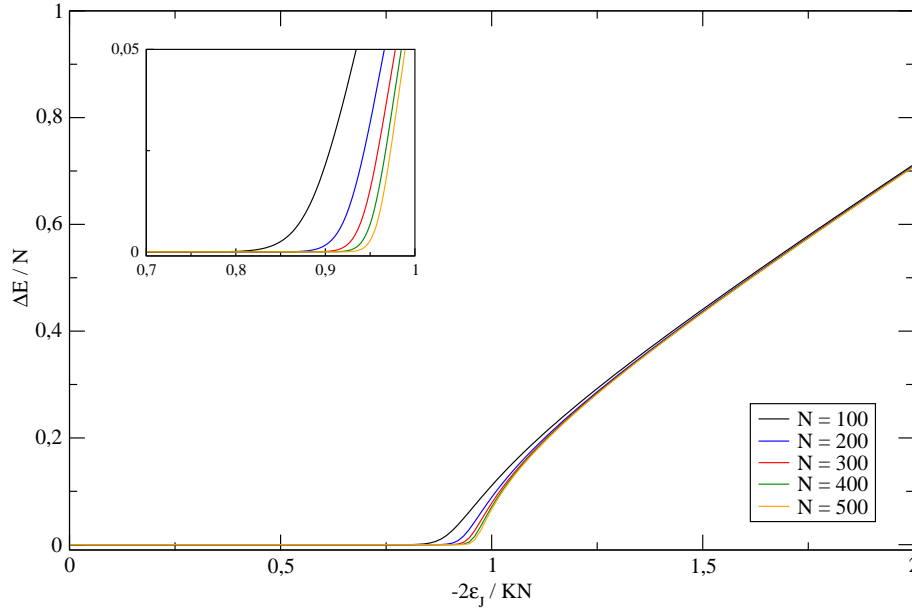
Uma maneira alternativa de se caracterizar transições de fase quânticas é utilizando outra ferramenta oriunda da teoria da Computação Quântica, a chamada de *Fidelidade* [52]. A fidelidade  $\mathcal{F}$  é definida como o módulo\* do produto escalar entre dois estados quânticos, cujo valor informa o quanto estes estados são “distinguíveis” entre si,

$$\mathcal{F}(\psi, \phi) = |\langle \psi | \phi \rangle|. \quad (4.10)$$

A fidelidade varia desde 1 para estados completamente indistinguíveis até 0 para estados totalmente distinguíveis. Para sistemas que exibem uma transição de fase quântica no limite termodinâmico o ponto onde a fidelidade vai a zero define um ponto crítico. Para sistemas finitos, o ponto onde a fidelidade apresenta um mínimo é identificado como um

<sup>†</sup> Para sistemas finitos o gap de energia nunca chega a se anular completamente.

\* Cabe aqui salientar que existem alguns autores que definem a fidelidade como o módulo ao quadrado do produto escalar entre dois estados quânticos (ver por exemplo [53, 55]).

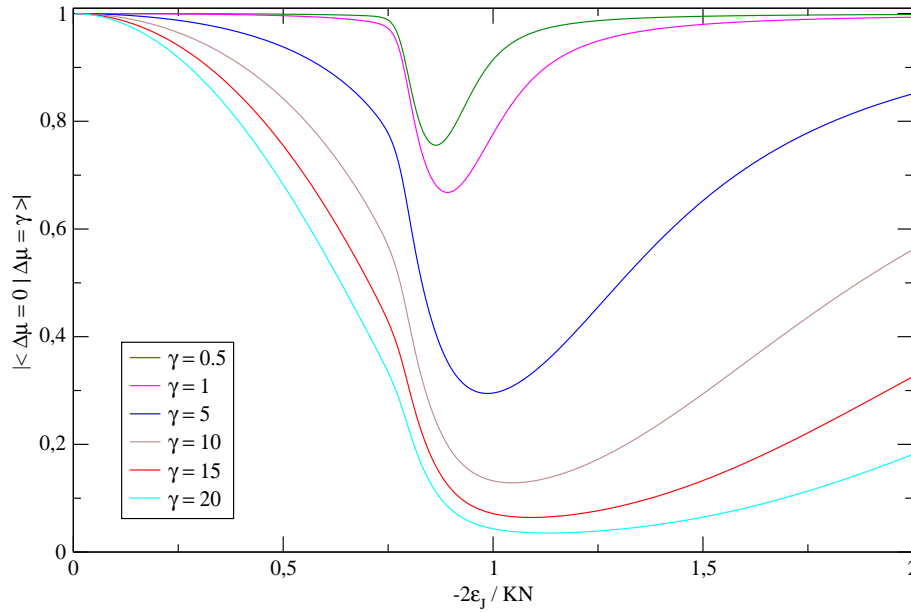


**Fig. 4.2:** *Gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental em função de  $-\frac{1}{\lambda} = -\frac{2\varepsilon_J}{KN}$ , para  $\Delta\mu = 0$ ,  $K = -1$  e diferentes valores de  $N$ . À medida que  $N$  aumenta o ponto onde o gap abre desloca-se para o ponto crítico  $-\lambda_c = 1$ .*

ponto de "pré-transição de fase quântica" [43, 56]. Como foi mencionado na seção anterior, o hamiltoniano (4.4) depende dos parâmetros  $K$ ,  $\Delta\mu$  e  $\varepsilon_J$ . Assim, os autovetores de  $H$  irão mudar quando variarmos estes parâmetros. Para cada escolha dos parâmetros, teremos um conjunto de autoestados diferentes. Consideraremos a partir de agora a fidelidade do estado fundamental usando o potencial externo  $\Delta\mu$  como parâmetro de ordem para estudar as transições de fase quânticas próximas ao ponto de bifurcação  $-KN/2\varepsilon_J = 1$ , onde foi encontrada uma transição de fase quântica no estudo do emaranhamento do estado fundamental e do gap de energia para valores finitos do número total de átomos  $N$  e interação atrativa, ( $K < 0$ ). O comportamento da fidelidade depende de quão próximos os parâmetros estão do ponto de bifurcação. Na Fig. 4.3 vemos a mudança na fidelidade quando fixamos  $\Delta\mu \approx 0^*$ , próximo do ponto de bifurcação num estado, que chamaremos de "primeiro estado", e variamos  $\Delta\mu$  de modo a se afastar do ponto de bifurcação no outro estado que chamaremos de "segundo estado". Próximo do valor crítico  $-\lambda_c = 1$  a fidelidade sempre exibe um mínimo. Para  $\Delta\mu = \gamma > 1$  podemos escolher qualquer valor para o potencial externo no segundo estado fundamental que compõe a fidelidade ( $|\Delta\mu = \gamma\rangle$ ) para

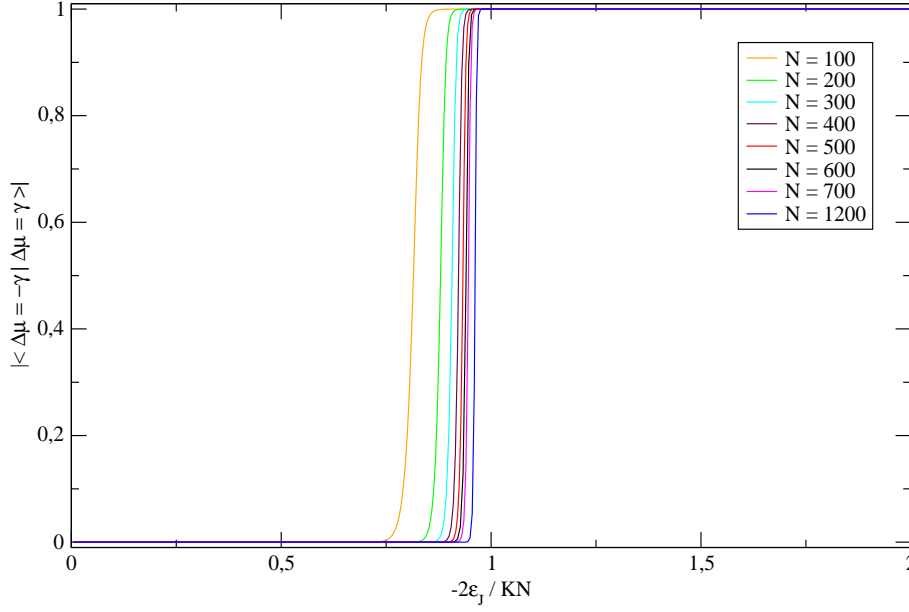
\* Utilizamos, de fato, um valor bem pequeno de  $\Delta\mu$  para evitar problemas numéricos.

estudar a transição de fase quântica que ocorre em  $-\lambda_c = -KN/2\varepsilon_J = 1$ . Mesmo para um valor pequeno de  $N$  a fidelidade já apresenta um mínimo próximo do ponto de bifurcação  $-\lambda_c = 1$ , mostrando que próximo a uma transição de fase quântica os autovetores do estado fundamental são maximamente distinguíveis quando o parâmetro de ordem é escolhido próximo ao valor do ponto de transição para um dos estados e para o segundo estado o parâmetro de ordem é ajustado de modo a fornecer a melhor assinatura para o ponto de transição.



**Fig. 4.3:** Fidelidade do estado fundamental do hamiltoniano (4.4) em função de  $-\frac{1}{\lambda} = -\frac{2\varepsilon_J}{KN}$ , para  $N = 50$  e  $K = -1$ . Fizemos  $\Delta\mu \approx 0$  para o primeiro estado fundamental e variamos  $\Delta\mu$  para o segundo estado fundamental. À medida que  $\gamma$  aumenta o mínimo da fidelidade vai se aproximando do valor crítico  $-\lambda_c = 1$ , enquanto que os estados vão ficando cada vez mais distinguíveis.

Utilizando valores de  $\Delta\mu = \gamma$  simétricos em relação a  $\Delta\mu = 0$  para os dois estados, vemos outra mudança no comportamento da fidelidade próxima ao ponto crítico  $-\lambda_c = 1$ . Na Fig. 4.4 observamos que quanto maior o número total de átomos  $N$ , mais próximo do ponto crítico o mínimo da fidelidade ocorre. A fidelidade tem uma taxa de variação muito alta, ou seja, a derivada da fidelidade para este caso deve apresentar um máximo próximo ao ponto da transição de fase quântica[57], com os mesmos parâmetros críticos encontrados na análise do emaranhamento do estado fundamental e do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental.



**Fig. 4.4:** Fidelidade do estado fundamental do hamiltoniano (4.4) em função de  $-\frac{1}{\lambda} = -\frac{2\varepsilon_j}{KN}$ , para  $K = -1$ ,  $\gamma = \pm 0.001$  e diferentes valores do número total de átomos  $N$ . À medida que  $N$  aumenta o ponto onde ocorre a mudança abrupta da fidelidade do estado fundamental desloca-se para o ponto crítico  $-\lambda_c = 1$ .

## 4.4 Modelo para condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular

Vamos agora fazer um estudo sistemático das TFQ da versão simplificada do hamiltoniano (3.1) que descreve a conversão de átomos em moléculas diatômicas e a dissociação destas moléculas num condensado de Bose-Einstein com átomos idênticos,

$$H = \frac{\mu_a}{2} N_a + \frac{\mu_b}{2} N_b + \frac{\Omega}{2} (a^\dagger a^\dagger b + b^\dagger a a). \quad (4.11)$$

Na ausência do potencial externo  $\mu_b = 0$  este Hamiltoniano reduz-se ao modelo simplificado (3.3) amplamente estudado usando diferentes métodos [33, 42, 43].

### 4.4.1 Entropia de emaranhamento

Seguindo o trabalho de *G. Milburn et al* [33], usamos o fato que a dimensão do espaço dos estados depende se  $N$  é par ou ímpar (Apêndice A.2) e que o número total de átomos é conservado,  $N = N_a + 2N_b$ , para escrever um estado geral do sistema.

Para  $N$  par podemos escrever um estado geral como,

$$|\Psi_{par}\rangle = \sum_{n=0}^M d_n |2n\rangle |M-n\rangle, \quad (4.12)$$

onde  $\{d_n\}$  são números complexos.

Para  $N$  ímpar, temos o estado geral,

$$|\Psi_{imp}\rangle = \sum_{n=0}^M d_n |2n+1\rangle |M-n\rangle. \quad (4.13)$$

Consideraremos somente o caso  $N$  par, pois nenhum efeito de paridade da dimensão do espaço de estados foi observado na entropia de emaranhamento do estado fundamental [33]. Assim, um estado geral do condensado é

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^M d_n |2n\rangle |M-n\rangle, \quad (4.14)$$

onde  $\{d_n\}$  são números complexos e a notação acima implica que para  $N_a = 2n$  átomos não ligados teremos  $N_b = M - n$  moléculas ou  $2(M - n)$  átomos ligados no estado molecular. O operador densidade para o estado geral (4.14) é então escrito como

$$\begin{aligned} \rho &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= \sum_{n=0}^M \sum_{m=0}^M d_n d_m^* |2n\rangle |M-n\rangle \langle M-m| \langle 2m|. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Como no caso dos dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson, podemos dividir o condensado atômico-molecular em dois subsistemas,  $A$  e  $B$ , sendo que cada subsistema pode ser pensado como um elemento químico diferente (átomos ou moléculas). O operador densidade reduzida para o subsistema  $A$  é então,

$$\rho_A = \text{Tr}_B(\rho), \quad (4.16)$$

onde  $\text{Tr}_B$  é o traço parcial sobre o subsistema  $B$ . Considerando o subsistema  $A$  como o dos átomos não ligados, cujos vetores de estados são  $|2n\rangle$ , obtemos para o subsistema  $A$  o operador densidade reduzida,

$$\rho_A = \sum_{n=0}^M |d_n|^2 |2n\rangle \langle 2n|, \quad (4.17)$$

e a entropia de emaranhamento  $E(\rho_A)$  de *von Neumann*,



$$E(\rho_A) = - \sum_{n=0}^M |d_n|^2 \log(|d_n|^2). \quad (4.18)$$

Usando (4.18) juntamente com os autovetores obtidos da diagonalização exata do hamiltoniano (4.11), estudaremos a variação da entropia de emaranhamento em função da razão entre o potencial externo  $\mu_a$  e a amplitude de interconversão  $\Omega$  na ausência do potencial externo  $\mu_b = 0$ . Como no caso do modelo dos dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson, o hamiltoniano (4.11) é uma matriz tridiagonal com  $h_{i,i+1} = h_{i+1,i}$ , de modo que os níveis de energia são invariantes em relação a troca do sinal da amplitude de interconversão  $\Omega$  (Apêndice A.2). Como estamos interessados na entropia de emaranhamento do estado fundamental trabalharemos com o potencial externo  $\mu_a > 0$  e ao mesmo tempo fixaremos o potencial externo  $\mu_b = 0$  para estudar transições de fase quânticas do modelo descrito pelo hamiltoniano (4.11).

Na Fig. 4.5 mostramos a variação da entropia de emaranhamento do estado fundamental  $E(\rho_A)$  em função da razão entre o potencial externo  $\mu_a$  e a amplitude de interconversão  $\Omega$  na ausência do potencial externo  $\mu_b = 0$  para diferentes valores do número total de átomos  $N$ . A entropia de emaranhamento do estado fundamental sofre um decaimento abrupto próximo do ponto  $\mu_a/\Omega\sqrt{2N} = 1$ . À medida que o número total de átomos aumenta, mais pronunciado é este efeito.

Na análise clássica do hamiltoniano geral (3.37) feita no Cap. 3, encontramos que pontos fixos de bifurcação aparecem quando  $\lambda - \alpha = \pm 1^*$  (Fig. 3.4). No caso particular do hamiltoniano (4.11), na ausência do potencial externo  $\mu_b = 0$ , temos que um ponto de bifurcação ocorre em  $\lambda = 0$  e  $\alpha = \mu_a/\Omega\sqrt{2N} = 1$ .

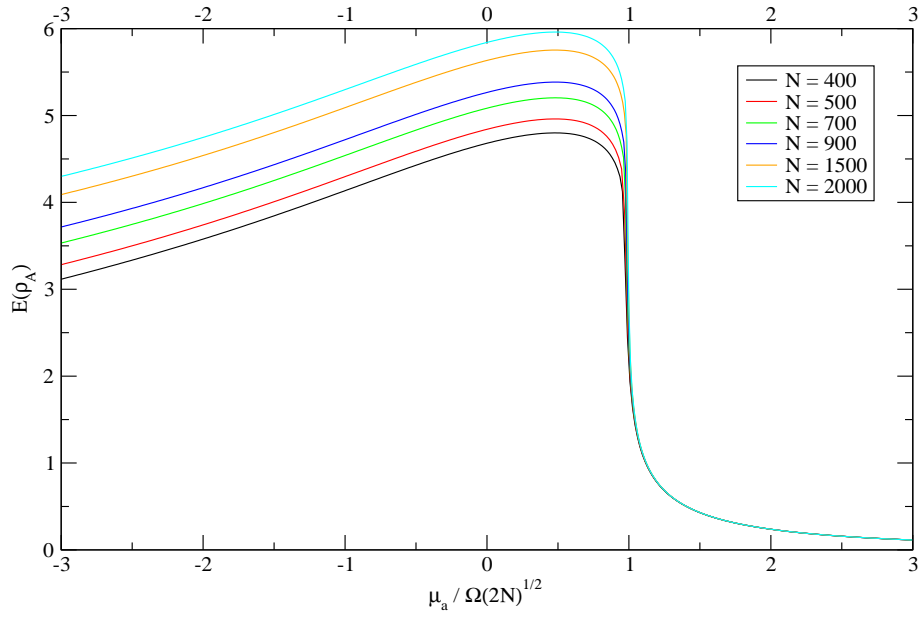
Assim, podemos dizer que o ponto de bifurcação da análise clássica  $\alpha = \mu_a/\Omega\sqrt{2N} = 1$  corresponde a um ponto de transição de fase quântica, uma vez que a entropia sofre uma queda abrupta em seu valor neste ponto.

#### 4.4.2 Gap de Energia

Conforme foi indicado na subseção 4.3.2 deste capítulo, uma outra maneira de se analisar transições de fase quânticas é através do gap de energia  $\Delta E$  entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental. Analogamente ao caso dos dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson, um comportamento assintótico também é verificado

---

\* Lembramos aqui as definições das variáveis clássicas  $\lambda$  e  $\alpha$ , dadas no Cap. 3:  $\lambda = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} - \frac{U_{ab}}{4} + \frac{U_b}{8} \right)$  e  $\alpha = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} - \frac{U_b}{8} + \frac{\mu_a}{2N} - \frac{\mu_b}{4N} \right)$ .

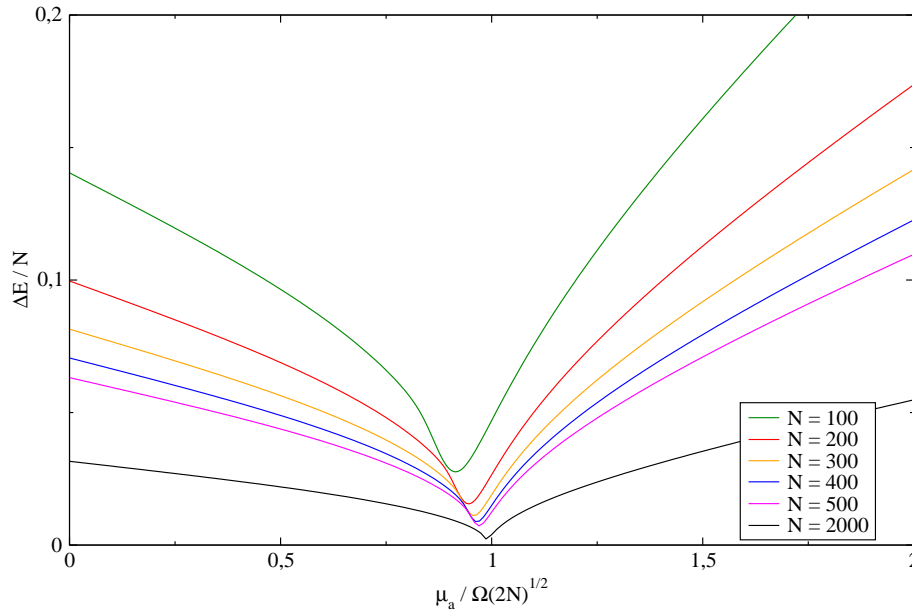


**Fig. 4.5:** Entropia de emaranhamento do estado fundamental em função de  $\alpha = \mu_a / \Omega \sqrt{2N}$ , para  $\Omega = 1$ ,  $\mu_b = 0$  e diferentes valores do número total de átomos  $N$ . A entropia de emaranhamento do estado fundamental sofre um decaimento abrupto próximo do ponto de bifurcação da análise clássica  $\alpha = 1$ .

no gap de energia à medida que aumentamos o número total de átomos  $N$  num condensado de Bose-Einstein atômico-molecular. Neste caso encontramos que o gap de energia tem um mínimo que diminui e cuja localização se aproxima do ponto crítico  $\alpha_c = 1$  à medida que o número total de átomos aumenta. Esse comportamento é mostrado na Fig. 4.6 para alguns valores de  $N$ . Diferentemente do caso dos dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson, o gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental está sempre aberto para valores finitos de  $N$ . Podemos inferir que uma transição de fase quântica irá ocorrer no limite em que  $N \rightarrow \infty$ , com o ponto crítico  $\alpha_c = 1$  [33]. Quando  $\alpha = 1$ , temos  $\mu_a / \Omega = \sqrt{2N}$ , que corresponde aproximadamente ao acoplamento de transição na dinâmica quântica para a formação de um condensado predominantemente molecular encontrado em [43].

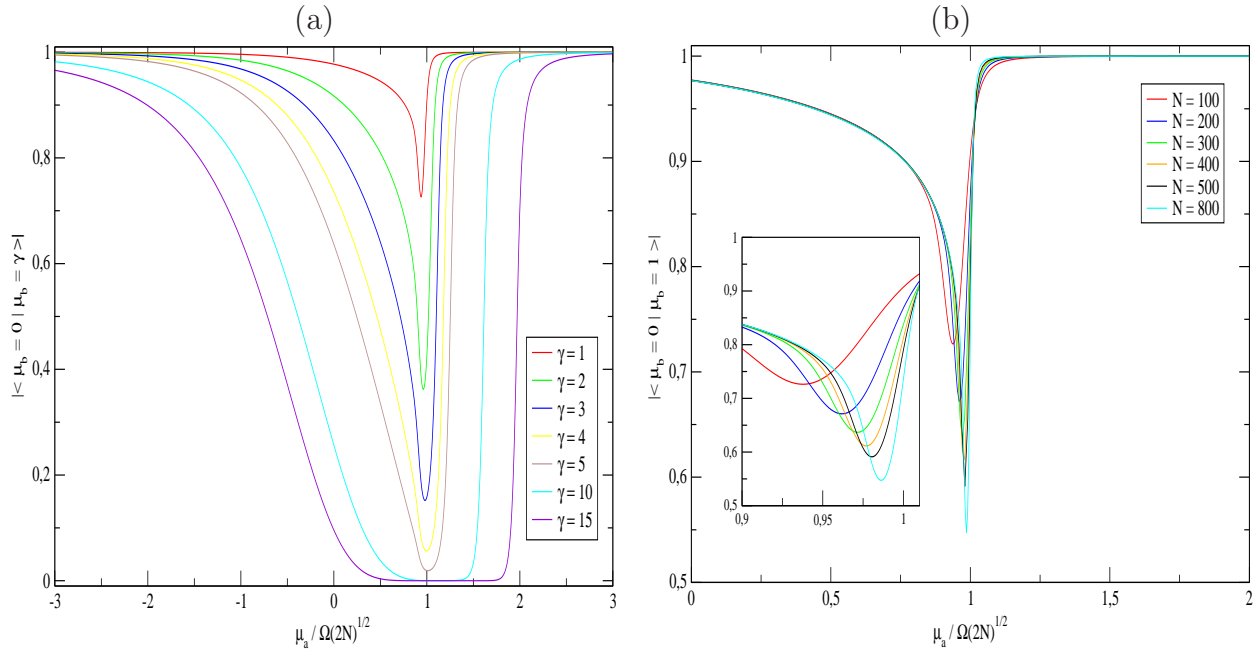
### 4.4.3 Fidelidade

Seguindo o mesmo procedimento realizado na subseção 4.3.3 estudaremos agora transições de fase quânticas do hamiltoniano (4.11) utilizando o conceito de fidelidade. Em particular, estudaremos o comportamento da fidelidade do estado fundamental próximo ao ponto crítico



**Fig. 4.6:** *Gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental em função de  $\alpha = \mu_a / \Omega \sqrt{2N}$ , para  $\mu_b = 0$ ,  $\Omega = 1$  e diferentes valores do número total de átomos  $N$ . À medida que  $N$  aumenta o mínimo do gap de energia vai fechando e se aproximando do ponto crítico  $\alpha_c = 1$ .*

$\alpha_c = 1$ , onde foi encontrada uma transição de fase quântica na análise do emaranhamento do estado fundamental e do gap de energia  $\Delta E$  entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental para valores finitos do número total de átomos  $N$ , na ausência do potencial externo  $\mu_b$  e valores positivos do parâmetro externo  $\mu_a > 0$ . Considerando o potencial externo  $\mu_b$  como parâmetro de ordem, fixamos o estado fundamental na ausência do potencial externo,  $|\mu_b = 0\rangle$ , que chamamos de primeiro estado fundamental, e variamos livremente o potencial externo  $\mu_b$  para um outro estado fundamental,  $|\mu_b = \gamma\rangle$ , que chamaremos de segundo estado fundamental. Na Fig. 4.7(a) observamos que a fidelidade do estado fundamental apresenta um mínimo próximo do ponto de transição  $\alpha_c = 1$ , se aproximando de zero à medida que o parâmetro externo  $\mu_b$  aumenta. Na Fig. 4.7(b) apresentamos o comportamento da fidelidade do estado fundamental,  $|\langle \mu_b = 0 | \mu_b = 1 \rangle|$ , à medida que o número total de átomos aumenta. Quanto maior o número total de átomos, mais próximo do ponto de transição o mínimo da fidelidade ocorre, e mais distinguíveis são os estados. Assim, como ocorreu no caso dos dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson, um mínimo na fidelidade do estado fundamental é novamente um indicador de uma “pré-transição de fase quântica” para um valor finito do número total de átomos  $N$ .



**Fig. 4.7:** Fidelidade do estado fundamental em função de  $\alpha = \mu_a / \Omega \sqrt{2N}$ , com  $\Omega = 1$ . Em (a) utilizamos o potencial externo  $\mu_b = 0$  para o primeiro estado fundamental e variamos  $\mu_b = \gamma$  para o segundo estado fundamental, com  $N = 100$ . Em (b) variamos o número total de átomos  $N$ , com  $\mu_b = 0$  para o primeiro estado fundamental e  $\mu_b = \gamma = 1$  para o segundo estado fundamental. À medida que  $N$  aumenta, o mínimo da fidelidade vai se aproximando do valor crítico  $\alpha_c = 1$ , enquanto que os estados vão ficando cada vez mais distinguíveis.

## 4.5 Conclusão

Neste capítulo apresentamos um estudo das transições de fase quânticas (ou “pré-transições de fase quânticas”) para o modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados (seção 4.3) e para o modelo de condensado do tipo atômico-molecular (seção 4.4), utilizando os conceitos de emaranhamento, fidelidade, e gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental. Encontramos que existe uma relação entre pontos fixos de bifurcação da análise clássica e pontos críticos nas transições de fase quânticas: (i) fazendo um estudo da entropia de emaranhamento do estado fundamental para os dois modelos verificamos que o ponto em que ocorre a transição de fase quântica (ponto de máximo da entropia para o modelo AA ou o ponto de queda abrupta da entropia para o modelo AB) coincide com o ponto de bifurcação da análise clássica. Neste contexto, confirmamos também a conjectura

de *Milburn et al* para o caso particular de uma bifurcação de forquilha. (ii) a análise do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental mostra que ocorre uma transição de fase quântica nos dois modelos, com o valor crítico dos parâmetros (ponto onde o gap abre para o modelo AA ou ponto de mínimo do gap para o modelo AB) coincide com o valor dos respectivos pontos fixos de bifurcação da análise clássica. (iii) utilizando o conceito de fidelidade, e usando um dos parâmetros dos hamiltonianos como parâmetro de ordem verificamos que o ponto crítico onde ocorre a transição de fase quântica (ponto onde a fidelidade apresenta um mínimo ou uma brusca variação, dependendo da escolha dos valores dos parâmetros) corresponde ao ponto de bifurcação na análise clássica. Nosso método para investigar TFQ usando o conceito de fidelidade permite identificar os pontos críticos mesmo quando usamos um valor pequeno para o número total de átomos  $N$ . Diferentemente dos métodos utilizados nos trabalhos citados, o uso de um dos parâmetros do hamiltoniano como parâmetro de ordem fornece uma maneira natural de encontrar, sem nenhum conhecimento prévio, os pontos críticos onde ocorrem as TFQ. Parte dos resultados obtidos neste capítulo são originais, especialmente os da seção 4.4, e estão em fase de redação para serem publicados futuramente:

1. Santos, G.; Foerster, A.; Tonel, A. P.; Links, J. Ground-state fidelity, bipartite entanglement and energy gap for the atomic-molecular Bose-Einstein condensate model. (em fase de redação) (2007).

Capítulo 5

Conclusões

## 5.1 Considerações Finais

O tópico central desta tese foi o estudo de dois modelos de condensados de Bose-Einstein exatamente solúveis: *i*) um modelo que descreve dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson *ii*) um modelo que descreve a ligação/dissociação de átomos/moléculas diatômicas num condensado de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular.

No Cap. 1 apresentamos uma introdução com ênfase na parte histórica, desde a previsão teórica até a obtenção experimental dos condensados. Também discutimos algumas aplicações e propriedades dos condensados de Bose-Einstein relacionadas aos modelos estudados. Completamos com uma discussão sobre a importância e aplicações de modelos exatamente solúveis neste contexto de condensados de Bose-Einstein.

No Cap. 2 estudamos a *integrabilidade*, a *dinâmica clássica* e a *dinâmica quântica* do modelo AA (dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson). Usando o método algébrico do ansatz de Bethe apresentamos a solução exata (equações do ansatz de Bethe e o espectro de energias). Posteriormente fizemos uma análise clássica do modelo e encontramos que o espaço de parâmetros pode ser dividido em duas regiões. Verificamos, em particular, que existe um ponto de bifurcação do tipo forquilha supercrítica que se localiza na fronteira entre estas regiões. Analisando a dinâmica clássica do modelo, mostramos que existe também um acoplamento de transição, tal que abaixo deste valor de transição temos oscilações completas na dinâmica clássica da diferença entre o número de átomos nos dois condensados. Acima deste valor ocorre um decaimento abrupto na amplitude das oscilações. Estes resultados foram confirmados pelo estudo das curvas de nível do hamiltoniano no espaço de fase. Finalmente, fizemos um estudo da dinâmica quântica deste modelo nos diferentes regimes. Mostramos que na dinâmica quântica também existe um acoplamento de transição que coincide com o valor obtido na análise clássica, separando uma evolução deslocalizada ou com tunelamento de uma evolução localizada ou auto-aprisionada. Estes resultados estão em concordância qualitativa com os experimentos [17, 18].

No Cap. 3 estudamos a *integrabilidade*, a *dinâmica clássica* e a *dinâmica quântica* do modelo AB (condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular). Usando o método algébrico do ansatz de Bethe apresentamos a solução exata (equações do ansatz de Bethe e o espectro de energias). Na análise clássica mostramos que o espaço de parâmetros pode ser dividido em quatro regiões. Estas quatro regiões originam dinâmicas qualitativamente diferentes. Uma análise da dinâmica quântica mostra que esta classificação continua válida. Outro fato importante a ser mencionado é que ao levarmos em conta os parâmetros de interação do tipo átomo-átomo, átomo-molécula e molécula-molécula ( $U_a, U_{ab}$  e  $U_b$ ), encon-

tramos uma dinâmica quântica muito mais rica.

No Cap. 4 estudamos as *transições de fase quânticas* (TFQ) para os dois modelos, usando os conceitos de emaranhamento, gap de energia e fidelidade. É interessante salientar que os conceitos de emaranhamento e fidelidade estão sendo amplamente utilizados na *Teoria da Computação Quântica* e no estudo de TFQ em geral. Basicamente, verificamos que existe uma relação entre os pontos fixos de bifurcação encontrados na análise clássica e os pontos críticos nas transições de fase quânticas. Fazendo um estudo da entropia de emaranhamento do estado fundamental para os dois modelos verificamos que o ponto em que ocorre a transição de fase quântica (ponto de máximo da entropia para o modelo AA ou o ponto de queda abrupta da entropia para o modelo AB) coincide com o ponto de bifurcação da análise clássica. Fazendo uma análise do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental encontramos que existe uma TFQ nos modelos cujo valor crítico coincide com os respectivos pontos fixos de bifurcação encontrados na análise clássica dos respectivos modelos. Para o modelo AA o gap está “quase” fechado abaixo do ponto crítico, sendo que o ponto onde o gap se abre se aproxima do ponto crítico à medida que o número total de átomos aumenta. Para o modelo AB, o gap de energia apresenta um mínimo cujo valor diminui à medida que o número total de átomos aumenta, com o valor do parâmetro onde o mínimo ocorre aproximando-se do valor do parâmetro no ponto crítico. O estudo da fidelidade confirmou que ocorre uma TFQ para os mesmos valores críticos encontrados nos dois modelos. Usando um dos parâmetros do hamiltoniano como parâmetro de ordem mostramos que próximo ao valor crítico dos parâmetros, encontrados no estudo do gap de energia, a fidelidade apresenta um mínimo ou uma variação brusca. Nosso método para investigar as TFQ usando o conceito de fidelidade nos permite identificar os pontos críticos mesmo quando usamos um valor pequeno para o número total de átomos. A análise do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental é uma análise padrão e serviu para confirmar a eficiência do uso da entropia de emaranhamento e da fidelidade do estado fundamental no estudo das TFQ. É importante salientar que os três métodos empregados para os dois modelos, utilizando os gráficos de emaranhamento, gap e fidelidade, levam ao mesmo ponto crítico em que ocorre a TFQ, que tende (no limite termodinâmico) ao valor do ponto de bifurcação obtido na análise clássica. Parte dos resultados obtidos nos Caps. 2 e 3 são originais e foram publicados em periódicos internacionais. Os resultados obtidos no Cap. 4 serão utilizados em uma futura publicação.



## 5.2 Perspectivas para o futuro

Uma possível extensão deste trabalho seria um estudo completo das TFQ considerando o modelo atômico molecular geral discutido no Cap. 3. Neste contexto, seria interessante considerar também o uso de um método analítico (mapeamento da equação de Schrödinger [72], por exemplo) para estudar as TFQ.

Outro possível projeto a ser desenvolvido poderia ser a aplicação das técnicas aprendidas nesta tese para investigar a dinâmica clássica, a dinâmica quântica, o emaranhamento e a fidelidade de alguns novos modelos de condensados de Bose-Einstein generalizados, como por exemplo um condensado de poço triplo [73] modelo de BEC-transistor [74], modelo de dois CBE acoplados com diferentes átomos [75] entre outros.

## 5.3 Trabalhos publicados e em preparação

1. Santos, G.; Tonel, A. P.; Foerster, A.; Links, J. Classical and quantum dynamics of a model for atomic-molecular Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, Melville, v. 73, n. 2, 023609 7p., Feb. 2006.
2. Jon Links; Angela Foerster; Arlei Prestes Tonel; Gilberto Santos. The two-site Bose-Hubbard model. **Annales Henri Poincaré**, Basel, v. 7, n. 7/8, p. 1591-1600, Nov. 2006.
3. Santos, G.; Foerster, A.; Tonel, A. P.; Links, J. Ground-state fidelity, bipartite entanglement and energy gap for the atomic-molecular Bose-Einstein condensate model. (em fase de redação/2007).

## Apêndice A

# Representação matricial dos hamiltonianos

Neste apêndice vamos mostrar como construir a representação matricial dos hamiltonianos (2.4) e (3.1) no espaço de Fock. Primeiro veremos que os termos de interação e de potenciais externos dos hamiltonianos são diagonais, enquanto que os termos de tunelamento (interconversão) situam-se acima ou abaixo da diagonal principal, fazendo com que a representação matricial dos hamiltonianos (2.4) e (3.1) seja uma matriz tridiagonal.

### A.1 Dois condensados de Bose-Einstein acoplados

Para construir a representação matricial do hamiltoniano (2.4), que escrevemos abaixo,

$$H = \frac{K}{8}(N_1 - N_2)^2 - \frac{\Delta\mu}{2}(N_1 - N_2) - \frac{\varepsilon_J}{2}(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), \quad (\text{A.1})$$

temos que calcular os elementos de matriz de  $H$  nos vetores de base  $|n_1, n_2\rangle$ ,

$$\langle n'_1, n'_2 | H | n_1, n_2 \rangle, \quad (\text{A.2})$$

onde  $n_1$  ( $n_2$ ) indica o número de átomos no condensado 1 (2).

O espaço de estados tem dimensão  $d = N + 1$ , onde  $N = N_1 + N_2$  é o número total de átomos, e é conservado. Para ilustrar, vamos considerar o caso mais simples  $N = 2$ . Aqui os vetores de base são  $\{|0, 2\rangle, |1, 1\rangle, |2, 0\rangle\}$ , e correspondem as figuras mostradas em Fig. A.1.

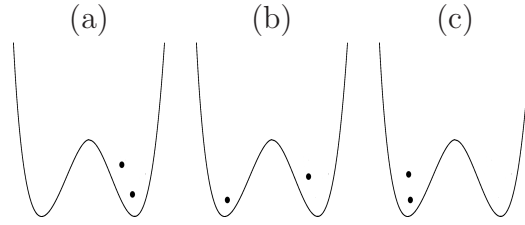
Para um vetor arbitrário da base,  $|n_1, n_2\rangle$ , valem as seguintes relações [76],

$$\begin{aligned} a_1^\dagger a_2 |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_2} a_1^\dagger |n_1, n_2 - 1\rangle \\ &= \sqrt{n_2} \sqrt{n_1 + 1} |n_1 + 1, n_2 - 1\rangle \\ &= \sqrt{n_2(n_1 + 1)} |n_1 + 1, n_2 - 1\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned}
 a_2^\dagger a_1 |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_1} a_2^\dagger |n_1 - 1, n_2\rangle \\
 &= \sqrt{n_1} \sqrt{n_2 + 1} |n_1 - 1, n_2 + 1\rangle \\
 &= \sqrt{n_1(n_2 + 1)} |n_1 - 1, n_2 + 1\rangle,
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

$$N_1 |n_1, n_2\rangle = a_1^\dagger a_1 |n_1, n_2\rangle = n_1 |n_1, n_2\rangle, \tag{A.5}$$

$$N_2 |n_1, n_2\rangle = a_2^\dagger a_2 |n_1, n_2\rangle = n_2 |n_1, n_2\rangle. \tag{A.6}$$



**Fig. A.1:** (a)  $|0, 2\rangle$ , (b)  $|1, 1\rangle$ , (c)  $|2, 0\rangle$

Aplicando o hamiltoniano (A.1) nos vetores de base  $|n_1, n_2\rangle$  e utilizando as relações acima, encontramos

$$\begin{aligned}
 H |n_1, n_2\rangle &= \frac{K}{8} (n_1 - n_2)^2 |n_1, n_2\rangle \\
 &- \frac{\Delta\mu}{2} (n_1 - n_2) |n_1, n_2\rangle \\
 &- \frac{\varepsilon_J}{2} \sqrt{n_2(n_1 + 1)} |n_1 + 1, n_2 - 1\rangle \\
 &- \frac{\varepsilon_J}{2} \sqrt{n_1(n_2 + 1)} |n_1 - 1, n_2 + 1\rangle.
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

Utilizando a equação (A.7) e tomando o “sanduíche“,  $\langle n'_1, n'_2 | H |n_1, n_2\rangle$ , podemos escrever a representação matricial do hamiltoniano (A.1) na base do espaço de estados para qualquer valor de  $N$ . Ilustraremos abaixo este procedimento para os casos  $N = 2$  e  $N = 10$ .

### A.1.1 $N = 2$

Para o caso de dois átomos, a dimensão do espaço de estados é  $d = 3$ , com os vetores da base dados por  $\{|0, 2\rangle, |1, 1\rangle, |2, 0\rangle\}$ . Aplicando o hamiltoniano (A.1) nos vetores de base e utilizando (A.7), encontramos

$$H|0, 2\rangle = \left(\frac{K}{2} + \Delta\mu\right)|0, 2\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J|1, 1\rangle, \quad (\text{A.8})$$

$$H|1, 1\rangle = -\frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J(|2, 0\rangle + |0, 2\rangle), \quad (\text{A.9})$$

$$H|2, 0\rangle = \left(\frac{K}{2} - \Delta\mu\right)|2, 0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J|1, 1\rangle. \quad (\text{A.10})$$

Assim, podemos facilmente encontrar os elementos da matriz que representam o hamiltoniano (A.1) no espaço de Fock,

$$\begin{aligned} \langle 0, 2|H|0, 2\rangle &= \left(\frac{K}{2} + \Delta\mu\right)\langle 0, 2|0, 2\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J\langle 0, 2|1, 1\rangle \\ &= \frac{K}{2} + \Delta\mu, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} \langle 0, 2|H|1, 1\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J(\langle 0, 2|2, 0\rangle + \langle 0, 2|0, 2\rangle), \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \langle 0, 2|H|2, 0\rangle &= \left(\frac{K}{2} - \Delta\mu\right)\langle 0, 2|2, 0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J\langle 0, 2|1, 1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \langle 1, 1|H|0, 2\rangle &= \left(\frac{K}{2} + \Delta\mu\right)\langle 1, 1|0, 2\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J\langle 1, 1|1, 1\rangle \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} \langle 1, 1|H|1, 1\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J(\langle 1, 1|2, 0\rangle + \langle 1, 1|0, 2\rangle) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \langle 1, 1|H|2, 0\rangle &= \left(\frac{K}{8} - \Delta\mu\right)\langle 1, 1|2, 0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J\langle 1, 1|1, 1\rangle \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{2}\varepsilon_J, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2, 0 | H | 0, 2 \rangle &= \left( \frac{K}{2} + \Delta\mu \right) \langle 2, 0 | 0, 2 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J \langle 2, 0 | 1, 1 \rangle \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2, 0 | H | 1, 1 \rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J (\langle 2, 0 | 2, 0 \rangle + \langle 2, 0 | 0, 2 \rangle) \\
 &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J,
 \end{aligned} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2, 0 | H | 2, 0 \rangle &= \left( \frac{K}{2} - \Delta\mu \right) \langle 2, 0 | 2, 0 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J \langle 2, 0 | 1, 1 \rangle \\
 &= \frac{K}{2} - \Delta\mu.
 \end{aligned} \tag{A.19}$$

Portanto, para  $N = 2$ , o hamiltoniano (A.1) é representado pela matriz

$$\begin{pmatrix} \frac{K}{2} + \Delta\mu & -\frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_J & \frac{K}{2} - \Delta\mu \end{pmatrix}. \tag{A.20}$$

### A.1.2 $N = 10$

Seguindo os mesmos passos da subseção anterior e observando as simetrias dos termos diagonais do hamiltoniano em relação a troca do número de átomos em cada condensado, encontramos a representação matricial do hamiltoniano (A.1) no espaço de Fock,

$$\begin{pmatrix} a_+ & t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & b_+ & t_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & c_+ & t_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_3 & d_+ & t_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_4 & e_+ & t_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_5 & 0 & t_5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_5 & e_- & t_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_4 & d_- & t_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_3 & c_- & t_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_2 & b_- & t_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_1 & a_- \end{pmatrix}. \tag{A.21}$$

Na diagonal principal aparecem apenas os parâmetros de interação e o potencial externo

$$\begin{aligned}
 a_{\pm} &= \frac{25}{4}K \pm 5\Delta\mu, & b_{\pm} &= 8K \pm 4\Delta\mu, & c_{\pm} &= \frac{9}{2}K \pm 3\Delta\mu, \\
 d_{\pm} &= 2K \pm 2\Delta\mu, & e_{\pm} &= \frac{K}{2} \pm \Delta\mu.
 \end{aligned} \tag{A.22}$$

enquanto que imediatamente acima e abaixo da diagonal principal aparecem apenas termos envolvendo o parâmetro de tunelamento,

$$\begin{aligned}
 t_1 &= -\frac{\sqrt{10}}{2}\varepsilon_J, & t_2 &= -\frac{\sqrt{18}}{2}\varepsilon_J, & t_3 &= -\sqrt{6}\varepsilon_J, \\
 t_4 &= -\sqrt{7}\varepsilon_J, & t_5 &= -\frac{\sqrt{30}}{2}\varepsilon_J.
 \end{aligned} \tag{A.23}$$

Com exceção do estado  $|N/2, N, 2\rangle$ , os estados são duplamente degenerados para  $\Delta\mu = 0$  e  $\varepsilon_J = 0$ .

## A.2 Condensado de Bose-Einstein atômico-molecular

Para construir a representação matricial do hamiltoniano (3.1), que escrevemos abaixo,

$$H = U_a N_a^2 + U_{ab} N_a N_b + U_b N_b^2 + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \Omega(a^\dagger a^\dagger b + b^\dagger a a), \quad (\text{A.24})$$

temos que encontrar os elementos de matriz de  $H$  na base  $\{|n_a, n_b\rangle\}$  onde  $n_a$  ( $n_b$ ) indica o número de átomos não ligados (moléculas) no condensado.

Diferentemente do modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados, a dimensão do espaço dos estados depende se  $N$  é par ou ímpar. Também ressaltamos que o número total de átomos,  $N = N_a + 2N_b$ , é conservado. Assim, temos dois casos:

**Caso1:**  $N$  par

Para  $N = 2$ , temos 2 estados:  $|2, 0\rangle$  e  $|0, 1\rangle$ .

Para  $N = 4$ , temos 3 estados:  $|4, 0\rangle$ ,  $|2, 1\rangle$  e  $|0, 2\rangle$ .

Para  $N = 6$ , temos 4 estados:  $|6, 0\rangle$ ,  $|4, 1\rangle$ ,  $|2, 2\rangle$  e  $|0, 3\rangle$ .

Para  $N = 8$ , temos 5 estados:  $|8, 0\rangle$ ,  $|6, 1\rangle$ ,  $|4, 2\rangle$ ,  $|2, 3\rangle$  e  $|0, 4\rangle$ .

Para  $N = 10$ , temos 6 estados:  $|10, 0\rangle$ ,  $|8, 1\rangle$ ,  $|6, 2\rangle$ ,  $|4, 3\rangle$ ,  $|2, 4\rangle$  e  $|0, 5\rangle$ .

Portanto, podemos facilmente verificar que a dimensão do espaço dos estados para  $N$  par é,

$$d = \frac{N}{2} + 1. \quad (\text{A.25})$$

**Caso2:**  $N$  ímpar

Para  $N = 3$ , temos 2 estados:  $|3, 0\rangle$  e  $|1, 1\rangle$ .

Para  $N = 5$ , temos 3 estados:  $|5, 0\rangle$ ,  $|3, 1\rangle$  e  $|1, 2\rangle$ .

Para  $N = 7$ , temos 4 estados:  $|7, 0\rangle$ ,  $|5, 1\rangle$ ,  $|3, 2\rangle$  e  $|1, 3\rangle$ .

Para  $N = 9$ , temos 5 estados:  $|9, 0\rangle$ ,  $|7, 1\rangle$ ,  $|5, 2\rangle$ ,  $|3, 3\rangle$  e  $|1, 4\rangle$ .

Para  $N = 11$ , temos 6 estados:  $|11, 0\rangle$ ,  $|9, 1\rangle$ ,  $|7, 2\rangle$ ,  $|5, 3\rangle$ ,  $|3, 4\rangle$  e  $|1, 5\rangle$ .

Portanto, a dimensão do espaço dos estados para  $N$  ímpar é,

$$d = \frac{N + 1}{2}. \quad (\text{A.26})$$

Para um vetor arbitrário da base  $|n_a, n_b\rangle$ , temos as seguintes relações,

$$\begin{aligned}
 a^\dagger a^\dagger b |n_a, n_b\rangle &= \sqrt{n_b} a^\dagger a^\dagger |n_a, n_b - 1\rangle \\
 &= \sqrt{n_b} \sqrt{n_a + 1} a^\dagger |n_a + 1, n_b - 1\rangle \\
 &= \sqrt{n_b(n_a + 1)(n_a + 2)} |n_a + 2, n_b - 1\rangle,
 \end{aligned} \tag{A.27}$$

$$\begin{aligned}
 b^\dagger a a |n_a, n_b\rangle &= \sqrt{n_a} b^\dagger a |n_a - 1, n_b\rangle \\
 &= \sqrt{n_a} \sqrt{n_a - 1} b^\dagger |n_a - 2, n_b\rangle \\
 &= \sqrt{n_a(n_a - 1)(n_b + 1)} |n_a - 2, n_b + 1\rangle,
 \end{aligned} \tag{A.28}$$

$$N_a |n_a, n_b\rangle = a^\dagger a |n_a, n_b\rangle = n_a |n_a, n_b\rangle, \tag{A.29}$$

$$N_b |n_a, n_b\rangle = b^\dagger b |n_a, n_b\rangle = n_b |n_a, n_b\rangle. \tag{A.30}$$

Aplicando o hamiltoniano (A.24) nos vetores de base  $|n_a, n_b\rangle$  e utilizando as relações acima encontramos,

$$\begin{aligned}
 H |n_a, n_b\rangle &= (n_a^2 U_a + n_a n_b U_{ab} + n_b^2 U_b) |n_a, n_b\rangle + (n_a \mu_a + n_b \mu_b) |n_a, n_b\rangle \\
 &+ \Omega \sqrt{n_b(n_a + 1)(n_a + 2)} |n_a + 2, n_b - 1\rangle \\
 &+ \Omega \sqrt{n_a(n_a - 1)(n_b + 1)} |n_a - 2, n_b + 1\rangle.
 \end{aligned} \tag{A.31}$$

Utilizando a equação (A.31) e tomando o “sanduíche“,  $\langle n_a', n_b' | H |n_a, n_b\rangle$ , podemos escrever a representação matricial do hamiltoniano (A.24) na base do espaço de estados para qualquer valor de  $N$ . Ilustraremos abaixo este procedimento para os casos de  $N$  par, com  $N = 2$  e  $N = 10$ , e  $N$  ímpar, com  $N = 3$  e  $N = 9$ .

### A.2.1 $N = 2$

Neste caso, temos  $d = 2$  e a base do espaço de estados  $\{|2, 0\rangle, |0, 1\rangle\}$ . Aplicando o hamiltoniano (A.24) aos vetores da base do espaço dos estados e utilizando (A.31), encontramos

$$H |2, 0\rangle = (4U_a + 2\mu_a) |2, 0\rangle + \sqrt{2}\Omega |0, 1\rangle, \tag{A.32}$$

$$H |0, 1\rangle = (U_b + \mu_b) |0, 1\rangle + \sqrt{2}\Omega |2, 0\rangle. \tag{A.33}$$



Assim, podemos facilmente encontrar os elementos da matriz que representa o hamiltoniano (A.24) no espaço de Fock,

$$\langle 2, 0 | H | 2, 0 \rangle = 4U_a + 2\mu_a, \quad (\text{A.34})$$

$$\langle 0, 1 | H | 2, 0 \rangle = \sqrt{2}\Omega, \quad (\text{A.35})$$

$$\langle 2, 0 | H | 0, 1 \rangle = \sqrt{2}\Omega, \quad (\text{A.36})$$

$$\langle 0, 1 | H | 0, 1 \rangle = U_b + \mu_b. \quad (\text{A.37})$$

Portanto, para  $N = 2$ , obtemos o hamiltoniano,

$$\begin{pmatrix} 4U_a + 2\mu_a & \sqrt{2}\Omega \\ \sqrt{2}\Omega & U_b + \mu_b \end{pmatrix}. \quad (\text{A.38})$$

### A.2.2 $N = 3$

Neste caso, temos  $d = 2$  e a base  $\{|3, 0\rangle, |1, 1\rangle\}$ . Aplicando o hamiltoniano (A.24) aos vetores da base do espaço dos estados e utilizando (A.31), encontramos

$$H|3, 0\rangle = (9U_a + 3\mu_a)|3, 0\rangle + \sqrt{6}\Omega|1, 1\rangle, \quad (\text{A.39})$$

$$H|1, 1\rangle = (U_a + U_{ab} + U_b + \mu_a + \mu_b)|1, 1\rangle + \Omega\sqrt{6}|3, 0\rangle. \quad (\text{A.40})$$

Podemos, portanto encontrar os elementos da matriz da representação matricial do hamiltoniano (A.24) no espaço de Fock,

$$\langle 3, 0 | H | 3, 0 \rangle = 9U_a + 3\mu_a, \quad (\text{A.41})$$

$$\langle 1, 1 | H | 3, 0 \rangle = \sqrt{6}\Omega, \quad (\text{A.42})$$

$$\langle 3, 0 | H | 1, 1 \rangle = \sqrt{6}\Omega, \quad (\text{A.43})$$

$$\langle 1, 1 | H | 1, 1 \rangle = U_a + U_{ab} + U_b + \mu_a + \mu_b. \quad (\text{A.44})$$

Portanto, para  $N = 3$ , obtemos o hamiltoniano,

$$\begin{pmatrix} 9U_a + 3\mu_a & \sqrt{6}\Omega \\ \sqrt{6}\Omega & U_a + U_{ab} + U_b + \mu_a + \mu_b \end{pmatrix}. \quad (\text{A.45})$$

### A.2.3 $N = 9$

Neste caso, temos  $d = 5$  e a base do espaço dos estados  $\{|9, 0\rangle, |7, 1\rangle, |5, 2\rangle, |3, 3\rangle, |1, 4\rangle\}$ . Aplicando o hamiltoniano (A.24) aos vetores da base, utilizando (A.31) e seguindo os mesmos passos das subseções anteriores, encontramos

$$\begin{pmatrix} h_{11} & 6\sqrt{2}\Omega & 0 & 0 & 0 \\ 6\sqrt{2}\Omega & h_{22} & 2\sqrt{21}\Omega & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{21}\Omega & h_{33} & 2\sqrt{15}\Omega & 0 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{15}\Omega & h_{44} & 2\sqrt{6}\Omega \\ 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{6}\Omega & h_{55} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.46})$$

com os elementos da diagonal principal dependendo apenas dos parâmetros de interação e dos potenciais externos,

$$h_{11} = 81U_a + 9\mu_a, \quad (\text{A.47})$$

$$h_{22} = 49U_a + 7U_{ab} + U_b + 7\mu_a + \mu_b, \quad (\text{A.48})$$

$$h_{33} = 25U_a + 10U_{ab} + 4U_b + 5\mu_a + 2\mu_b, \quad (\text{A.49})$$

$$h_{44} = 9U_a + 9U_{ab} + 9U_b + 3\mu_a + 3\mu_b, \quad (\text{A.50})$$

$$h_{55} = U_a + 4U_{ab} + 16U_b + \mu_a + 4\mu_b, \quad (\text{A.51})$$

enquanto que imediatamente acima e abaixo da diagonal principal os termos dependem apenas da amplitude de interconversão.

### A.2.4 $N = 10$

Neste caso, temos  $d = 6$  e a base do espaço dos estados  $\{|10, 0\rangle, |8, 1\rangle, |6, 2\rangle, |4, 3\rangle, |2, 4\rangle, |0, 5\rangle\}$ . Aplicando o hamiltoniano (A.24) aos vetores da base do espaço dos estados, utilizando (A.31) e seguindo os mesmos passos das subseções anteriores, encontramos

$$\begin{pmatrix} h_{11} & 3\sqrt{10}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3\sqrt{10}\Omega & h_{22} & 4\sqrt{7}\Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4\sqrt{7}\Omega & h_{33} & 3\sqrt{10}\Omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3\sqrt{10}\Omega & h_{44} & 4\sqrt{3}\Omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4\sqrt{3}\Omega & h_{55} & \sqrt{10}\Omega \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{10}\Omega & h_{66} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.52})$$

com os elementos da diagonal principal dependendo apenas dos parâmetros de interação e dos potenciais externos,

$$h_{11} = 100U_a + 10\mu_a, \quad (\text{A.53})$$

$$h_{22} = 64U_a + 8U_{ab} + U_b + 8\mu_a + \mu_b, \quad (\text{A.54})$$

$$h_{33} = 36U_a + 12U_{ab} + 4U_b + 6\mu_a + 2\mu_b, \quad (\text{A.55})$$

$$h_{44} = 16U_a + 12U_{ab} + 9U_b + 4\mu_a + 3\mu_b, \quad (\text{A.56})$$

$$h_{55} = 4U_a + 8U_{ab} + 16U_b + 2\mu_a + 4\mu_b, \quad (\text{A.57})$$

$$h_{66} = 25U_b + 5\mu_b, \quad (\text{A.58})$$

enquanto que imediatamente acima e abaixo da diagonal principal os termos dependem apenas da amplitude de interconversão,  $\Omega$ .

## Apêndice B

# Realizações da álgebra de Yang-Baxter

Quando se deseja construir um modelo integrável, um dos primeiros aspectos a ser considerado é a determinação de uma realização da álgebra de Yang-Baxter. A realização mais simples é obtida da própria matriz  $R$ , uma vez que é óbvio das eqs. ((2.6),(2.8)) que a identificação  $L(u) = R(u)$  pode ser feita. Esta é, de fato, a realização utilizada na construção do modelo de Heisenberg [77, 78]. Uma outra realização é dada por  $L(u) = G$ , onde  $G$  é uma matriz  $2 \times 2$  arbitrária cujos elementos não dependem de  $u$ . Isto segue do fato que  $[R(u), G \otimes G] = 0$ . No caso específico dos modelos integráveis para condensados de Bose-Einstein as seguintes realizações podem ser utilizadas,

- Existe uma realização em termos dos operadores bosônicos canônicos  $a, a^\dagger$  com relações de comutação dadas por  $[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0, [a, a^\dagger] = 1$ , que vale

$$L^a(u) = \begin{pmatrix} u + \eta N & a \\ a^\dagger & \eta^{-1} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

com  $N = a^\dagger a$ .

- Também existe uma realização em termos da álgebra de Lie  $su(2)$  com geradores  $S^z$  e  $S^\pm$  [77, 78],

$$L^S(u) = \frac{1}{u} \begin{pmatrix} u - \eta S^z & -\eta S^+ \\ -\eta S^- & u + \eta S^z \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

sujeitos às relações de comutação

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

Note que quando a álgebra  $su(2)$  é a representação de  $spin - 1/2$ , o operador  $L$  resultante é equivalente ao dado pela matriz  $R$  (2.5).

- Outra realização é obtida em termos dos geradores da álgebra  $su(1|1)$ ,  $K^z$  e  $K^\pm$  [79, 80],

$$L^K(u) = \begin{pmatrix} u + \eta K^z & \eta K^- \\ -\eta K^+ & u - \eta K^z \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

sujeitos as relações de comutação

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

Nesta tese utilizamos combinações destas realizações para construir o modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados (cap. 2) e o modelo para condensados de Bose-Einstein do tipo atômico-molecular (Cap. 3).

## Apêndice C

# Método algébrico do ansatz de Bethe

Neste apêndice vamos apresentar a derivação das equações do ansatz de Bethe e os autovalores de energia para o hamiltoniano (2.4). Para isto, devemos resolver o problema de autovalores da matriz de transferência

$$t(u)|\vec{v}\rangle = \Lambda|\vec{v}\rangle \quad (\text{C.1})$$

Lembramos que a matriz de transferência é definida como  $t(u) = \text{Tr}(T(u))$ , onde  $T(u)$  é a matriz de monodromia

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

tal que a álgebra de Yang-Baxter para a matriz de monodromia é obedecida

$$R_{12}(u-v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u-v). \quad (\text{C.3})$$

Em particular, para o hamiltoniano (2.4) usamos a seguinte representação explícita para os elementos de  $T(u)$

$$A(u) = (u + \omega + \eta N_1)(u - \omega + \eta N_2) + a_2^\dagger a_1, \quad (\text{C.4})$$

$$B(u) = (u + \omega + \eta N_1)a_2 + \eta^{-1}a_1, \quad (\text{C.5})$$

$$C(u) = (u - \omega + \eta N_2)a_1^\dagger + \eta^{-1}a_2^\dagger, \quad (\text{C.6})$$

$$D(u) = a_1^\dagger a_2 + \eta^{-2}. \quad (\text{C.7})$$

Da álgebra de Yang-Baxter (C.3) podemos encontrar as relações de comutação entre os operadores da matriz de monodromia  $T(u)$  (C.2). Algumas destas relações de comutação serão utilizadas na derivação das equações de Yang-Baxter, entre elas,

$$[A(u), A(v)] = [D(u), D(v)] = 0, \quad (\text{C.8})$$

$$[B(u), B(v)] = [C(u), C(v)] = 0, \quad (\text{C.9})$$

$$A(u)C(v) = \frac{u-v+\eta}{u-v}C(v)A(u) - \frac{\eta}{u-v}C(u)A(v), \quad (\text{C.10})$$

$$D(u)C(v) = \frac{u-v-\eta}{u-v}C(v)D(u) + \frac{\eta}{u-v}C(u)D(v). \quad (\text{C.11})$$

Para aplicarmos o método algébrico do ansatz de Bethe devemos encontrar um estado apropriado, chamado de pseudovácuo  $|0\rangle$ , que tenha as propriedades

$$A(u)|0\rangle = a(u)|0\rangle, \quad (\text{C.12})$$

$$B(u)|0\rangle = 0, \quad (\text{C.13})$$

$$C(u)|0\rangle \neq 0, \quad (\text{C.14})$$

$$D(u)|0\rangle = d(u)|0\rangle, \quad (\text{C.15})$$

onde  $a(u)$  e  $d(u)$  são funções escalares.

Escolhemos como pseudovácuo  $|0\rangle$  o estado de vácuo no espaço de Fock, pois ele é aniquilado pelo operador  $B(u)$

$$B(u)|0\rangle = [(u+\omega+\eta N_1)a_2 + \eta^{-1}a_1]|0\rangle \quad (\text{C.16})$$

$$= 0|0\rangle \quad (\text{C.17})$$

Assim, os autovalores  $a(u)$  e  $d(u)$  de  $A(u)$  e de  $D(u)$ , respectivamente, sobre  $|0\rangle$  são

$$a(u) = (u+\omega)(u-\omega), \quad (\text{C.18})$$

$$d(u) = \eta^{-2}. \quad (\text{C.19})$$

Escolhemos agora o estado de Bethe como

$$|\vec{v}\rangle \equiv |v_1, \dots, v_M\rangle = \prod_{i=1}^M C(v_i)|0\rangle. \quad (\text{C.20})$$

De (C.9) vemos que a ordem em que os  $C$ 's aparecem em (C.20) não é importante. Usando as relações de comutação (C.10) e (C.11), bem como a ação dos operadores no vácuo (C.12) e (C.15), podemos determinar a ação de  $t(u)$  sobre  $|\vec{v}\rangle$ . Obtemos,

$$\begin{aligned}
 t(u)|\vec{v}\rangle &= (A(u) + D(u))|\vec{v}\rangle \\
 &= \Lambda(u, \vec{v})|\vec{v}\rangle \\
 &- \left( \sum_i^M \frac{\eta a(v_i)}{u - v_i} \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j + \eta}{v_i - v_j} \right) |v_1, \dots, v_{i-1}, u, v_{i+1}, \dots, v_M\rangle \\
 &+ \left( \sum_i^M \frac{\eta d(v_i)}{u - v_i} \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j} \right) |v_1, \dots, v_{i-1}, u, v_{i+1}, \dots, v_M\rangle. \quad (\text{C.21})
 \end{aligned}$$

onde

$$\Lambda(u, \vec{v}) = a(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} + d(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i}. \quad (\text{C.22})$$

Este é um procedimento padrão na área de sistemas exatamente solúveis, conhecido como método algébrico do ansatz de Bethe.

De (C.21) pode-se mostrar que  $|\vec{v}\rangle$  torna-se um autovetor da matriz de transferência com autovalor (C.22) desde que as equações do ansatz de Bethe abaixo

$$\frac{a(v_i)}{d(v_i)} = \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad j = 1, \dots, M. \quad (\text{C.23})$$

sejam satisfeitas. Neste procedimento exigimos o cancelamento dos termos indesejados (segundo e terceiro termos do lado direito da eq. (C.21)), uma vez que estes termos não são capazes de produzir um autovetor da matriz de transferência. Substituindo agora as expressões para  $a$  e  $d$  ((C.18) e (C.19)) em (C.23), as equações do ansatz de Bethe reduzem-se a

$$\eta^2(v_i^2 - \omega^2) = \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad j = 1, \dots, M. \quad (\text{C.24})$$

Para cada solução das equações do ansatz de Bethe, a energia do hamiltoniano (2.4) é obtida dos autovetores da matriz de transferência (C.22). Encontramos

$$\begin{aligned}
 E &= -\kappa \left( \eta^{-2} \prod_{i=1}^N \left( 1 + \frac{\eta}{v_i - u} \right) - \frac{\eta^2 N^2}{4} - u\eta N - u^2 \right. \\
 &\quad \left. - \eta^{-2} + \omega^2 + (u^2 - \omega^2) \prod_{i=1}^N \left( 1 - \frac{\eta}{v_i - u} \right) \right). \quad (\text{C.25})
 \end{aligned}$$



Apêndice D

## Trabalhos publicados

# The Two-Site Bose–Hubbard Model

Jon Links, Angela Foerster, Arlei Prestes Tonel and Gilberto Santos

*This work is dedicated to the memory of Daniel Arnaudon*

**Abstract.** The two-site Bose–Hubbard model is a simple model used to study Josephson tunneling between two Bose–Einstein condensates. In this work we give an overview of some mathematical aspects of this model. Using a classical analysis, we study the equations of motion and the level curves of the Hamiltonian. Then, the quantum dynamics of the model is investigated using direct diagonalization of the Hamiltonian. In both of these analyses, the existence of a threshold coupling between a delocalized and a self-trapped phase is evident, in qualitative agreement with experiments.

## 1. Introduction

The phenomenon of Bose–Einstein condensation, while predicted long ago [1, 2], is nowadays responsible for many current perspectives on the potential applications of quantum behaviour in mesoscopic systems. This point of view has arisen with the experimental observation of condensation in systems of ultracold dilute alkali gases, realized by several research groups using magnetic traps with various kinds of confining geometries [3, 4]. These types of experimental apparatus open up the possibility for studying quantum effects, such as Josephson tunneling and self-trapping [5, 6], in a macroscopic setting.

From the theoretical point of view, the two-site Bose–Hubbard model (see eq. (1) below), also known as the *canonical Josephson Hamiltonian* [7], has been a useful model in understanding tunneling phenomena. The simplicity of the model means that it is amenable to detailed mathematical analysis, as we will discuss below. However despite this apparent simplicity, the Hamiltonian captures the essence of competing linear and non-linear interactions, leading to interesting, non-trivial behaviour.

The Hamiltonian is given by

$$H = \frac{k}{8}(N_1 - N_2)^2 - \frac{\Delta\mu}{2}(N_1 - N_2) - \frac{\mathcal{E}_J}{2}(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1). \quad (1)$$

where  $b_1^\dagger, b_2^\dagger$  denote the single-particle creation operators in the two wells and  $N_1 = b_1^\dagger b_1$ ,  $N_2 = b_2^\dagger b_2$  are the corresponding boson number operators. The total boson number  $N_1 + N_2$  is conserved and set to the fixed value of  $N$ . The coupling  $k$  provides the strength of the scattering interaction between bosons,  $\Delta\mu$  is the external potential and  $\mathcal{E}_J$  is the coupling for the tunneling. The change  $\mathcal{E}_J \rightarrow -\mathcal{E}_J$  corresponds to the unitary transformation  $b_1 \rightarrow b_1, b_2 \rightarrow -b_2$ , while  $\Delta\mu \rightarrow -\Delta\mu$  corresponds to  $b_1 \leftrightarrow b_2$ . Therefore we will restrict our analysis to the case of  $\mathcal{E}_J, \Delta\mu \geq 0$ . For  $k > 0$ , following [7] it is useful to divide the parameter space into three regimes; viz. Rabi ( $k/\mathcal{E}_J \ll N^{-1}$ ), Josephson ( $N^{-1} \ll k/\mathcal{E}_J \ll N$ ) and Fock ( $N \ll k/\mathcal{E}_J$ ). For these three regimes, there is a correspondence between (1) and the motion of a pendulum [7]. In the Rabi and Josephson regimes this motion is semiclassical, in contrast to the Fock regime. For both the Fock and Josephson regimes the analogy corresponds to a pendulum with fixed length, while in the Rabi regime the length varies.

In the present work, we give an overview of some of the mathematical aspects of (1). First we give an outline of the algebraic Bethe ansatz solution of (1). Then we undertake an analysis of the classical and the quantum dynamics of the system, and discuss how the system exhibits a threshold coupling, originally identified in [8], about which the dynamics abruptly changes. Below this threshold point the dynamics is delocalised, while above it the dynamics turns out to be localized (macroscopic self-trapping). This can be seen at both the classical and quantum level. The result is in qualitative agreement with experimental results [6].

## 2. Exact Bethe ansatz solution

In this section we briefly discuss the exact Bethe ansatz solution of (1). More details can be found in [9, 10]. We begin with the  $SU(2)$ -invariant  $R$ -matrix, depending on the spectral parameter  $u$ :

$$R(u) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(u) & c(u) & 0 \\ 0 & c(u) & b(u) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

with  $b(u) = u/(u+\eta)$  and  $c(u) = \eta/(u+\eta)$ . Above,  $\eta$  is an arbitrary parameter, to be chosen later. It is easy to check that  $R(u)$  satisfies the Yang–Baxter equation

$$R_{12}(u-v)R_{13}(u)R_{23}(v) = R_{23}(v)R_{13}(u)R_{12}(u-v). \quad (3)$$

Here  $R_{jk}(u)$  denotes the matrix acting non-trivially on the  $j$ -th and  $k$ -th spaces and as the identity on the remaining space.

Next we define the Yang–Baxter algebra  $T(u)$ ,

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix} \quad (4)$$

subject to the constraint

$$R_{ab}(u-v)T_a(u)T_b(v) = T_b(v)T_a(u)R_{ab}(u-v). \quad (5)$$

We may choose the following realization for the Yang–Baxter algebra

$$\pi(T_a(u)) = L_{a1}(u+\omega)L_{a2}(u-\omega), \quad (6)$$

written in terms of the Lax operators [9]

$$L_i(u) = \begin{pmatrix} u + \eta N_i & b_i \\ b_i^\dagger & \eta^{-1} \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

Since  $L(u)$  satisfies the relation

$$R_{ab}(u-v)L_{ai}(u)L_{bi}(v) = L_{bi}(v)L_{ai}(u)R_{ab}(u-v), \quad i = 1, 2 \quad (8)$$

it is easy to check that the Yang–Baxter algebra (5) is also obeyed.

Finally, defining the transfer matrix through

$$t(u) = \pi(\text{tr}_a T_a(u)) = \pi(A(u) + D(u)) \quad (9)$$

it follows from (5) that the transfer matrix commutes for different values of the spectral parameters; i.e., the model is integrable. Now it is straightforward to check that the Hamiltonian (1) is related with the transfer matrix  $t$  (9) through

$$H = -\kappa \left( t(u) - \frac{1}{4}(t'(0))^2 - ut'(0) - \eta^{-2} + \omega^2 - u^2 \right),$$

where the following identification has been made for the coupling constants

$$\frac{k}{4} = \frac{\kappa\eta^2}{2}, \quad \frac{\Delta\mu}{2} = -\kappa\eta\omega, \quad \frac{\mathcal{E}_J}{2} = \kappa. \quad (10)$$

We can apply the algebraic Bethe ansatz method, using the Fock vacuum as the pseudovacuum, to find the Bethe ansatz equations (BAE)

$$\eta^2(v_i^2 - \omega^2) = \prod_{j \neq i}^N \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta} \quad (11)$$

and the energies of the Hamiltonian (see for example [9, 10])

$$E = -\kappa \left( \eta^{-2} \prod_{i=1}^N \left( 1 + \frac{\eta}{v_i - u} \right) - \frac{\eta^2 N^2}{4} - u\eta N - u^2 - \eta^{-2} + \omega^2 + (u^2 - \omega^2) \prod_{i=1}^N \left( 1 - \frac{\eta}{v_i - u} \right) \right). \quad (12)$$

Surprisingly this expression is independent of the spectral parameter  $u$ , which can be chosen arbitrarily.

Using the Bethe ansatz solution, it is possible to derive form factors and correlation functions. Details are given in [9]. In what follows we will investigate the classical and quantum dynamics of this model.

### 3. Classical dynamics

In this section we study a classical analogue of the model (1). Let  $N_j, \theta_j, j = 1, 2$  be quantum variables satisfying the canonical relations

$$[\theta_1, \theta_2] = [N_1, N_2] = 0, [N_j, \theta_k] = i\delta_{jk}I.$$

Using the fact that

$$\exp(i\theta_j)N_j = (N_j + 1)\exp(i\theta_j)$$

we make a change of variables from the operators  $b_j, b_j^\dagger, j = 1, 2$  via

$$b_j = \exp(i\theta_j)\sqrt{N_j}, \quad b_j^\dagger = \sqrt{N_j}\exp(-i\theta_j)$$

such that the Heisenberg canonical commutation relations are preserved. Now define the variables

$$z = (N_1 - N_2)/N$$

$$\phi = N(\theta_1 - \theta_2)/2$$

where  $z$  represents the fractional occupation difference (or the *imbalance*) and  $\phi$  the phase difference. In the classical limit where  $N$  is large, but still finite, we may equivalently consider the Hamiltonian [11, 12]

$$H(z, \phi) = \frac{\mathcal{E}_J N}{2} \left( \frac{\lambda}{2} z^2 - \beta z - \sqrt{1 - z^2} \cos(2\phi/N) \right) \quad (13)$$

where

$$\lambda = \frac{kN}{2\mathcal{E}_J}, \quad \beta = \frac{\Delta\mu}{\mathcal{E}_J}$$

and  $(z, \phi)$  are canonically conjugate variables. We note the Hamiltonian (13) obeys the symmetries

$$\begin{aligned} H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} &= -H(z, \phi + N\pi/2)|_{-\lambda, -\beta} \\ H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} &= H(-z, \phi)|_{\lambda, -\beta}. \end{aligned} \quad (14)$$

The classical dynamics is given by Hamilton's equations of motion

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\mathcal{E}_J N}{2} \left( \lambda z - \beta + \frac{z}{\sqrt{1 - z^2}} \cos(2\phi/N) \right) \\ \dot{z} &= -\frac{\partial H}{\partial \phi} = -\mathcal{E}_J \left( \sqrt{1 - z^2} \sin(2\phi/N) \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Here we would like to mention that the classical equations of motion (15) were also derived in [12]. There, however, the coupling  $\lambda$  acquired a special time dependence to study losses (decreasing in the total atom number  $N$ ) in the classical and quantum dynamics. In our approach we are considering the coupling  $\lambda$  (and consequently the total atom number  $N$ ) as a constant in time.

Now we study the fixed points of the Hamiltonian (13), determined by the condition  $\dot{z} = \dot{\phi} = 0$ . This leads to the following classification:

- $\phi = 0$  and  $z$  is a solution of

$$\lambda z - \beta = -\frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \quad (16)$$

which has a unique real solution for  $\lambda > 0$ .

- $\phi = N\pi/2$  and  $z$  is a solution of

$$\lambda z - \beta = \frac{z}{\sqrt{1-z^2}}. \quad (17)$$

This equation has either one, two or three real solutions for  $\lambda > 0$ .

From eq. (17) we can determine that there are fixed point bifurcations for certain choices of the coupling parameters. These bifurcations allow us to divide the coupling parameter space in two regions. Setting  $f(z) = \lambda z - \beta$  and  $g(z) = z(1-z^2)^{-1/2}$ , the boundary between the regions occurs when  $f(z)$  is the tangent line to  $g(z)$  at some value  $z_0$ . A standard analysis shows this occurs when  $\lambda = g'(z_0) = (1-z_0^2)^{-3/2}$ . Requiring  $f(z_0) = g(z_0)$  then yields the following relationship

$$\lambda = (1 + |\beta|^{2/3})^{3/2} \quad (18)$$

determining the boundary. This is depicted in Fig. 1.

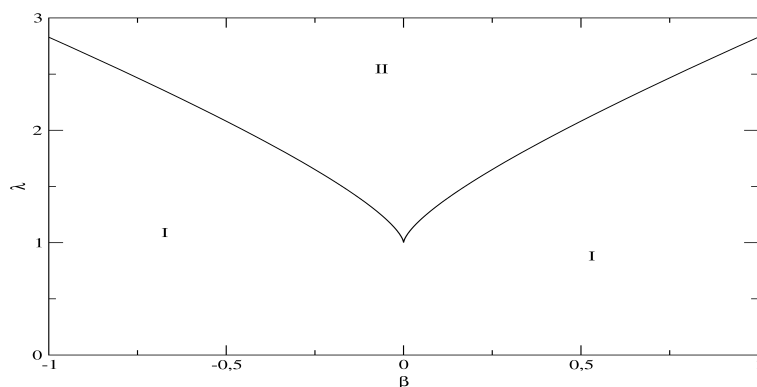


FIGURE 1. Coupling parameter space diagram identifying the different types of solutions for equation (17). In region I there is just one solution for  $z$ , a local maximum. In region II there are three solutions for  $z$ , two local maxima and a saddle point. The boundary separating regions I and II is given by (18).

This leads us to the following classification:

- $0 < \lambda < 1$ : For any value of  $\beta$  there is just one real solution, for which the Hamiltonian attains a local maximum.
- $\lambda > 1$ : Here transition couplings  $\pm\beta_0$  appear, which can be seen from Fig. 1. For  $\beta \in (-\beta_0, \beta_0)$ , the equation has two locally maximal fixed points and one saddle point, while for  $\beta > \beta_0$  or  $\beta < -\beta_0$  the equation has just one real solution, a locally maximal fixed point.

We remark that in the absence of the external potential ( $\Delta\mu = \beta = 0$ ) the transition value is given by  $\lambda_0 = 1$ . Using the symmetry relation (14) we can deduce that for the attractive case  $\lambda < 0$ ,  $\lambda_0 = -1$  is the coupling marking a bifurcation between a locally minimal fixed point (for  $\lambda > -1$ ) and two locally minimal fixed points and a saddle point (for  $\lambda < -1$ ). This is a supercritical pitchfork bifurcation of the classical ground state. The results of [13] predict that the ground-state entanglement, as measured by the von Neumann entropy, is maximal at this coupling. The numerical results of [14] confirm this.

Next we look at the dynamical evolution. In that which follows we will consider the equations (15) in the absence of the external field ( $\Delta\mu = 0$  or, equivalently,  $\beta = 0$ ). An analysis including the effect of this term can be found in references [15, 16]. We integrate (15) to find the time evolution for the imbalance  $z$ , using the initial condition  $z(0) = 1$ ,  $\phi(0) = 0$ . By plotting  $z$  against the time, it is evident that there is a threshold coupling  $\lambda_c = 2$  separating two different behaviours in the classical dynamics, as can be seen in Fig. 2:

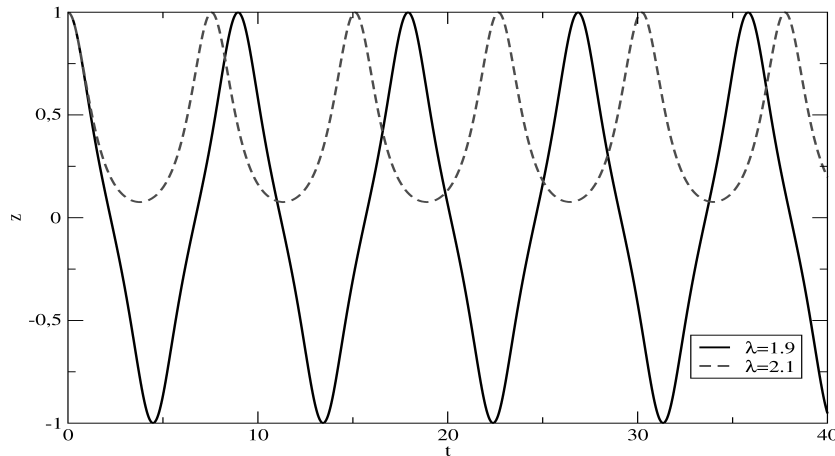


FIGURE 2. Time evolution for the imbalance  $z$ . The solid line is for  $\lambda = 1.9$ , while the dashed curve is for  $\lambda = 2.1$ . Here we are using  $N = 100$ ,  $\mathcal{E}_J = 1$  and the initial conditions  $z(0) = 1$ ,  $\phi(0) = 0$ . The threshold coupling occurs at  $\lambda_c = 2$ .

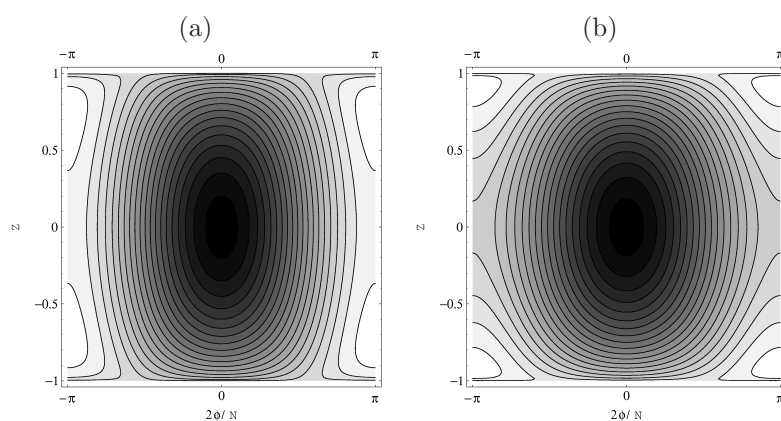


FIGURE 3. Level curves of the Hamiltonian (13) (a) for  $\lambda = 1.5$  (below the threshold point) and (b) for  $\lambda = 2.5$  (above the threshold point). We are using  $N = 100$  and  $\mathcal{E}_J = 1$ . Above the threshold coupling running phase modes occur leading to localized evolution of  $z$ . Below the threshold coupling the evolution of  $z$  is delocalised.

- (i) For  $\lambda < 2$  the system oscillates between  $z = -1$  and  $z = 1$ . Here the evolution is delocalised;
- (ii) For  $\lambda > 2$  the system oscillates between  $z = 0$  and  $z = 1$ . Here the evolution is localized.

The threshold occurring at  $\lambda_c = 2$  was first observed in [8].

To help visualize the classical dynamics, it is useful to plot the level curves (constant energy curves) of the Hamiltonian (13) in phase space. Given an initial condition  $(z(0), \phi(0))$ , the system follows a trajectory along the level curve  $H(z(0), \phi(0))$ . In Fig. 3 we plot the level curves for different values of  $\lambda$  ( $\lambda = 1.5$  on the left and  $\lambda = 2.5$  on the right), where we take  $2\phi/N \in [-\pi, \pi]$ . We can observe clearly two distinct scenarios:

- $\lambda > 2$ : Here we see that for the orbit with initial condition  $z(0) = 1$ ,  $\phi(0) = 0$ ,  $\phi$  increases monotonically (running phase mode). The evolution of  $z$  is bounded in the interval  $[0, 1]$ , leading to localization (self-trapping).
- $\lambda < 2$ : Here we see that for the orbit with initial condition  $z(0) = 1$ ,  $\phi(0) = 0$ , the evolution of  $\phi$  is oscillatory and bounded in the interval  $(-N\pi/2, N\pi/2)$ . The evolution of  $z$  is not bounded, leading to delocalization.

The threshold coupling  $\lambda_c = 2$  (or  $k/\mathcal{E}_J = 4/N$ , in terms of the original variables) separates two distinct dynamical behaviours. This value for the threshold between delocalization and self-trapping also occurs for the quantum dynamics, as we will show in the next section.



#### 4. Quantum dynamics

We will investigate the quantum dynamics of the Hamiltonian in the absence of the external potential ( $\Delta\mu = 0$ ) using the exact diagonalization method. It is well known that the time evolution of any state is determined by  $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\phi_0\rangle$ , where  $U$  is the temporal evolution operator given by  $U(t) = \sum_{m=0}^M |m\rangle\langle m| \exp(-iE_m t)$ ,  $|m\rangle$  is an eigenstate with energy  $E_m$  and  $|\phi_0\rangle$  represents the initial state. Using these expressions we can compute the expectation value of the relative number of particles

$$\langle(N_1 - N_2)(t)\rangle = \langle\Psi(t)|N_1 - N_2|\Psi(t)\rangle. \quad (19)$$

From Fig. 4 it is seen that the qualitative behaviour in each region does not depend on the number of particles. We find that in the interval  $k/\mathcal{E}_{\mathcal{J}} \in [1/N^2, 1/N]$  (close to the Rabi regime) the collapse and revival time takes the constant value  $t_{cr} = 4\pi^1$ . In the interval between  $k/\mathcal{E}_{\mathcal{J}} = 1/N$  and  $k/\mathcal{E}_{\mathcal{J}} = 1$  the system undergoes a transition from oscillations which vary between positive and negative values of  $\langle N_1 - N_2 \rangle$  (delocalised) to one where  $\langle N_1 - N_2 \rangle$  is close to  $N$  (self-trapping).

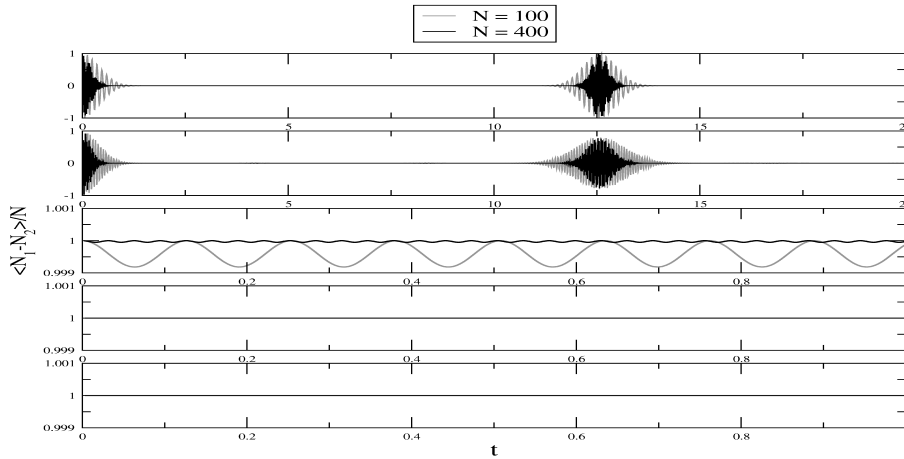


FIGURE 4. Time evolution of the expectation value for the relative number of particles for different ratios of the coupling  $k/\mathcal{E}_{\mathcal{J}}$  from the top (Rabi regime) to the bottom (Fock regime):  $k/\mathcal{E}_{\mathcal{J}} = 1/N^2, 1/N, 1, N, N^2$  for  $N = 100, 400$  and the initial state is  $|N, 0\rangle$ .

Now we focus in more detail the time evolution of the expectation value of the relative number of particles in the interval  $k/\mathcal{E}_{\mathcal{J}} \in [1/N, 1]$  In Fig. 5 we present the case  $N = 100$ : we observe the evolution of the dynamics from a collapse and

<sup>1</sup>The ratio  $k/\mathcal{E}_{\mathcal{J}} = 1/N^2$  means that we are using  $k = 1$  and  $\mathcal{E}_{\mathcal{J}} = N^2$  and similarly for the other cases.

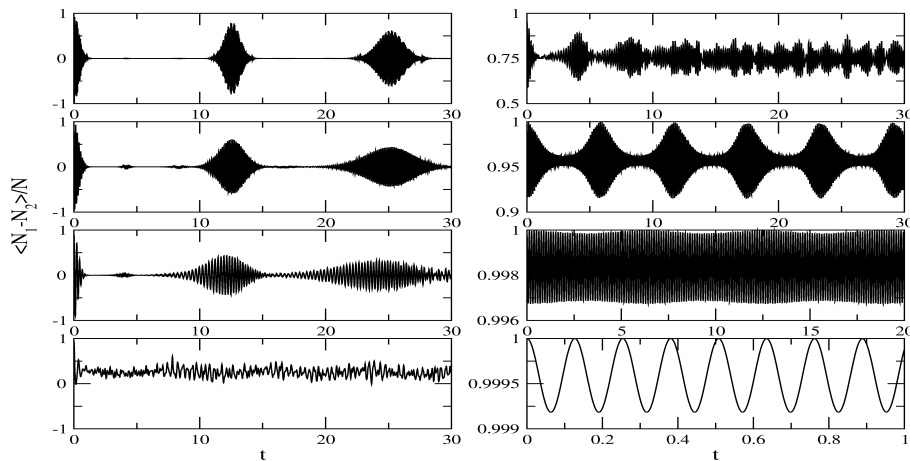


FIGURE 5. Time evolution of the expectation value between  $k/\mathcal{E}_J = 1/N$  and  $k/\mathcal{E}_J = 1$ . On the left, from the top to the bottom  $k/\mathcal{E}_J = 1/N, 2/N, 3/N, 4/N$  and on the right, from the top to the bottom  $k/\mathcal{E}_J = 5/N, 10/N, 50/N, 1$ , where  $N = 100$  and the initial state is  $|N, 0\rangle$ .

revival sequence for  $k/\mathcal{E}_J < 4/N$ , through the self-trapping transition at  $k/\mathcal{E}_J = 4/N$ , and toward small amplitude harmonic oscillations in the imbalance of the localized state when  $k/\mathcal{E}_J = 1$ . It is also interesting to observe in the localized phase  $k/\mathcal{E}_J > 4/N$  the re-emergence of a collapse and revival sequence. Further increases in  $k/\mathcal{E}_J$  lead to a decaying of the collapse and revival sequence toward harmonic oscillations which occur at  $k/\mathcal{E}_J = 1$ . A more detailed investigation, using another initial conditions can be found in ref. [17].

From the above picture it is clear that the threshold coupling  $k/\mathcal{E}_J = 4/N$  predicted by the classical analysis, representing the boundary between a delocalised evolution ( $k/\mathcal{E}_J < 4/N$ ) and self-trapped evolution ( $k/\mathcal{E}_J > 4/N$ ), also holds for the quantum dynamics.

**Acknowledgments.** AF and GS would like to thank S. R. Dahmen for discussions and CNPq-Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico for financial support. AT thanks FAPERGS-Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul for financial support. JL gratefully acknowledges funding from the Australian Research Council and The University of Queensland through a Foundation Research Excellence Award.

## References

- [1] S.N. Bose, Z. Phys. **26** (1924), 178.
- [2] A. Einstein, Phys. Math. K1 **22** (1924), 261.
- [3] E.A. Cornell and C.E. Wieman, Rev. Mod. Phys. **74** (2002), 875.
- [4] J.R. Anglin and W. Ketterle, Nature **416** (2002), 211.
- [5] J. Williams, R. Walser, J. Cooper, E.A. Cornell and M. Holland, Phys. Rev. A **61** (2000), 0336123.
- [6] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani and M.K. Oberthaler, Phys. Rev. Lett. **95** (2005), 010402.
- [7] A.J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **73** (2001), 307.
- [8] G.J. Milburn, J. Corney, E.M. Wright and D.F. Walls, Phys. Rev. A **55** (1997), 4318.
- [9] J. Links, H.-Q. Zhou, R.H. McKenzie and M.D. Gould, J. Phys. A: Math. Gen. **36** (2003), R63.
- [10] A. Foerster, J. Links, H.-Q. Zhou, in *Classical and quantum nonlinear integrable systems: theory and applications*, edited by A. Kundu (Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 2003) pp. 208–233.
- [11] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni and S.R. Shenoy, Phys. Rev. A **59** (1999), 620.
- [12] S. Kohler and F. Sols, Phys. Rev. Lett. **89** (2002), 060403.
- [13] A.P. Hines, R.H. McKenzie and G.J. Milburn, Phys. Rev. A **71** (2005), 042303.
- [14] F. Pan and J.P. Draayer, Phys. Lett. A **339** (2005), 403.
- [15] A.P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005), 6879.
- [16] P. Buonsant, R. Franzosi, V. Penna, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37** (2004), S229.
- [17] A.P. Tonel, J. Links and A. Foerster, J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005), 1235.

Jon Links

Centre for Mathematical Physics  
School of Physical Sciences  
The University of Queensland  
Queensland, 4072  
Australia  
e-mail: [jrl@maths.uq.edu.au](mailto:jrl@maths.uq.edu.au)

Angela Foerster, Arlei Prestes Tonel, Gilberto Santos  
Instituto de Física da UFRGS  
Av. Bento Gonçalves 9500,  
Porto Alegre, RS  
Brazil  
e-mail: [angela@if.ufrgs.br](mailto:angela@if.ufrgs.br)  
[prestes@if.ufrgs.br](mailto:prestes@if.ufrgs.br)  
[gfilho@if.ufrgs.br](mailto:gfilho@if.ufrgs.br)

Communicated by Vincent Rivasseau

Submitted: January 30, 2006

Accepted: June 6, 2006

# Classical and quantum dynamics of a model for atomic-molecular Bose-Einstein condensates

G. Santos,<sup>1</sup> A. Tonel,<sup>1</sup> A. Foerster,<sup>1</sup> and J. Links<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física da UFRGS, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, RS, Brazil*

<sup>2</sup>*Centre for Mathematical Physics, School of Physical Sciences, The University of Queensland, Queensland 4072, Australia*

(Received 26 October 2005; published 13 February 2006)

We study a model for a two-mode atomic-molecular Bose-Einstein condensate. Starting with a classical analysis we determine the phase space fixed points of the system. It is found that bifurcations of the fixed points naturally separate the coupling parameter space into four regions. The different regions give rise to qualitatively different dynamics. We then show that this classification holds true for the quantum dynamics.

DOI: [10.1103/PhysRevA.73.023609](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.023609)

PACS number(s): 03.75.Kk, 03.75.Hh, 05.30.Jp, 03.65.Sq

## I. INTRODUCTION

Since the early experimental realizations of Bose-Einstein condensates (BECs) using alkali-metal atoms [1,2], a significant effort has been made to produce a stable BEC in a gas of molecules [3]. To our knowledge, a molecular condensate could lead to a host of new scientific investigations that includes the quantum gas with anisotropic dipolar interactions [4], the study of rotational and vibrational energy transfer processes [5], and coherent chemistry where the reactants and products are in a coherent quantum superposition of states [6], among others. In recent years the creation of a molecular BEC from an atomic BEC has been achieved by different techniques such as photoassociation [7], two-photon Raman transition [8], and Feshbach resonance [9].

From a theoretical point of view, molecular BECs may be studied using the Gross-Pitaevski (GP) equations and mean-field theory (MFT) (e.g., see Refs. [10,11]). The GP-MFT approach reduces the full manybody problem into a set of coupled nonlinear Schrödinger equations, which are then solved numerically to obtain the Josephson-type dynamics of the coupled atomic and molecular fields. An approximation can be made to reduce the complex manybody problem into a two-mode problem. An analysis of this two-mode Hamiltonian was carried out in Ref. [10], where it was established that the quantum solutions break away from the MFT predictions in the vicinity of the dynamically unstable molecular mode due to strong quantum fluctuations. It has been shown that the two-mode Hamiltonian is an exactly solvable model in the framework of the algebraic Bethe ansatz method [12] and an analysis using these results was given in Ref. [13]. However, in most of the above investigations, the atom-atom, atom-molecule, and molecule-molecule  $S$ -wave scattering interactions were not taken into account.

In the present work we focus on a more general Hamiltonian which takes into account the  $S$ -wave scattering interactions. By means of a classical analysis we first obtain the fixed points of the system and find that the space of coupling parameters divides into four distinct regions which are determined by fixed point bifurcations. By contrast, only three such regions exist when the  $S$ -wave scattering interactions are neglected. The results allow us to qualitatively predict the dynamical behavior of the system in terms of whether the evolution is localized or delocalized. Using exact diagonalization of the Hamiltonian, we then see that the quantum

dynamics within each region has a similar character.

The paper is organized as follows: In Sec. II we present the Hamiltonian and in Sec. III a classical analysis of the model is performed. In Sec. IV we investigate the quantum dynamics through the time evolution of the expectation value of the relative atom number. Section V is reserved for a discussion of the results.

## II. THE MODEL

Let us consider the following general Hamiltonian, based on the two-mode approximation, describing the coupling between atomic and diatomic-molecular Bose-Einstein condensates:

$$H = U_a N_a^2 + U_b N_b^2 + U_{ab} N_a N_b + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \Omega (a^\dagger a^\dagger b + b^\dagger a a). \quad (1)$$

Above,  $a^\dagger$  is the creation operator for an atomic mode while  $b^\dagger$  creates a molecular mode. The Hamiltonian commutes with the total atom number  $N = N_a + 2N_b$ , where  $N_a = a^\dagger a$  and  $N_b = b^\dagger b$ . Notice that the change of variable  $\Omega \rightarrow -\Omega$  is equivalent to the unitary transformation

$$b \rightarrow -b. \quad (2)$$

The parameters  $U_j$  describe  $S$ -wave scattering, taking into account the atom-atom ( $U_a$ ), atom-molecule ( $U_{ab}$ ), and molecule-molecule ( $U_b$ ) interactions. The parameters  $\mu_i$  are external potentials and  $\Omega$  is the amplitude for the interconversion of atoms and molecules. In the limit  $U_a = U_{ab} = U_b = 0$ , (1) has been studied using a variety of methods [10,12–14]. However in the experimental context, the  $S$ -wave scattering interactions play a significant role. It will be seen below that for the general model (1) the inclusion of these scattering terms has a nontrivial consequence. We mention that generally the values for  $U_b$  and  $U_{ab}$  are unknown [6,8], although some estimates exist in the case of  $^{85}\text{Rb}$  [11].

We finally note that the Hamiltonian (1) is a natural generalization of the two-site Bose-Hubbard model

$$H = U(N_1 - N_2)^2 + \mu(N_1 - N_2) + \Omega (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) \quad (3)$$

which has been extensively studied as a model for quantum tunneling between two single-mode Bose-Einstein condensates [14–20]. Our analysis will show that despite apparent

similarities between the Hamiltonians (1) and (3), they do display some very different properties. This aspect will be discussed in Sec. V.

### III. THE CLASSICAL ANALYSIS

Let  $N_j, \theta_j$ ,  $j=a, b$  be quantum variables satisfying the canonical relations

$$[\theta_a, \theta_b] = [N_a, N_b] = 0, \quad [N_j, \theta_k] = i\delta_{jk}I.$$

Using the fact that

$$\exp(i\theta_j)N_j = (N_j + 1)\exp(i\theta_j)$$

we make a change of variables from the operators  $j, j^\dagger$ ,  $j=a, b$  via

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

such that the Heisenberg canonical commutation relations are preserved. We make a further change of variables

$$z = \frac{1}{N}(N_a - 2N_b),$$

$$N = N_a + 2N_b,$$

$$\theta = \frac{N}{4}(2\theta_a - \theta_b),$$

such that  $z$  and  $\theta$  are canonically conjugate variables; i.e.,

$$[z, \theta] = iI.$$

In the limit of large  $N$  we can now approximate the (re-scaled) Hamiltonian by

$$H = \lambda z^2 + 2\alpha z + \beta + \sqrt{2(1-z)}(1+z)\cos\left(\frac{4\theta}{N}\right) \quad (4)$$

with

$$\lambda = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} - \frac{U_{ab}}{4} + \frac{U_b}{8} \right),$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} - \frac{U_b}{8} + \frac{\mu_a}{2N} - \frac{\mu_b}{4N} \right),$$

$$\beta = \frac{\sqrt{2N}}{\Omega} \left( \frac{U_a}{2} + \frac{U_{ab}}{4} + \frac{U_b}{8} + \frac{\mu_a}{N} + \frac{\mu_b}{2N} \right),$$

where, since  $N$  is conserved, we treat it as a constant. We note that the unitary transformation (2) is equivalent to  $\theta \rightarrow \theta + N\pi/4$ . Also, since the Hamiltonian (1) is time-reversal invariant, we will hereafter restrict our analysis to the case  $\lambda \geq 0$ .

We now regard Eq. (4) as a classical Hamiltonian and investigate the fixed points of the system. The first step is to find Hamilton's equations of motion which yield

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \theta} = -\frac{4}{N}\sqrt{2(1-z)}(1+z)\sin\left(\frac{4\theta}{N}\right),$$

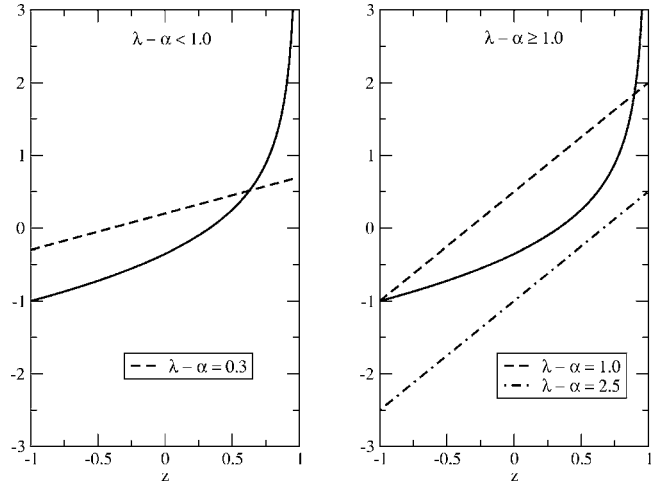


FIG. 1. Graphical solution of Eq. (6). The crossing between the straight line [left-hand side of Eq. (6)] and the curve [right-hand side of Eq. (6)] for different  $\lambda - \alpha$  values represents the solution(s) for each case. There is just one solution on the left ( $\lambda - \alpha < 1$ ), while there are either two solutions or no solution on the right ( $\lambda - \alpha \geq 1$ ).

$$-\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial z} = 2\lambda z + 2\alpha + \frac{1-3z}{\sqrt{2(1-z)}}\cos\left(\frac{4\theta}{N}\right).$$

The fixed points of the system are determined by the condition

$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \frac{\partial H}{\partial z} = 0. \quad (5)$$

Due to the periodicity of the solutions, below we restrict to  $\theta \in [0, N\pi/2)$ . This leads to the following classification:

$\theta = N\pi/4$ , and  $z$  is a solution of

$$\lambda z + \alpha = \frac{1-3z}{2\sqrt{2(1-z)}}$$

which has no solution for  $\lambda - \alpha < -1$  while there is a unique locally minimal solution for  $\lambda - \alpha \geq -1$ .

$\theta = 0$ , and  $z$  is a solution of

$$\lambda z + \alpha = \frac{3z-1}{2\sqrt{2(1-z)}} \quad (6)$$

which has a unique locally maximal solution for  $\lambda - \alpha < 1$  while for  $\lambda - \alpha > 1$  there are either two solutions (one locally maximal point and one saddle point) or no solutions. In Fig. 1 we present a graphical solution of Eq. (6).

$z = -1$  and  $\theta$  is a solution of

$$\cos\left(\frac{4\theta}{N}\right) = \lambda - \alpha$$

for which there are two saddle point solutions for  $|\lambda - \alpha| < 1$ .

It is also useful to identify the points  $z=1, \theta=N\pi/8$ , and  $z=1, \theta=3N\pi/8$ , where the singular derivative  $\partial H/\partial z$  changes sign. For  $z=1$  the Hamiltonian (4) is independent of  $\theta$ , so these points essentially behave like a saddle point. We re-

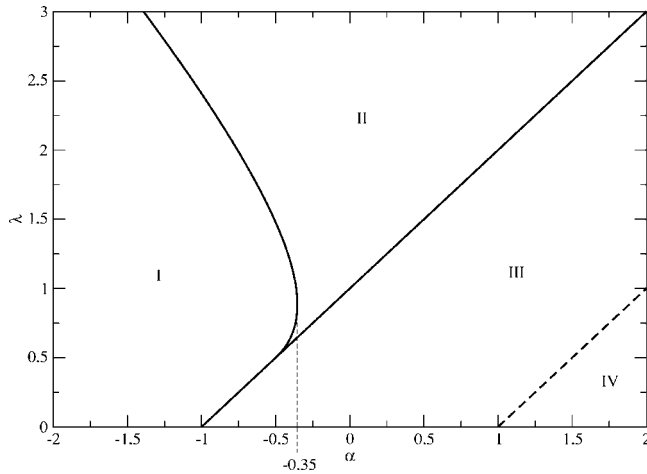


FIG. 2. Parameter space diagram identifying the different types of solution for Eq. (5). In region I there are no solutions for  $z$  when  $\theta=0$ , and one solution for  $z$  when  $\theta=N\pi/4$ . In region II there are two solutions for  $z$  when  $\theta=0$ , and one solution for  $z$  when  $\theta=N\pi/4$ . In region III exists one solution for  $z$  when  $\theta=0$ , one solution for  $z$  when  $\theta=N\pi/4$ , and two solutions for  $\theta$  when  $z=-1$ . In region IV there is one solution for  $z$  when  $\theta=0$ , and no solution for  $z$  when  $\theta=N\pi/4$ . The boundary separating regions II and III is given by  $\lambda=\alpha+1$ , while the equation  $\lambda=\alpha-1$  separates the regions III and IV. The boundary between regions I and II has been obtained numerically.

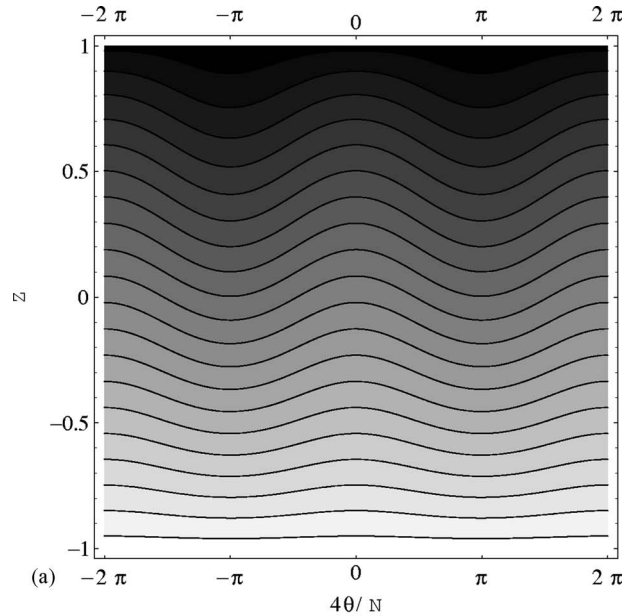
mark that Eq. (4) is also independent of  $\theta$  for  $z=-1$ .

From the above we see that there exist fixed point bifurcations for certain choices of the coupling parameters. These bifurcations allow us to divide the parameter space into four regions, as depicted in Fig. 2. The asymptotic form of the boundary between regions I and II is discussed in the Appendix.

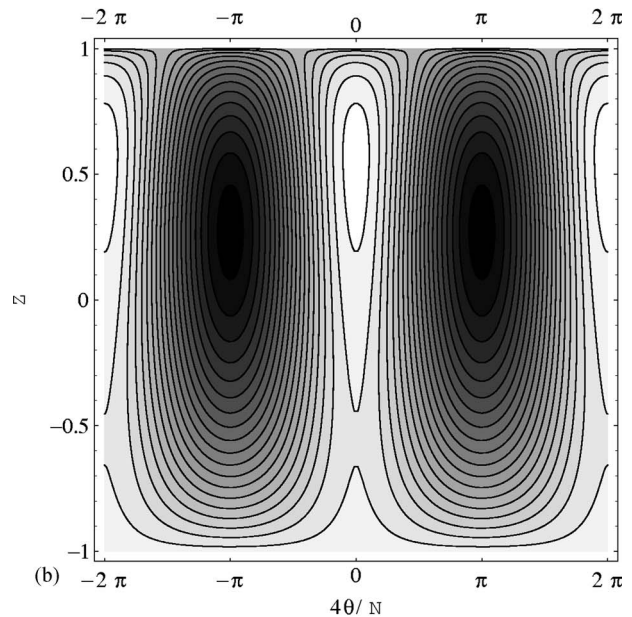
To visualize the dynamics, it is useful to plot the level curves of the Hamiltonian (4). Since the fixed point bifurcations change the topology of the level curves, qualitative differences can be observed between each of the four regions. The results are shown in Figs. 3 and 4, where for clarity we now take  $4\theta/N \in [-2\pi, 2\pi]$ .

Figure 3(a) shows the typical character of the level curves in region I. The maximal level curve occurs along the phase space boundary  $z=-1$  and there are two local minima. Note that for no choice of parameters do these minima occur on the boundary  $z=1$ , but they may occur arbitrarily close to this boundary. If the initial state of the system has  $z \approx 1$  then  $z$  will remain close to 1 for all subsequent times. A similar situation is true if the initial state of the system has  $z \approx -1$ . For both cases we see that the evolution of the system is localized.

As the coupling parameters are changed and the system crosses the boundary into region II, two new fixed points, a maxima and a saddle point, emerge at  $\theta=0$  which can happen for any  $z \in [-1, 1)$ . On crossing this parameter space boundary the maximum may move towards the phase space boundary  $z=1$  while the saddle point approaches  $z=-1$ . Also the two minima may move away from the phase space boundary  $z=-1$ , as depicted in Fig. 3(b). The consequence for the dynamics is that for an initial state with  $z \approx -1$  the



(a)  $4\theta/N$



(b)  $4\theta/N$

FIG. 3. Level curves of the Hamiltonian (4) in (a) region I and (b) region II. The parameter values are  $\lambda=1.0, \alpha=-8.0$  for region I and  $\lambda=1.0, \alpha=-0.2$  for region II. In region I we observe the presence of local minima for  $4\theta/N = \pm\pi$ . Besides the minima at  $4\theta/N = \pm\pi$ , two additional fixed points (a maximum and a saddle point) are apparent in region II occurring at  $\theta=0$ .

evolution of the system is still localized, but for an initial state with  $z \approx 1$  the evolution is delocalized.

Figure 4(a) illustrates what happens when the coupling parameters are tuned to cross over from region II into region III. The saddle point at  $\theta=0$  approaches  $z=-1$ , reaching the phase space boundary exactly when the coupling parameters lie in the boundary between regions II and III. The saddle point then undergoes a bifurcation into two saddle points occurring at  $z=-1$  for different values of  $\theta$  in region III. The two minima have also moved away from  $z=1$  towards  $z=-$



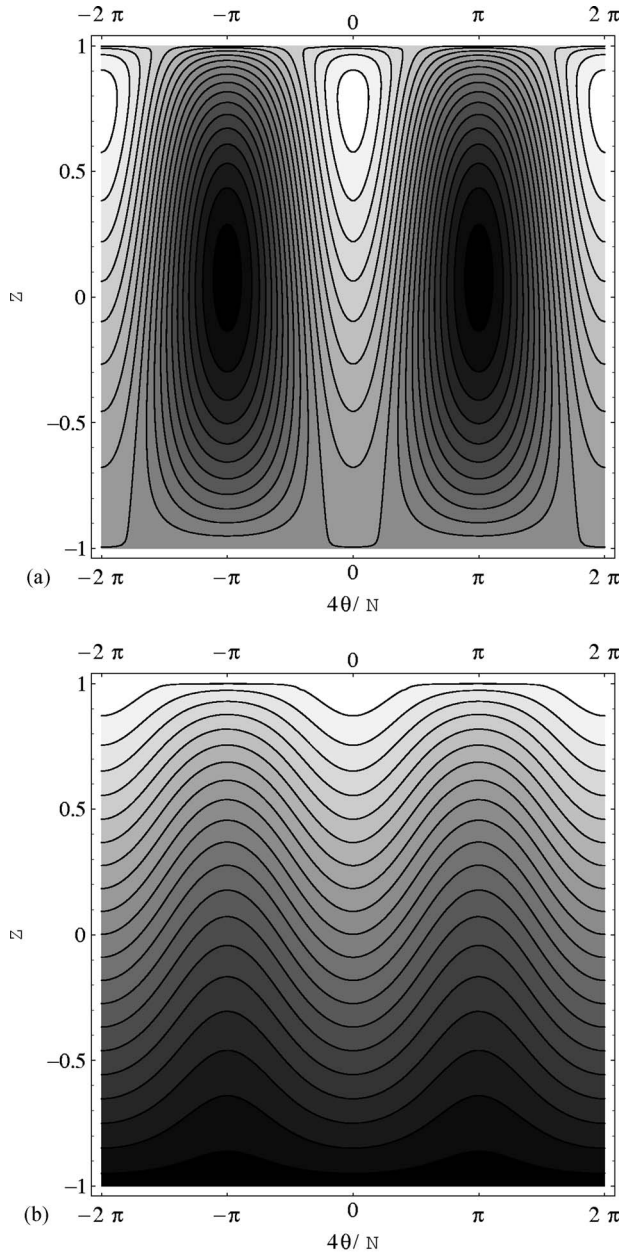


FIG. 4. Level curves of the Hamiltonian (4) in (a) region III and (b) region IV. The parameter values are  $\lambda=1.0, \alpha=0.2$  on the left and  $\lambda=1.0, \alpha=3.0$  on the right. In region III we observe the presence of minima at  $4\theta/N = \pm\pi$  and for  $\theta=0$  just one fixed point, a maximum. There are also saddle points for when  $z=-1$ . In region IV just one fixed point (a maximum) occurs for  $\theta=0$ , which always has  $z < 1$ . In contrast the global minimum occurs for  $z=-1$ .

$-1$ . Now the dynamics is delocalized for both initial states  $z \approx 1$  and  $z \approx -1$ .

It is also possible to tune the parameters to move from region I directly to region III. At the boundary between the regions, a single local maximum emerges from the point  $z = -1, \theta = 0$ . As the parameters are tuned to move away from the boundary into region III, the maximum moves towards  $z = 1$  while the minima at  $\theta = \pm N\pi/4$  approaches  $z = -1$ .

Moving from region III towards region IV causes the two saddle points for  $z = -1$  to move towards  $\theta = \pm N\pi/4$ . Again,

the two minima for  $\theta = \pm N\pi/4$  move towards  $z = -1$ . Each minimum converges with a saddle point exactly when the coupling parameters are on the boundary of regions III and IV. Varying the coupling parameters further into region IV we find that minima for the Hamiltonian are always at  $z = -1, \theta = \pm N\pi/4$ , and the local maximum for  $\theta = 0$  lies close to  $z = 1$ , as shown in Fig. 4. For this case the dynamics is localized for both initial states  $z \approx 1$  and  $z \approx -1$ .

The above discussion gives a general qualitative description of the dynamical behavior of the classical system in terms of the four regions identified in the parameter space. We emphasize that the change in the classical dynamics as the boundary between two regions is crossed is *smooth*. Nonetheless, the analysis does give a useful insight into the possible general dynamical behaviors. Below we will show that the same holds true for the quantum dynamics.

#### IV. QUANTUM DYNAMICS

Having analyzed the classical dynamics, we now want to investigate the extent to which a similar scenario holds for the quantum system. For the case  $\lambda=0$  (where the coupling for all  $S$ -wave scattering interactions is zero) the quantum dynamics has previously been studied in Refs. [10,13]. In this instance region II is not accessible. It was shown that the dynamics is delocalized for  $|\alpha| < 1$  and localized otherwise for both atomic and molecular initial states, consistent with the classical results described above. A surprising aspect of the classical analysis is the existence of region II where the evolution of a purely molecular initial state is highly localized, whereas the evolution of a purely atomic initial state is completely delocalized. We will see that this also occurs for the quantum case. Thus the inclusion of the  $S$ -wave scattering interactions into the Hamiltonian gives richer dynamics.

The time evolution of any state is given by  $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\phi\rangle$ , where  $U(t)$  is the temporal operator  $U(t) = \sum_{m=0}^M |m\rangle\langle m| \exp(-iE_m t)$ ,  $|m\rangle$  is an eigenstate with energy  $E_m$ , and  $|\phi\rangle = |N_a, N_b\rangle$  represents the initial Fock state with  $N_a$  atoms and  $N_b$  molecules such that  $N_a + 2N_b = N$ . We adopt the method of directly diagonalizing the Hamiltonian as done in [19,20] for the Bose-Hubbard Hamiltonian (3) and compute the expectation value of the relative number of atoms

$$\langle N_a(t) - 2N_b(t) \rangle = \langle \Psi(t) | N_a - 2N_b | \Psi(t) \rangle$$

using two different initial state configurations: a purely atomic state and a purely molecular state. Hereafter, we will fix the following parameters  $N=100, \Omega=1.0, \mu_a=0.0, \mu_b=0.0$ , and  $U_b=1.0$ .

In Fig. 5 we plot the expectation value of the relative number of atoms for  $\lambda=1.0$  and the choices  $\alpha = -8.0, -0.2, 0.2$ , and  $3$ . The graphs depict the quantum dynamics for those cases where the system is in regions I, II, III, and IV from top to bottom, respectively. On the left we are using a purely atomic initial state  $|N, 0\rangle$  and on the right-hand side a purely molecular initial state  $|0, N/2\rangle$ .

Figure 5 displays aspects of the quantum dynamics, such as the collapse and revival of oscillations and nonperiodic oscillations, which are not features of the corresponding classical dynamics [cf. [15] for analogous results for the Hamil-

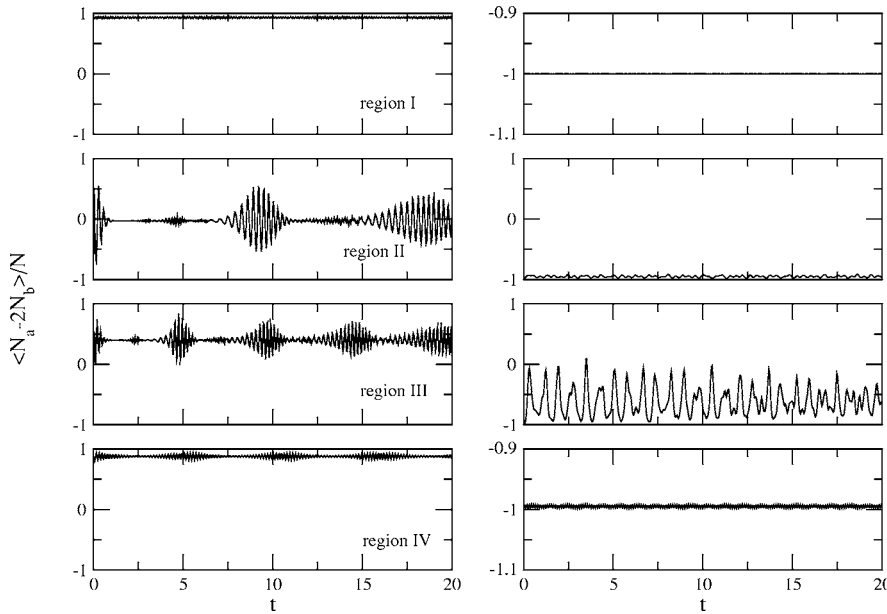


FIG. 5. Time evolution of the expectation value of the imbalance population  $\langle N_a - 2N_b \rangle / N$  in the four regions defined by the diagram with a purely atomic initial state  $|N, 0\rangle$  on the left and a purely molecular initial state  $|0, N/2\rangle$  on the right. We are using  $\lambda = 1.0$  and  $\alpha = -8.0, -0.2, 0.2, 3.0$  (or, in terms of the original variables,  $U_b = 1, U_a = -0.881, 0.222, 0.278, 0.674$  and  $U_{ab} = -1.546, 0.660, 0.774, 1.566$ ).

tonian (3)]. However, it also shows that the classification based on classical fixed point bifurcations to determine whether the dynamic evolution is localized or delocalized applies to the quantum case. In particular, in region II it is clear that for an initial atomic state the evolution is completely delocalized, but localized for an initial molecular state.

## V. DISCUSSION

Using the classical Hamiltonian (4) as an approximation to the quantum Hamiltonian (1), we have undertaken an analysis to determine the fixed points of the system. The bifurcations of the fixed points divide the coupling parameter space into different regions characterizing different dynamics, which can also be seen for the quantum dynamics. It is necessary to establish the extent to which the classical approximation is valid. Since  $\lambda$  and  $\alpha$  vary with the number of particles, it is required that the gap between successive energy levels should approach a continuum for large  $N$ . This imposes that  $\lambda, \alpha \ll N^{3/2}$ . We can compare this situation to the case of the Bose-Hubbard model (3), where a similar classical analysis is valid for  $|U/\Omega| \ll N$  [17]. It was shown in Ref. [20] that for that model there are transitions in the dynamical behavior for the quantum regime  $|U/\Omega| \gg N$ , which are not apparent from the classical analysis. These properties were found to be closely related to couplings for when the energy gap between the ground and first excited state was minimal or maximal. We should expect a similar result to occur for Eq. (1).

The relationship between fixed point bifurcations and ground-state entanglement has been studied in Ref. [25]. There it was argued that the ground-state entanglement of a quantum system will be maximal whenever the classical system undergoes a supercritical pitchfork bifurcation for the lowest energy in phase space. A peak in a measure of the ground-state entanglement has been shown in many instances to be indicative of a quantum phase transition

[21–23]. For the Hamiltonian (1) we have considered here, there are no supercritical pitchfork bifurcations. For  $\lambda = 0$  there is a quantum phase transition at  $\alpha = 1$ , as can be seen from the behavior of certain ground-state correlation functions [11,13,14]. This does correspond to a bifurcation of the lowest energy in phase space. Calculation of the ground-state entanglement in this case have been undertaken in Ref. [14], showing that it is maximal at a coupling different from the critical point.

This is in some contrast to the Bose-Hubbard model (3). There, a supercritical pitchfork bifurcation of the lowest energy occurs in the *attractive* case [18,20], and the results of Ref. [24] suggest that indeed the entanglement is maximal at this coupling. (For the repulsive case the ground-state entanglement is a smooth, monotonic function of the coupling [14].) However, the transition from localization to delocalization for the dynamics as studied in Refs. [15,19,20] does not occur at the bifurcation. Despite the apparent similarities between Eqs. (1) and (3), we can see that the interrelationship between bifurcations of the classical system and properties of the quantum system are very different.

## ACKNOWLEDGMENTS

G.S. and A.F. would like to thank S. R. Dahmen for discussions and CNPq-Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico for financial support. A.F. also acknowledges support from PRONEX under Contract No. CNPq 66.2002/1998-99. A.T. thanks FAPERGS-Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul for financial support. J.L. gratefully acknowledges funding from the Australian Research Council and financial support from the University of Queensland.

## APPENDIX

In this Appendix we analyze the boundary dividing regions I and II. In particular, we determine the asymptotic



relation between  $\lambda$  and  $\alpha$  when  $\lambda$  is large and when  $\lambda$  is close to  $\frac{1}{2}$ . We also compute the maximum value of  $\alpha$  on this boundary.

Consider

$$f(z) = \lambda z + \alpha,$$

$$g(z) = \frac{3z - 1}{2\sqrt{2(1-z)}},$$

where the fixed points occur when  $f(z) = g(z)$ . We want to determine the boundary between the cases when there is no solution and two solutions. This boundary is given by the case when  $f(z)$  is the tangent line to  $g(z)$ . Now

$$\frac{dg}{dz} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[ 3(1-z)^{-1/2} + \frac{1}{2}(3z-1)(1-z)^{-3/2} \right]$$

so  $z$  is determined by the condition

$$\lambda = \frac{dg}{dz}. \quad (\text{A1})$$

Below we consider three cases:

(i) First put  $z = -1 + u$ , where  $u$  is small and positive. Then

$$\frac{dg}{dz} \sim \frac{1}{2} + \frac{3}{16}u.$$

Solving for  $u$  gives

$$u \sim \frac{8}{3}(2\lambda - 1).$$

Now we need

$$f(z) = g(z),$$

$$\lambda(-1+u) + \alpha = \frac{1}{2\sqrt{2}}(-4+3u)(2-u)^{-1/2} \sim -1 + \frac{1}{2}u.$$

We can substitute in  $u$  to find a relation between  $\lambda$  and  $\alpha$ :

$$\alpha \sim -\frac{1}{2} + \left(\lambda - \frac{1}{2}\right) - \frac{16}{3}\left(\lambda - \frac{1}{2}\right)^2.$$

This curve is valid for  $(\lambda - \frac{1}{2})$  positive. Also

$$\left. \frac{d\alpha}{d\lambda} \right|_{\lambda=1/2} = 1$$

so the curve separating regions II and III is tangential to the curve separating regions I and III at  $\lambda = \frac{1}{2}$ .

(ii) Next we look at the case when  $z = 1 - u$  with  $u$  small and positive. Here we find

$$g = \frac{2-3u}{2\sqrt{2u}},$$

$$\sim \frac{1}{\sqrt{2u}},$$

$$\frac{dg}{dz} \sim \frac{1}{2\sqrt{2}u^{3/2}},$$

so that

$$u \sim \frac{1}{2}\lambda^{-2/3}.$$

This leads to

$$\alpha = g(z) - \lambda z \sim -\lambda + \frac{3}{2}\lambda^{1/3}. \quad (\text{A2})$$

The asymptotic equation (A2) is valid for large positive values of  $\lambda$ .

(iii) To complete the picture, finally we investigate the maximum of  $\alpha$  with respect to  $\lambda$ . From Eqs. (A1) and (A2) we have

$$\frac{d\alpha}{d\lambda} = \frac{dg}{dz} \frac{dz}{d\lambda} - \lambda \frac{dz}{d\lambda} - z \quad (\text{A3})$$

$$= -z \quad (\text{A4})$$

so the maximum occurs at  $z=0$ . Looking at the asymptotic behavior around  $z=0$  we have

$$g(z) \sim -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{5}{2}z - \frac{9}{8}z^2 \right),$$

$$\frac{dg}{dz} \sim -\frac{5}{4\sqrt{2}} \left( 1 + \frac{9}{10}z \right),$$

which gives

$$z \sim \frac{10}{9} \left( \frac{4\sqrt{2}}{5}\lambda - 1 \right).$$

Using this we can find an expression for  $\alpha$  in terms of  $\lambda$ :

$$\alpha \sim -\frac{1}{2\sqrt{2}} - \frac{25}{36\sqrt{2}} \left( \frac{4\sqrt{2}}{5}\lambda - 1 \right)^2.$$

The first term above corresponds to the maximal value of  $\alpha \approx -0.35$  as depicted in Fig. 2.

- [1] E. A. Cornell and C. E. Wieman, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 875 (2002).  
 [2] J. R. Anglin and W. Ketterle, *Nature (London)* **416**, 211 (2002).  
 [3] P. Zoller, *Nature (London)* **417**, 493 (2002).  
 [4] K. Góral, L. Santos, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **88**,

- 170406 (2002).  
 [5] J. T. Bahns, W. C. Stwalley, and P. L. Gould, *J. Chem. Phys.* **104**, 9689 (1998).  
 [6] D. J. Heinzen, R. Wynar, P. D. Drummond, and K. V. Kheruntsyan, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5029 (2000).  
 [7] N. Vanhaecke, W. de Souza Melo, B. L. Tolra, D. Comparat,

- and P. Pillet, Phys. Rev. Lett. **89**, 063001 (2002).
- [8] R. Wynar, R. S. Freeland, D. J. Han, C. Ryu, and D. J. Heinzen, Science **287**, 1016 (2000).
- [9] E. A. Donley, N. R. Claussen, S. T. Thompson, and C. E. Wieman, Nature (London) **417**, 529 (2002).
- [10] A. Vardi, V. A. Yurovsky, and J. R. Anglin, Phys. Rev. A **64**, 063611 (2001).
- [11] B. J. Cusack, T. J. Alexander, E. A. Ostrovskaya, and Y. S. Kivshar, Phys. Rev. A **65**, 013609 (2002).
- [12] J. Links, H.-Q. Zhou, R. H. McKenzie, and M. Gould, J. Phys. A **36**, R63 (2003).
- [13] H.-Q. Zhou, J. Links, and R. H. McKenzie, Int. J. Mod. Phys. B **17**, 5819 (2003).
- [14] A. P. Hines, R. H. McKenzie, and G. J. Milburn, Phys. Rev. A **67**, 013609 (2003).
- [15] G. J. Milburn, J. Corney, E. E. Wright, and D. F. Walls, Phys. Rev. A **55**, 4318 (1997).
- [16] S. Raghavan, A. Smerzi, and V. M. Kenkre, Phys. Rev. A **60**, R1787 (1999).
- [17] A. J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **73**, 307 (2001).
- [18] S. Kohler and F. Sols, Phys. Rev. Lett. **89**, 060403 (2002).
- [19] A. P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, J. Phys. A **38**, 1235 (2005).
- [20] A. P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, J. Phys. A **38**, 6879 (2005).
- [21] T. J. Osborne and M. A. Nielsen, Phys. Rev. A **66**, 032110 (2002).
- [22] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio, Nature (London) **416**, 608 (2002).
- [23] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003).
- [24] F. Pan and J. P. Draayer, Phys. Lett. A **339**, 403 (2005).
- [25] A. P. Hines, R. H. McKenzie, and G. J. Milburn, Phys. Rev. A **71**, 042303 (2005).

# Referências Bibliográficas

- [1] BOSE, S. N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese **Zeitschrift für Physik A**, Berlin, v. 26, n. 1, p. 178-181, Dez. 1924.
- [2] EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. **Sitzungsberichte der Preussichen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 22, p. 261-267, Juli 1924.
- [3] EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases - Zweite Abhandlung **Sitzungsberichte der Preussichen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 1, p. 3-14, Jan. 1925.
- [4] KETTERLE, W. Nobel lecture: when atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. **Reviews of Modern Physics**, Melville, v. 74, n. 4, p. 1131-1151, Oct. 2002.
- [5] DURFEE, D. S.; KETTERLE, W. Experimental studies of Bose-Einstein condensation. **Optics Express**, Washington, v. 2, n. 8, p. 299-313, Apr. 1998.
- [6] ANDERSON, M. H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. **Science**, Washington, v. 269, n. 7, p. 198-201, July 1995.
- [7] BRADLEY, C. C. et al. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. **Physical Review Letters**, Woodbury, v. 75, n. 9, 1687 4p., Aug. 1995.
- [8] DAVIES, K. B. et al. Bose-Einstein condensation in na gas of sodium atoms. **Physical Review Letters**, Woodbury, v. 75, n. 22, 3969 5p., Nov. 1995.
- [9] CORNELL, E. A.; WIEMAN, C. E. Nobel lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. **Reviews of Modern Physics**, Melville, v. 74, n. 3, p. 875-893, July 2002.

- 
- [10] CORNELL, E. 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.
- [11] ZOLLER, P. Making it with molecules. **Nature**, London, v. 417, n. 5, p. 493-494, May 2002.
- [12] DONLEY, E. A. et al. Atom-molecule coherence in a Bose-Einstein condensate. **Nature**, London, v. 417, n. 5, p. 529-533, May 2002.
- [13] HERBIG, J. et al. Preparation of a pure molecular quantum gas. **Science**, Washington, v. 301, n. 9, p. 1510-1513, Sept. 2003.
- [14] INOUE, S. et al. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. **Nature**, London, v. 392, n. 3, p. 151-154, Mar. 1998.
- [15] DÜRR, S. et al. Observation of molecules produced from a Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, Melville, v. 92, n. 2, 020406 4p., Jan. 2004.
- [16] CATALIOTTI, F. S. et al. Josephson arrays with Bose-Einstein condensates. **Science**, Washington, v. 293, n. 8, p. 843-846, Aug. 2001.
- [17] ALBIEZ, M. et al. Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction. **Physical Review Letters**, Melville, v. 95, n. 6, 010402 4p., July 2005.
- [18] GATI, R. et al. Realization of a single Josephson junction for Bose-Einstein condensates. **Applied Physics B**, Berlin, v. 82, n. 2, p. 207-210, Feb. 2006.
- [19] JOSEPHSON, B. D. Possible new effects in superconductive tunnelling. **Physics Letters**, Amsterdam, v. 1, n. 7, p. 251-253, June 1962.
- [20] ANDERSON, P. W.; ROWELL, J. M. Probable observation of Josephson superconducting tunnelling effect. **Physical Review Letters**, New York, v. 10, n. 6, p. 230-232, Mar. 1963.
- [21] BETHE, H. Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. **Zeitschrift für Physik A**, Berlin, v. 71, n. 3/4, p. 205-226, Mar. 1931.
- [22] YANG, C. N. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. **Physical Review Letters**, New York, v. 19, n. 23, p. 1312-1315, Dec. 1967.

- [23] BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. London: Academic Press, 1982.
- [24] TAKHTAJAN, L. A.; FADDEEV, L. D. The quantum method of the inverse problem and the Heisenberg XYZ model. **Russian Mathematical Surveys**, London, v. 34, n. 5, p. 11-68, Sept. 1979.
- [25] LIEB, E. H.; WU, F. Y. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. **Physical Review Letters**, New York, v. 20, n. 25, p. 1445-1448, June 1968.
- [26] RICHARDSON, R. W. A restricted class of exact eigenstates of the pairing-force Hamiltonian. **Physics Letters**, Amsterdam, v. 3, n. 6, p. 277-279, Feb. 1963.
- [27] LEGGETT, A. J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: some fundamental concepts. **Review of Modern Physics**, Melville, v. 73, n. 2, p. 307-356, Apr. 2001.
- [28] LIPATOV, L. N. High energy asymptotics of multi-colour QCD and exactly solvable lattice models. **JETP Lett.**, v. 59, p. 596-599, 1994.; **Pisma Zh.Eksp.Teor.Fiz.**, v. 59, p. 571-574, 1994. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/hep-th/9311037>>. Acesso em: 20 abr. 2007.
- [29] KUNDU, A. Yang-Baxter algebra and generation of quantum integrable models. **Theoretical and Mathematical Physics**, New York, v. 151, n. 3, p. 831-842, June 2007.
- [30] ORTIZ, G. et al. Exactly-solvable models derived from a generalized Gaudin algebra. **Nuclear Physics B**, Amsterdam, v. 707, n. 3, p. 421-457, Feb. 2005.
- [31] LINKS, J. et al. Algebraic Bethe ansatz method for the exact calculation of energy spectra and form factors: applications to models of Bose-Einstein condensates and metallic nanograins. **Journal Physical A**, London, v. 36, n. 19, p. R63-R104, May 2003.
- [32] FOERSTER, A.; LINKS, J. and ZHOU, H-Q. Exact solvability in contemporary physics. **Classical and Quantum Nonlinear Integrable Systems**. (I.O.P. Publishing Ltd.), 2003.
- [33] HINES, A. P.; MCKENZIE, R. H.; MILBURN, G. J. Entanglement of two-mode Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, Melville, v. 67, n. 1, 013609 10p., Jan. 2003.

- [34] TONEL, A. P.; LINKS, J.; FOERSTER, A. Quantum Dynamics of a model for two Josephson-coupled Bose-Einstein condensates. **Journal Physical A**, London, v. 38, n. 6, p. 1235-1245, Feb. 2005.
- [35] TONEL, A. P.; LINKS, J.; FOERSTER, A. Behaviour of the energy gap in a model of Josephson-coupled Bose-Einstein condensates. **Journal Physical A**, London, v. 38, n. 31, p. 6879-6891, Aug. 2005.
- [36] FOERSTER, A.; LINKS, J.; ZHOU, H.-Q. Exact solvability in contemporary physics. In: Kundu, A. (Ed.). **Classical and quantum nonlinear integrable systems**. Bristol: Institute of Physics Publishing, 2003. p. 214-239.
- [37] RAGHAVAN, S. et al. Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects,  $\pi$  oscillations, and macroscopic quantum self-trapping. **Physical Review A**, Melville, v. 59, n. 1, p. 620-633, Jan. 1999.
- [38] KOHLER, S.; SOLS, F. Oscillatory decay of a two-component Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, Melville, v. 89, n. 6, 060403 4p., July 2002.
- [39] MONTEIRO, L. H. A. Bifurcação de Forquilha. In: **Sistemas dinâmicos**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2002. p. 269-273.
- [40] WALLS, D. F. et al. Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential. **Physical Review A**, Woodbury, v. 55, n. 6, p. 4318-4324, June 1997.
- [41] MATTHEWS, M. R. et al. Watching a superfluid untwist itself: recurrence of Rabi oscillations in a Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, Melville, v. 83, n. 17, p. 3358-3361, Oct. 1999.
- [42] VARDI, A.; YUROVSKY, V. A.; ANGLIN, J. R. Quantum effects on the dynamics of a two-mode atom-molecule Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, Melville, v. 64, n. 6, 063611 5p., Nov. 2001.
- [43] ZHOU, H.-Q.; LINKS, J.; MCKENZIE, R. H. Exact solution, scaling behaviour and quantum dynamics of a model of an atom-molecule Bose-Einstein condensate. **International Journal of Modern Physics B**, Singapore, v. 17, n. 31/32, p. 5819-5828, Dec. 2003.
- [44] CUSACK, B. J. et al. Existence and stability of coupled atomic-molecular Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, Melville, v. 65, n. 1, 013609 4p., Jan. 2002.

- [45] HEINZEN, D. J. et al. Superchemistry: dynamics of coupled atomic and molecular Bose-Einstein condensates. **Physical Review Letters**, Melville, v. 84, n. 22, p. 5029-5033, May 2000.
- [46] WYNAR, R. et al. Molecules in a Bose-Einstein condensate. **Science**, Washington, v. 287, n. 2, p. 1016-1019, Feb. 2000.
- [47] SACHDEV, S. **Quantum phase transitions**. New York: Cambridge University Press, 2001.
- [48] OSTERLOH, A. et al. Scalling of entanglement close to a quantum phase transition. **Nature**, London, v. 416, n. 4, p. 608-610, Apr. 2002.
- [49] SONDHI, S. L. et al. Continuous quantum phase transition. **Review of Modern Physics**, Woodbury, v. 69, n. 1, p. 315-333, Jan. 1997.
- [50] HINES, A. P.; MCKENZIE, R. H.; MILBURN, G. J. Quantum entanglement and fixed-point bifurcations. **Physical Review A**, Melville, v. 71, n. 4, 042303 9p., Apr. 2005.
- [51] SCHNIDER, S; MILBURN, G. J. Entanglement in the steady state of a collective-angular-momentum (*Dike*) model. **Physical Review A**, Melville, v. 65, n. 3, p. 042107 5p., Mar. 2002.
- [52] NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [53] STEANE, A. Quantum computing. **Reports on Progress in Physics**, Bristol, v. 61, n. 2, p. 117-173, Feb. 1998.
- [54] BENNETT, C. H.; DIVINCENZO, D. P. Quantum information and computation. **Nature**, London, v. 404, n. 3, p. 247-255, Mar. 2000.
- [55] ZANARDI, P.; PAUNKOVIC, N. Ground state overlap and quantum phase transitions. **Physical Review E**, Melville, v. 74, n. 9, 031123 6p., Sept. 2006.
- [56] OELKERS, N.; LINKS, J. Ground-state properties of the attractive one-dimensional Bose-Hubbard model. **Physical Review B**, Melville, v. 75, n. 3, 115119 15p., Mar. 2007.

- [57] BUONSANTE, P.; VEZZANI, A. Ground-state fidelity e bipartite entanglement in the Bose-Hubbard model. **Physical Review Letters**, Melville, v. 98, n. 3, 110601 4p., Mar. 2007.
- [58] SU, S.-Q.; SONG, J.-L.; GU, S.-J. Local entanglement and quantum phase transition in a one-dimensional transverse field Ising model. **Physical Review A**, Melville, v. 74, n. 9, 032308 5p., Sept. 2006.
- [59] XIE, Q.; HAI, W. Quantum entanglement and classical bifurcation in a coupled two-component Bose-Einstein condensate. **The European Physical Journal D**, Orsay Cedex, v. 39, p. 277-282, May 2006.
- [60] LAMBERT, N.; EMARY, C.; BRANDES, T. Entanglement and the phase transition in single-mode superradiance. **Physical Review Letters**, Melville, v. 92, n. 2, 073602 4p., Feb. 2004.
- [61] GU, S.-J.; LIN, H.-Q.; LI, Y.-Q. Entanglement, quantum phase transition and scaling in the XXZ chain. **Physical Review A**, Melville, v. 68, n. 10, 042330 4p., Oct. 2003.
- [62] GU, S.-J. et al. Entanglement and quantum phase transition in the extended Hubbard model. **Physical Review Letters**, Melville, v. 93, n. 8, 086402 4p., Aug. 2004.
- [63] SU, S.-Q.; SONG, J.-L.; GU, S.-J. Local entanglement and quantum phase transition in a one-dimensional transverse field Ising model. **Physical Review A**, Melville, v. 74, n. 9, 032308 5p., Sept. 2006.
- [64] ANFOSSI, A. et al. Two-point versus multipartite entanglement in quantum phase transition. **Physical Review Letters**, Melville, v. 95, n. 7, 056402 4p., Aug. 2005.
- [65] ANFOSSI, A. et al. Entanglement in extended Hubbard models and quantum phase transitions. **Physical Review B**, Melville, v. 75, n. 4, 165106 14p., Apr. 2007.
- [66] KANAMOTO, R.; UEDA, M. Quantum phase transition in one-dimensional Bose-Einstein condensates with attractive interactions. **Physical Review A**, Melville, v. 67, n. 1, 013608 7p., Jan. 2003.
- [67] PAN, F.; DRAAYER, J. P. Quantum critical behavior of two coupled Bose-Einstein condensates. **Physics Letters A**, Amsterdam, v. 339, n. 3, p. 403-407, Mar. 2005.
- [68] LEGEZA, Ö.; SÓLYOM, J. Two-site entropy and quantum phase transitions in low-dimensional models. **Physical Review Letters**, Melville, v. 96, n. 3, 116401 4p., Mar. 2006.



- [69] LAMBERT, M.; EMARY, C.; BRANDES, T. Entanglement and entropy in a spin-boson quantum phase transition. **Physical Review A**, Melville, v. 71, n. 5, 053804 8p., May 2005.
- [70] CHEN, Y. et al. Sublattice entanglement and quantum phase transitions in antiferromagnetic spin chains. **New Journal of Physics**, v. 8, n. 97, p. 1-9, June 2006.
- [71] DUNCAN, M. et al. Emergent quantum phases in a heteronuclear molecular Bose-Einstein condensate model. **Nuclear Physics B**, Amsterdam, v. 767, n. 1, p. 227-249, Jan. 2007.
- [72] DUNNING, C.; HIBBERD, K. E.; LINKS, J. On quantum phase crossovers in finite systems. **Journal of Statistical Mechanics**, p. 1-11, Nov. 2006. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/JSTAT/2006/P11005>>. Acesso em: 20 abr. 2007. (IOP Publishing Ltd and SISSA)
- [73] LIU, B. et al. Josephson oscillation and transition to self-trapping for Bose-Einstein condensates in a triple-well trap. **Physical Review A**, Melville, v. 75, n. 3, 033601 8p., Mar. 2007.
- [74] STICKNEY, J. A.; ZOZULYA, A. A.; ANDERSON, D. Z. Transistorlike behavior of a Bose-Einstein condensate in a triple-well potential. **Physical Review A**, Melville, v. 75, n. 1, 013608 4p., Jan. 2007.
- [75] FOERSTER, A.; RAGOUCY, E. Exactly solvable models in atomic and molecular physics. **Nuclear Physics B**, Amsterdam, v. 777, p. 373-403, Apr. 2007.
- [76] MERZBACHER, E. The harmonic oscillator. In: **Quantum mechanics**. 3rd ed. Hoboken: John Wiley, 1998. p. 220-225.
- [77] SKLYANIN, E. K.; TAKHTADZHIAN, L. A.; FADDEEV, L. D. Quantum inverse problem method I. **Theoretical and Mathematical Physics**, New York, v. 40, n. 2, p. 194-220, Aug. 1979.
- [78] FADDEEV, L. D. Algebraic aspects of the Bethe ansatz. **International Journal of Modern Physics A**, Singapore, v. 10, n. 13, p. 1845-1878, May 1995.
- [79] JURCO, B. On quantum integrable models related to nonlinear quantum optics. An algebraic Bethe ansatz approach. **Journal of Mathematical Physics**, Woodbury, v. 30, n. 8, p. 1739-1743, Aug. 1989.

- [80] RYBIN, A. et al. The  $su(1,1)$  Tavis-Cummings model. **Journal Physical A**, London, v. 31, n. 20, p. 4705-4723, May 1998.