

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Quebra da Integrabilidade no Modelo do Gás de Bósons Unidimensional

Rafael Emilio Barfknecht

Porto Alegre

Maio, 2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Quebra da Integrabilidade no Modelo do Gás de Bósons Unidimensional\*

**Rafael Emilio Barfknecht**

Dissertação realizada sob orientação da Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Angela Foerster e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre

Maio, 2015

---

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

# Agradecimentos

- À Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Angela Foerster, pela valiosa orientação e pelos inestimáveis conselhos. Sem suas ideias e seu empenho este trabalho não teria se tornado uma realidade.
- A Ioannis Brouzos, pela colaboração no projeto que deu origem à esta dissertação.
- A Diefferson Rubeni, pelo apoio nas etapas iniciais deste projeto.
- Aos professores do Instituto de Física da UFRGS, que de diversas formas contribuíram para a minha formação.
- A Edith Beatriz Camaño Schettini e Jorge Hugo Silvestrini, pelos conselhos e pelo incentivo constante.
- Aos meus amigos e colegas de curso, pela companhia, pelas discussões e pela colaboração ao longo do meu período no Instituto de Física da UFRGS.
- A Marion Lucia Silvestrini, cujo afeto e paciência foram imprescindíveis ao longo dos últimos dois anos e durante a produção deste trabalho.
- À minha família: Dilamar Beatriz Barfknecht, Aline Barfknecht e Valdair José Barfknecht, por seu suporte e dedicação. Este trabalho é dedicado a eles.

*Muito Obrigado.*

# Resumo

Neste trabalho estudamos a quebra da integrabilidade no modelo fundamental de bósons com interação de contato em uma dimensão no regime repulsivo. Inicialmente, revisamos o caso integrável, onde todas as forças de interação são iguais e o modelo pode ser exatamente solucionado pelo *Ansatz* de Bethe. Em seguida, examinamos o caso não-integrável de diferentes interações entre cada par de átomos através do *Ansatz* de Jastrow. Nos concentramos no caso mais simples, onde podemos observar os efeitos da quebra da integrabilidade, a saber, o problema de três corpos. Usando o *Ansatz* de Jastrow, mostramos os efeitos da quebra da integrabilidade em quantidades mensuráveis, tais como a energia, funções de correlação, distribuição de momento e fator de estrutura. Algumas dessas propriedades exibem diferenças notáveis quando comparadas ao caso integrável.



# Abstract

In this work we study the breaking of integrability in the fundamental one-dimensional model of bosons with contact interactions in the repulsive regime. First we review the integrable case, where all interaction strengths are equal and the model can be exactly solved by the Bethe *Ansatz*. Then we examine the nonintegrable case of different interactions between each pair of atoms through the Jastrow *Ansatz*. We focus on the simplest case where we can observe the effects of broken integrability, namely the three-body problem. Using the Jastrow *Ansatz*, we show the effects of the breaking of integrability in some measurable quantities, such as the energy, correlation functions, momentum distribution and structure factor. Some of these properties exhibit remarkable differences compared to the integrable case.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Modelo Integrável do Gás de Bósons em 1D</b>	<b>5</b>
2.1	Hamiltoniano e Solução Exata . . . . .	5
2.1.1	Solução Exata para $N = 2$ . . . . .	7
2.1.2	Solução Exata para $N = 3$ . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Modelo Não-Integrável do Gás de Bósons em 1D</b>	<b>12</b>
3.1	Hamiltoniano e <i>Ansatz</i> de Jastrow . . . . .	12
3.2	Modelo de 3 Bósons com Interações Distintas . . . . .	13
3.3	Comparações com a Solução Exata . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Efeitos da Quebra da Integrabilidade</b>	<b>19</b>
4.1	Energia . . . . .	19
4.2	Função de Correlação de uma Partícula . . . . .	20
4.3	Distribuição de Momento . . . . .	22
4.4	Função de Correlação de Pares . . . . .	25
4.5	Fator de Estrutura Estático . . . . .	27
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>30</b>
<b>A</b>	<b>Relação entre os Parâmetros de Interação: Tabela <math>g \times k</math></b>	<b>36</b>
<b>B</b>	<b>Expressões Analíticas</b>	<b>38</b>
<b>C</b>	<b>Expressão para a Distribuição de Momento</b>	<b>41</b>
<b>D</b>	<b>Expressão para o Parâmetro de Contato nos Casos Não-Integráveis</b>	<b>43</b>
<b>E</b>	<b>Programas</b>	<b>46</b>
<b>F</b>	<b>Trabalho Publicado</b>	<b>59</b>

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo de sistemas integráveis na física teve origem no desenvolvimento da mecânica clássica. Segundo Liouville, um Hamiltoniano clássico com  $N$  graus de liberdade é dito integrável se possuir um conjunto de  $N$  integrais de movimento independentes que comutam com respeito aos parênteses de Poisson (ver, por exemplo, [1]).

Em mecânica quântica, o desenvolvimento dos sistemas integráveis teve início com a solução de Hans Bethe [2] para o modelo unidimensional do magneto de Heisenberg [3]. A ideia proposta por Bethe para a construção dos autovalores e autovetores deste modelo ficou conhecida como o *Ansatz de Bethe*, tendo sido amplamente aprimorada e generalizada, e é hoje um tópico fundamental no estudo dos sistemas integráveis quânticos [4]. Entre outros modelos unidimensionais integráveis pelo *Ansatz* de Bethe estão, por exemplo, o modelo de Hubbard [5], o modelo de Lieb-Liniger [6, 7] e o modelo de Gaudin-Yang [8, 9]. Atualmente, embora existam ainda controvérsias a respeito da noção de integrabilidade quântica [10], uma definição bem aceita na área e que utilizaremos nesta dissertação é que um sistema quântico é considerado integrável se ele apresentar uma solução exata via o *Ansatz* de Bethe [4, 11].

Por outro lado, o desenvolvimento notável em técnicas de resfriamento e aprisionamento de átomos em tubos unidimensionais levou este tema para uma nova audiência, muito maior e diversificada, e tornou evidente que sistemas integráveis podem ser realizados no laboratório. Exemplos importantes incluem o modelo do gás de bósons unidimensional [12, 13], o modelo de férmions de duas componentes [14, 15] e o modelo do gás de bósons infinitamente repulsivo conhecido como gás de Tonks-Girardeau [16, 17], entre outros. Posteriormente, refinamentos técnicos no controle e manipulação dos átomos e suas interações [18, 19, 20] permitiram o surgimento de experimentos com poucas partículas tanto em sistemas de bósons [21, 22] quanto de férmions [23]. Tornou-se possível, inclusive, medir o efeito da inclusão de átomos individuais em um sistema fermiônico com armadilha harmônica [24].

Esses avanços experimentais renovaram o interesse teórico nos sistemas integráveis

unidimensionais. Algumas quantidades observáveis, como o comportamento assintótico da distribuição de momento em sistemas homogêneos [25, 26] ou com armadilhas harmônicas [27, 28], passaram a ser estudadas em detalhe. Medidas de tempo de voo em redes ópticas [29] deram origem a experimentos que confirmaram as previsões teóricas para essas propriedades [30, 31, 32, 33]. O fator de estrutura, um conceito surgido na área de matéria condensada, também foi objeto de estudos teóricos [34, 35, 36] e observação experimental [37].

Dentre esses avanços, um experimento que provocou grande impacto na área de átomos ultrafrios e provou ser de particular importância no contexto dos sistemas integráveis foi a observação de um gás de bósons unidimensional formado por  $^{87}\text{Rb}$  que não apresenta termalização mesmo após milhares de colisões [38]. Este experimento levantou naturalmente a questão: o que acontece quando a integrabilidade de um sistema é quebrada? Esta pergunta tem motivado pesquisa relacionada ao estudo da dinâmica quântica de sistemas integráveis, especialmente no comportamento do modelo unidimensional de bósons, para o qual um ensemble de Gibbs generalizado foi proposto [39]. Outra possibilidade que foi pouco explorada é como algumas propriedades físicas como funções de correlação, a distribuição de momento, o parâmetro de contato e fatores de estrutura são afetadas quando a integrabilidade é violada. Algumas diferenças são esperadas desde que Lamacraft construiu uma função de onda composta de uma porção não-difrativa e de outra difrativa [40]. Em termos teóricos, o estudo da quebra da integrabilidade neste contexto corresponde à investigação de modelos unidimensionais que não podem ser solucionados pelo *Ansatz* de Bethe. Isso pode ser obtido, por exemplo, ao considerarmos interações diferentes entre os átomos [11, 40, 41]. Experimentalmente, modelos dessa natureza são acessíveis através do estudo de misturas de bósons em diferentes estados hiperfinos, cujas interações são ajustáveis através da ressonância de Feshbach [42, 43, 44].

Neste trabalho, estamos interessados em explorar as consequências da quebra da integrabilidade em modelos de poucos átomos em uma dimensão. Para tanto, estudaremos um modelo de três bósons, no qual a interação entre um dos pares é diferente das demais, o que corresponde a um modelo não-integrável mínimo. Nossa abordagem consiste na utilização de um *Ansatz* baseado em funções de pares correlacionados, usualmente denominado *Ansatz* de Jastrow [45]. Veremos que essa diferença no Hamiltoniano terá como resultado alterações significativas no comportamento de grandezas básicas do sistema, como as funções de correlação. Verificaremos ainda que os modelos de bósons não integráveis respeitam o comportamento assintótico previsto para a distribuição de momento. Entretanto, uma nova expressão para o parâmetro de contato  $\mathcal{C}$  no regime não-integrável será necessária. Mostraremos também que o fator de estrutura estático, obtido a partir da função de correlação para os diferentes pares, apresenta também

notáveis alterações dependendo da intensidade das interações.

O desenvolvimento deste trabalho está organizado da seguinte maneira: no Capítulo 2 iremos apresentar o modelo integrável de Lieb-Liniger, que trata de bósons em uma dimensão. Vamos revisar a solução exata desse modelo para o caso de dois bósons, e desenvolver de maneira breve a função de onda de Bethe para o caso de três bósons. No Capítulo 3, analisaremos os casos não-integráveis de bósons em uma dimensão, iniciando pelo caso geral de  $N$  bósons com interações arbitrárias, para o qual vamos propor uma função tentativa. Em seguida, focaremos no modelo mínimo não-integrável de três bósons. No Capítulo 4, vamos obter resultados para esse modelo que evidenciam os efeitos da quebra da integrabilidade. Por fim, concluiremos no Capítulo 5 apresentando um resumo dos principais resultados e discutindo possíveis desenvolvimentos para os quais este trabalho pode servir de ponto de partida. Nos Apêndices, apresentaremos expressões analíticas importantes para o desenvolvimento do trabalho, bem como uma tabela contendo a relação numérica dos parâmetros utilizados no modelo. Um exemplo representativo dos programas com alguns dos resultados fundamentais aqui obtidos será também apresentado. Boa parte dos resultados apresentados nos capítulos 3 e 4 são originais e constituem a principal contribuição do autor para a área, tendo sido publicados na revista *Physical Review A* [46]. Este trabalho está incluído no Apêndice F.

# Capítulo 2

## Modelo Integrável do Gás de Bósons em 1D

Neste capítulo, faremos uma revisão de um dos modelos integráveis mais estudados e de grande interesse para a área de átomos ultrafrios: o modelo do gás de bósons com interação do tipo  $\delta$ , conhecido como modelo de Lieb-Liniger. Inicialmente, apresentaremos brevemente o modelo geral de  $N$  bósons e sua solução exata. Posteriormente, estudaremos a solução do modelo para um par de bósons, que será de especial interesse nos capítulos subsequentes, e também apresentaremos o *Ansatz* de Bethe (a função de onda tentativa que soluciona o modelo) para o caso de três bósons. Boa parte dos cálculos deste capítulo seguem os desenvolvimentos apresentados em [47, 50].

### 2.1 Hamiltoniano e Solução Exata

O modelo de Lieb-Liniger, proposto e resolvido inicialmente por E. Lieb e W. Liniger em 1963 [6, 7], é um dos modelos unidimensionais integráveis mais estudados na área. O modelo envolve  $N$  bósons com uma interação de contato do tipo  $\delta$  em um sistema de comprimento  $L$  e condições de contorno periódicas. O Hamiltoniano é dado por:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + g \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j), \quad (2.1)$$

onde  $g$  determina a intensidade das interações entre os pares de bósons. O primeiro termo corresponde à energia cinética dos  $N$  bósons, enquanto o segundo é o termo de interação de contato entre os pares de partículas. Estaremos interessados apenas em interações repulsivas, de modo que  $g > 0$ . Consideramos a energia em unidades de  $\hbar^2/mL^2$  por conveniência.

A solução proposta para o modelo por Lieb e Liniger é dada pelo *Ansatz* de Bethe

[2]:

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P A(P) \exp [i(k_{P_1}x_1 + \dots + k_{P_N}x_N)], \quad (2.2)$$

onde consideramos o ordenamento de coordenadas no domínio  $R_1 : x_1 < x_2 < \dots < x_N$  (a função de onda nos outros domínios pode ser obtida simplesmente trocando as coordenadas). Nas Eqs. 2.9 e 2.28 escrevemos explicitamente esta expressão para os casos particulares  $N = 2$  e  $N = 3$ , respectivamente. Os coeficientes  $A(P)$  são determinados pelas permutações dos *quasimomenta*  $k_P$ :

$$A(P) = C\epsilon(P) \prod_{j < k} (k_{P_j} - k_{P_k} + ig), \quad (2.3)$$

onde  $C$  é uma constante e  $\epsilon(P)$  é o símbolo de Levi-Civita:

$$\epsilon(P) \begin{cases} +1 & \text{se } P \text{ é uma permutação par,} \\ -1, & \text{se } P \text{ é uma permutação ímpar,} \\ 0, & \text{em outro caso.} \end{cases} \quad (2.4)$$

Explorando as condições de contorno periódicas,

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_N) = \psi(x_1, x_2, \dots, x_j + L, \dots, x_N), \quad (2.5)$$

obtém-se o conjunto de  $N$  equações transcendentais

$$\exp(ik_j L) = \prod_{l \neq j} \left( \frac{k_j - k_l + ig}{k_j - k_l - ig} \right), \quad (2.6)$$

que são chamadas Equações do *Ansatz* de Bethe. Esse conjunto de equações, para um dado valor de interação  $g$  fornece os  $N$  valores de *quasimomenta*  $k$  que determinam a solução do modelo. Uma vez determinados os valores de  $k$ , a energia do estado fundamental é dada por

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N k_j^2. \quad (2.7)$$

Na Fig. 2.1 temos o gráfico da energia por partícula do estado fundamental  $E/N$  em função do parâmetro  $g$ . Para  $g \rightarrow \infty$ , a energia por partícula tende ao valor previsto para o gás infinitamente repulsivo (Tonks-Girardeau).

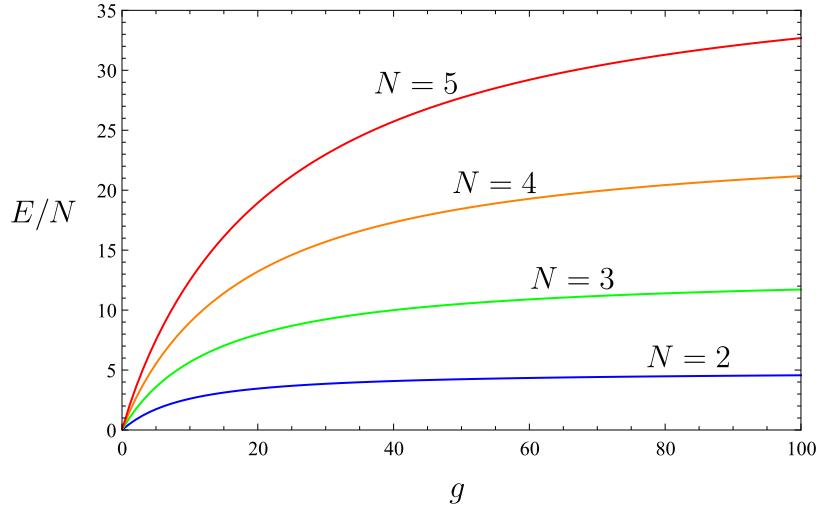


Figura 2.1: Energia por partícula em função da intensidade da interação no modelo de Lieb-Liniger para  $N = 2, 3, 4, 5$ .

### 2.1.1 Solução Exata para $N = 2$

Vamos aqui revisar a solução exata do modelo de Lieb-Liniger para dois bósons, que exemplifica as aplicações do *Ansatz* de Bethe e também serve de base para o *Ansatz* de Jastrow a ser discutido no próximo capítulo. O Hamiltoniano para o caso  $N = 2$  é dado por

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + g\delta(x_1 - x_2), \quad (2.8)$$

para o qual escrevemos o *Ansatz* de Bethe considerando o domínio fundamental  $0 < x_1 < x_2 < L$ :

$$\psi(x_1, x_2) = A(12)e^{ik_1x_1}e^{ik_2x_2} + A(21)e^{ik_1x_2}e^{ik_2x_1}. \quad (2.9)$$

O potencial do tipo delta entre o par de bósons significa que em  $x_1 = x_2$  a função de onda é contínua, mas sua derivada é descontínua. Isso é em geral representado pela seguinte relação:

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \psi|_{x_1=x_2+\varepsilon} - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \psi|_{x_1=x_2-\varepsilon} = g\psi|_{x_1=x_2}. \quad (2.10)$$

Devido à simetria da função de onda para bósons, podemos trocar as coordenadas no segundo termo e, tomando  $\varepsilon \rightarrow 0$ , obter:

$$\left( \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \psi|_{x_1=x_2} = g\psi|_{x_1=x_2}. \quad (2.11)$$



Substituindo a Eq.(2.9) na relação acima, concluímos que os coeficientes devem obedecer:

$$\frac{A(12)}{A(21)} = \frac{k_1 - k_2 + ig}{k_1 - k_2 - ig}. \quad (2.12)$$

A função de onda completa, considerando todo o domínio, é dada por:

$$\psi(x_1, x_2) \propto [k_1 - k_2 + ig \operatorname{sgn}(x_2 - x_1)] e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + [k_1 - k_2 - ig \operatorname{sgn}(x_2 - x_1)] e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1}, \quad (2.13)$$

onde a função sinal é definida como:

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0 \\ -1 & \text{se } x < 0 \end{cases}. \quad (2.14)$$

Devido às condições de contorno periódicas, essa função de onda deve obedecer  $\psi(0, x_2) = \psi(L, x_2)$  (a mesma relação para  $x_1$  é respeitada automaticamente pela simetria da função de onda). Aplicando essas condições, obtemos:

$$e^{ik_2 x_2} [(k_1 - k_2 + ig) - (k_1 - k_2 - ig) e^{ik_1 L}] = e^{ik_1 x_2} [(k_1 - k_2 - ig) - (k_1 - k_2 + ig) e^{ik_2 L}], \quad (2.15)$$

que só é válida se

$$e^{ik_1 L} = \frac{k_1 - k_2 + ig}{k_1 - k_2 - ig}, \quad e^{ik_2 L} = \frac{k_1 - k_2 - ig}{k_1 - k_2 + ig}, \quad (2.16)$$

que são as Equações do *Ansatz de Bethe* (Eqs. 2.6) para o caso  $N = 2$ . O momento total do sistema é dado por  $P = k_1 + k_2$ . Como estamos interessados no estado fundamental, podemos considerar  $P = 0$ , o que significa que  $k_1 = -k_2 = k$ . As Eqs. 2.16 se reduzem simplesmente a

$$e^{ikL} = \frac{2k + ig}{2k - ig}, \quad (2.17)$$

enquanto a função de onda do estado fundamental pode ser escrita como:

$$\psi(x_1, x_2) \propto [2k + ig \operatorname{sgn}(x_2 - x_1)] e^{ik(x_1 - x_2)} + [2k - ig \operatorname{sgn}(x_2 - x_1)] e^{ik(x_2 - x_1)}. \quad (2.18)$$

Definindo a coordenada relativa  $r \equiv x_2 - x_1$  e agrupando os termos, obtemos:

$$\psi(r) \propto 2k(e^{ikr} + e^{-ikr}) + ig \operatorname{sgn}(r)(e^{-ikr} - e^{ikr}), \quad (2.19)$$

que pode ser reescrita como

$$\psi(r) \propto 4k \cos(kr) + 2g \operatorname{sgn}(r) \sin(kr). \quad (2.20)$$

Notamos agora que tanto  $\cos(kr)$  quanto  $\text{sgn}(r) \sin(kr)$  são funções pares, o que permite escrever

$$\psi(r) \propto 4k \cos(k|r|) + 2g \sin(k|r|). \quad (2.21)$$

Da Eq.(2.17), temos que

$$g = 2k \frac{\sin(\frac{kL}{2})}{\cos(\frac{kL}{2})}. \quad (2.22)$$

Substituindo essa expressão de  $g$  na Eq.(2.21), temos

$$\psi(r) \propto 4k \cos(kr) + 4k \frac{\sin(\frac{kL}{2})}{\cos(\frac{kL}{2})} \sin(k|r|), \quad (2.23)$$

ou seja,

$$\psi(r) \propto \frac{4k}{\cos(\frac{kL}{2})} \left[ \cos(k|r|) \cos\left(\frac{kL}{2}\right) + \sin(k|r|) \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \right]. \quad (2.24)$$

Lembrando que  $\cos(\alpha) \cos(\beta) + \sin(\alpha) \sin(\beta) = \cos(\alpha - \beta)$ , obtemos

$$\psi(r) \propto \frac{4k}{\cos(\frac{kL}{2})} \cos \left[ k \left( |r| - \frac{L}{2} \right) \right]. \quad (2.25)$$

Retornando para as coordenadas originais e normalizando a função de onda, podemos escrever a solução exata do modelo de Lieb-Liniger para  $N = 2$  como [47]:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{L} \sqrt{\frac{2kL}{kL + \sin(kL)}} \cos \left[ kL \left( \frac{|x_2 - x_1|}{L} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (2.26)$$

Podemos ainda reescrever a Eq. 2.22 para obter uma relação de consistência para o vetor de onda  $k$  e o parâmetro de interação  $g$ :

$$g = 2k \tan \left( \frac{kL}{2} \right). \quad (2.27)$$

Dessa relação se pode concluir que, para  $g$  entre 0 e  $\infty$ , temos que  $k \in \{0, \pi/L\}$  (ver Apêndice A). A energia desse sistema é determinada pela expressão 2.7 e torna-se simplesmente  $E = k^2$ . Para cada valor de  $g$ , a expressão acima retorna o valor de  $k$  no estado fundamental, o que permite obter a curva dada na Fig.2.1.

Para o caso  $k = \pi/L$  (limite de Tonks-Girardeau), temos um exemplo do “mapeamento Bose-Fermi” [48], e a função de onda resulta em  $\psi(x_1, x_2) \propto \sin(\frac{\pi}{L}|x_1 - x_2|)$  [49]. Nesse caso, a repulsão entre o par de bósons impede que eles ocupem a mesma posição. O comportamento é análogo ao de férmions idênticos (que não ocupam a mesma posição devido ao princípio da exclusão de Pauli), embora a simetria da função de onda seja diferente.

Na Fig. 2.2, temos a amplitude de probabilidade  $\psi(r)$  em função da coordenada relativa  $r = |x_2 - x_1|$  para diferentes intensidades de interação. No caso não-interagente ( $k = 0, g = 0$ ), os dois bósons podem ocupar qualquer distância um do outro, como esperado. Conforme a repulsão aumenta, a probabilidade do par encontrar-se em separação  $r = 0$  diminui. No caso da repulsão infinita ( $k = \pi/L, g \rightarrow \infty$ ) a probabilidade de ocupação da mesma posição é nula. Nesse caso (linha sólida vermelha) temos um exemplo do “mapeamento Bose-Fermi”.

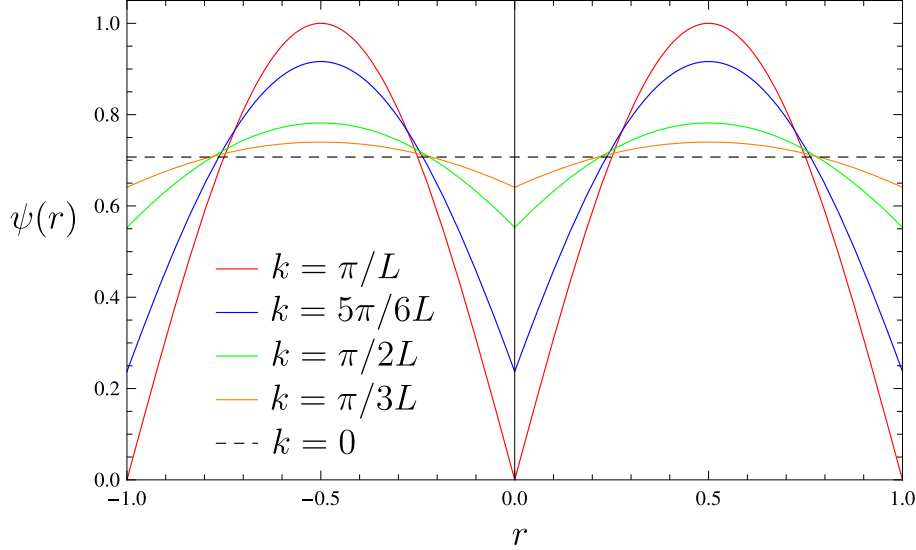


Figura 2.2: Amplitudes de probabilidade para o caso de 2 bósons em coordenadas relativas para diferentes valores de  $k$ .

### 2.1.2 Solução Exata para $N = 3$

O *Ansatz* de Bethe para 3 bósons é dado por [50]:

$$\begin{aligned}
 \psi(x_1, x_2, x_3) = & A(123)e^{ik_1x_1}e^{ik_2x_2}e^{ik_3x_3} + A(213)e^{ik_2x_1}e^{ik_1x_2}e^{ik_3x_3} \\
 & + A(132)e^{ik_1x_1}e^{ik_3x_2}e^{ik_2x_3} + A(321)e^{ik_3x_1}e^{ik_2x_2}e^{ik_1x_3} \\
 & + A(231)e^{ik_2x_1}e^{ik_3x_2}e^{ik_1x_3} + A(312)e^{ik_3x_1}e^{ik_1x_2}e^{ik_2x_3}, \quad (2.28)
 \end{aligned}$$

onde consideramos apenas a região em que  $0 < x_1 < x_2 < x_3 < L$ . A função de onda nas demais regiões pode ser obtida simplesmente permutando as coordenadas. Aplicando as condições de descontinuidade da derivada, obtemos as seguintes relações

para os coeficientes:

$$\begin{aligned}
A(123)/A(213) &= -(k_1 - k_2 + ic)/(k_1 - k_2 - ic), \\
A(123)/A(132) &= -(k_2 - k_3 + ic)/(k_2 - k_3 - ic), \\
A(213)/A(231) &= -(k_1 - k_3 + ic)/(k_1 - k_3 - ic), \\
A(132)/A(312) &= -(k_1 - k_3 + ic)/(k_1 - k_3 - ic), \\
A(321)/A(231) &= -(k_3 - k_2 + ic)/(k_3 - k_2 - ic), \\
A(321)/A(312) &= -(k_2 - k_1 + ic)/(k_2 - k_1 - ic).
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Podemos agora definir os operadores

$$Y_{ab} \equiv -(k_a - k_b + ic)/(k_a - k_b - ic), \tag{2.30}$$

cuja ação é a de permutar os índices do quasimomenta  $k$  da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
A(cba) &= Y_{ab}Y_{ac}Y_{bc}A(abc), \\
A(cba) &= Y_{bc}Y_{ac}Y_{ab}A(abc),
\end{aligned} \tag{2.31}$$

de modo que

$$Y_{ab}Y_{ac}Y_{bc} = Y_{bc}Y_{ac}Y_{ab}. \tag{2.32}$$

Essa relação de consistência é conhecida como Equação de Yang-Baxter [51, 52], e é uma condição suficiente para a integrabilidade de um modelo. Utilizando essa condição é possível determinar todos os coeficientes e escrever a função de onda exata em qualquer região. Em cada uma delas, escrevemos  $N!$  termos, o que para  $N = 3$  corresponde a um total de 36 termos para os seis possíveis ordenamentos de coordenadas. Naturalmente, esse número escala rapidamente com o aumento do número de partículas, o que torna o *Ansatz* de Bethe uma função difícil de manejar, mesmo para sistemas de poucas partículas. Tendo isso em vista, no próximo capítulo desenvolveremos uma função de onda mais simples que leva em consideração apenas as interações par a par, e analisaremos seus limites de validade dentro do modelo de bósons em uma dimensão.

# Capítulo 3

## Modelo Não-Integrável do Gás de Bósons em 1D

Neste capítulo, trataremos do estudo de sistemas de bósons em uma dimensão com interações de diferentes intensidades entre os pares. Modelos dessa natureza diferem substancialmente do modelo de Lieb-Liniger, pois deixam de ser integráveis através do *Ansatz* de Bethe. Uma vez apresentado o modelo a ser estudado, desenvolveremos um *Ansatz* de pares correlacionados, conhecido como *Ansatz* de Jastrow, inspirado na solução exata do modelo de Lieb-Liniger para duas partículas do capítulo anterior.

### 3.1 Hamiltoniano e *Ansatz* de Jastrow

Consideramos inicialmente um modelo de  $N$  bósons análogo ao modelo de Lieb-Liniger (Eq. 2.1), exceto que as interações entre os pares podem agora ter diferentes valores. O Hamiltoniano é dado por

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \sum_{i < j} g_{ij} \delta(x_i - x_j), \quad (3.1)$$

onde  $g_{ij}$  é o parâmetro de repulsão específico par a par. Ele pode ser realizável experimentalmente se consideramos um conjunto de  $N$  bósons com a mesma massa mas em estados hiperfinos diferentes. As interações nesse caso podem ser controladas através de ressonância Feshbach ou ressonância induzida por confinamento [53].

Ao contrário do modelo com interações iguais, esse Hamiltoniano não é integrável pelo *Ansatz* de Bethe, uma vez que as equações do *Ansatz* de Bethe (Eqs. 2.6) estão definidas apenas para um único parâmetro  $g$ . Para tratar o sistema descrito acima, precisamos propor uma função de onda que possa dar conta das diferentes interações entre os pares. Para tanto, utilizaremos uma função tentativa de pares correlacionados

que denominaremos *Ansatz* de Jastrow [45]:

$$\psi_J = C \prod_{i < j}^P \psi_{ij}. \quad (3.2)$$

Acima,  $C$  é uma constante de normalização e  $P$  corresponde ao produtório entre pares. Essa função, originalmente proposta por Robert Jastrow no contexto de interações nucleares de curto alcance [45] é composta pela produto da função de onda exata  $\psi_{ij}$  para um par de partículas (uma forma similar foi proposta por R. Laughlin e muito utilizada em modelos para o efeito Hall quântico [54]). No caso particular do modelo de bósons em uma dimensão, a solução exata para um par é a Eq. 2.26, ou seja

$$\psi_{ij} = c_{ij} \cos \left[ k_{ij} L \left( \frac{|x_i - x_j|}{L} - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.3)$$

onde  $k_{ij}$  é denominado “parâmetro de Jastrow” e está vinculado a  $g_{ij}$  por  $g_{ij} = 2k_{ij} \tan(k_{ij}L/2)$  (ver Eq. 2.27), com  $k_{ij}$  variando entre  $\{0, \pi/L\}$  conforme  $g_{ij}$  aumenta. Um estudo numérico dessa relação é apresentado no Apêndice A. Naturalmente, o *Ansatz* de Jastrow pode também ser aplicado ao caso integrável, apenas considerando que todos os  $g_{ij}$  e  $k_{ij}$  são iguais (na seção 3.3 faremos um estudo comparativo entre a abordagem exata e o *Ansatz* de Jastrow para alguns casos integráveis). No limite da repulsão infinita  $k_{ij} = \pi/L$ , o *Ansatz* de Jastrow corresponde à solução exata do modelo para  $N$  arbitrário [49]. No modelo de Lieb-Liniger com muitas partículas, funções tentativa nesse formato fornecem bons resultados através do método de Monte Carlo quântico [34].

## 3.2 Modelo de 3 Bósons com Interações Distintas

Para analisar efeitos da quebra da integrabilidade, é conveniente considerá-los no contexto mais simples possível, que seria o de três partículas, uma vez que o caso  $N = 2$  contém apenas um parâmetro de interação  $g$ . Podemos, por exemplo, considerar três parâmetros diferentes  $g_{12} \neq g_{13} \neq g_{23}$  [40]. Basta, no entanto, que a interação entre um dos pares seja diferente para que o Hamiltoniano deixe de ser integrável. Em um modelo mínimo não-integrável, portanto, os parâmetros de interação podem ser escritos como  $g_{12} = g_{13} = g$  e  $g_{23} = g'$ . Isso corresponde ao Hamiltoniano:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + g\delta(x_1 - x_2) + g\delta(x_1 - x_3) + g'\delta(x_2 - x_3), \quad (3.4)$$

onde permanecem válidas as unidades  $\hbar^2/mL^2$  para a energia, e as condições de contorno periódicas no sistema de comprimento  $L$ . O termo de interação do Hamiltoniano é o mesmo para os pares 12 e 13, e é diferente para o par 23 (ver Fig. 3.1). Assim, podemos considerar que o átomo de coordenada 1 está em um estado hiperfino diferente dos demais; chamaremos esse átomo distinto de bóson “impureza”, e os átomos 2 e 3 como os bósons “idênticos” ou “maioria”. Os pares 12 e 13 correspondem, portanto, a pares de bósons diferentes (bóson impureza+bóson, ou par impureza-maioria), enquanto o par 23 corresponde a um par idêntico (ou par maioria-maioria). Utilizaremos essa convenção ao longo desse trabalho. Uma vez que o *Ansatz* de Bethe coordenado do modelo de Lieb-Liniger não é capaz de capturar as propriedades físicas desse modelo, recorreremos então ao *Ansatz* de Jastrow, que escrevemos nesse caso particular como

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2, x_3) = & C \cos \left[ kL \left( \frac{|x_1 - x_2|}{L} - \frac{1}{2} \right) \right] \cos \left[ kL \left( \frac{|x_1 - x_3|}{L} - \frac{1}{2} \right) \right] \times \\ & \times \cos \left[ k'L \left( \frac{|x_2 - x_3|}{L} - \frac{1}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde  $k$  e  $k'$  são os parâmetros de Jastrow que determinam as diferentes interações entre os pares. Por simplicidade, consideraremos a partir de agora que  $L = 1$ , de modo que os parâmetros  $k$  e  $k'$  se tornam adimensionais, com  $k, k' \in \{0, \pi\}$ . Quando  $g = g'$  e  $k = k'$ , recuperamos o caso integrável para  $N = 3$ . Mesmo nessa situação, o *Ansatz* de Jastrow tem como vantagem uma redução drástica no número de termos da função de onda. Como vimos na Eq. 2.28, o *Ansatz* de Bethe para três bósons possui  $3! = 6$  termos apenas na região  $0 < x_1 < x_2 < x_3 < L$ , enquanto o *Ansatz* de Jastrow é composto por 3 termos válidos em todo o domínio. Para  $N$  arbitrário, o número de termos da função de Jastrow escala com  $N(N - 1)/2$ , o que o torna mais simples de tratar do ponto de vista numérico/computacional.

Com o objetivo de compreender melhor as propriedades do sistema que estamos considerando, na Fig. 3.1 apresentamos um esquema da situação física do modelo em três regimes diferentes.

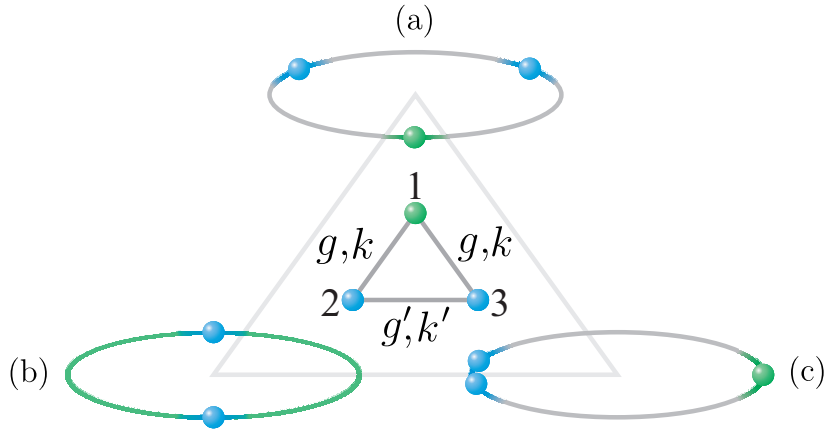


Figura 3.1: Esquema representativo do sistema de três bósons com interações diferentes. (a) Caso integrável com forte repulsão; (b) Impureza (1) fracamente interagente e par idêntico (23) com forte interação; (c) Impureza (1) fortemente interagente e par idêntico (23) com fraca interação.

No caso (a), temos o caso integrável no qual todas as interações são iguais, ou seja  $g = g'$ . Além disso, consideramos que as interações entre os três átomos são fortemente repulsivas, de forma que os três átomos encontram-se em máxima separação e fortemente localizados no sistema (mais detalhes sobre a localização das partículas na seção 4.2). No caso (b), temos o regime em que a impureza (1) interage fracamente com os átomos restantes (2 e 3), que interagem fortemente entre si. Nessa situação, o par 23 encontra-se em posições diametralmente opostas, enquanto a impureza (1) tende a “espalhar-se” sobre todas as regiões. Isso é resultado da natureza quântica das partículas que, não sofrendo os efeitos de um confinamento (tal como uma armadilha harmônica ou paredes impenetráveis) não apresentam uma localização bem-definida. Na situação (c), temos o caso oposto, em que a impureza repele fortemente o par idêntico fracamente interagente. Portanto, o par idêntico tende a agrupar-se na posição diametralmente oposta à da impureza.

Um ponto importante diz respeito à possibilidade de realização experimental de um modelo dessa natureza. A manipulação de átomos individuais já é uma realidade do ponto de vista prático, mas a maioria dos experimentos deste tipo lida com átomos em armadilhas harmônicas. Por outro lado, muitos dos resultados que obteremos para o modelo homogêneo são aproximadamente válidos para átomos no interior de uma armadilha unidimensional, uma vez que um potencial harmônico não produz um grande impacto na região central em que o potencial do tipo delta é dominante [55]; além disso, diversos avanços experimentais já permitem a realização de geometrias distintas, em especial de sistemas com condições de contorno periódicas [56, 57].



### 3.3 Comparações com a Solução Exata

Para testar a eficácia do *Ansatz* de Jastrow, faremos algumas comparações dos resultados obtidos para energia e funções de correlação em casos integráveis de três bósons utilizando esse *Ansatz* e a solução exata obtida através do *Ansatz* de Bethe para o modelo de Lieb-Liniger com  $N = 3$ .

Na Fig. 3.2, temos a comparação do resultado para a energia (normalizada pelo seu valor no limite da repulsão infinita,  $E_{\text{TG}} = 4\pi^2$  para  $N = 3$ ) em função do parâmetro  $g$ . O método de obtenção da energia para o *Ansatz* de Jastrow é dado na seção 4.1. A concordância entre os valores obtidos utilizando o *Ansatz* de Jastrow e a solução exata é excelente para qualquer valor de  $g$ . No limite em que  $g \rightarrow \infty$ , temos que  $E/E_{\text{TG}} = 1$ , como esperado.

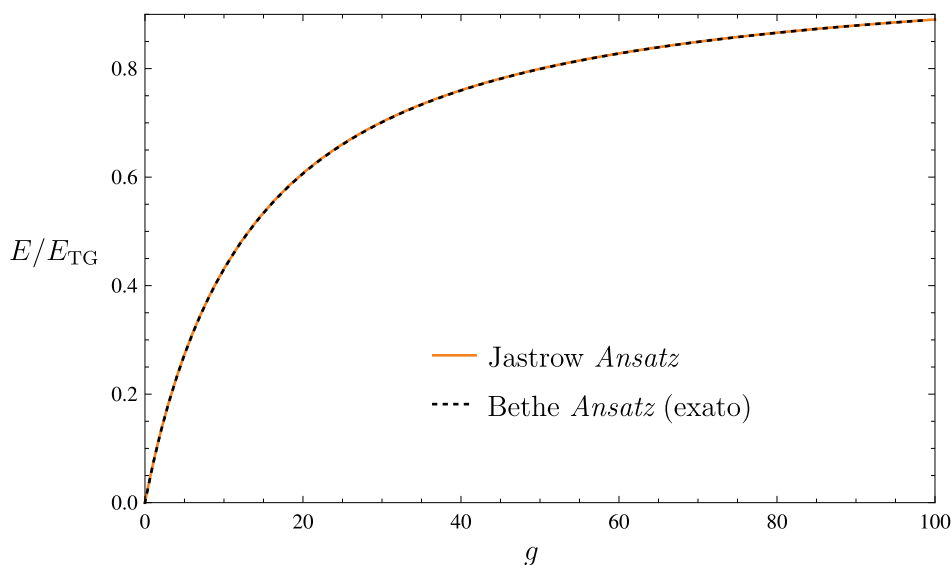


Figura 3.2: Comparação da curva de energia obtida através do *Ansatz* de Jastrow e da solução exata (*Ansatz* de Bethe) em função do parâmetro de interação  $g$ .

Outra maneira de avaliar a eficácia do *Ansatz* de Jastrow é comparar com resultados exatos para as funções de correlação. Duas quantidades são de maior relevância nesse contexto; a primeira é a função de correlação de uma partícula, definida para uma função de onda normalizada de  $N$  coordenadas como [34]

$$\rho_1(x, x') = \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi(x, x_2, \dots, x_N) \psi(x', x_2, \dots, x_N)^*. \quad (3.6)$$

Essa grandeza é análoga à matriz de densidade reduzida em sistemas na rede [58] e à função de Green de uma partícula em teoria de campos [59]. Por ser uma quantidade não-local, não é diretamente mensurável, embora existam propostas teóricas para medidas indiretas [60].

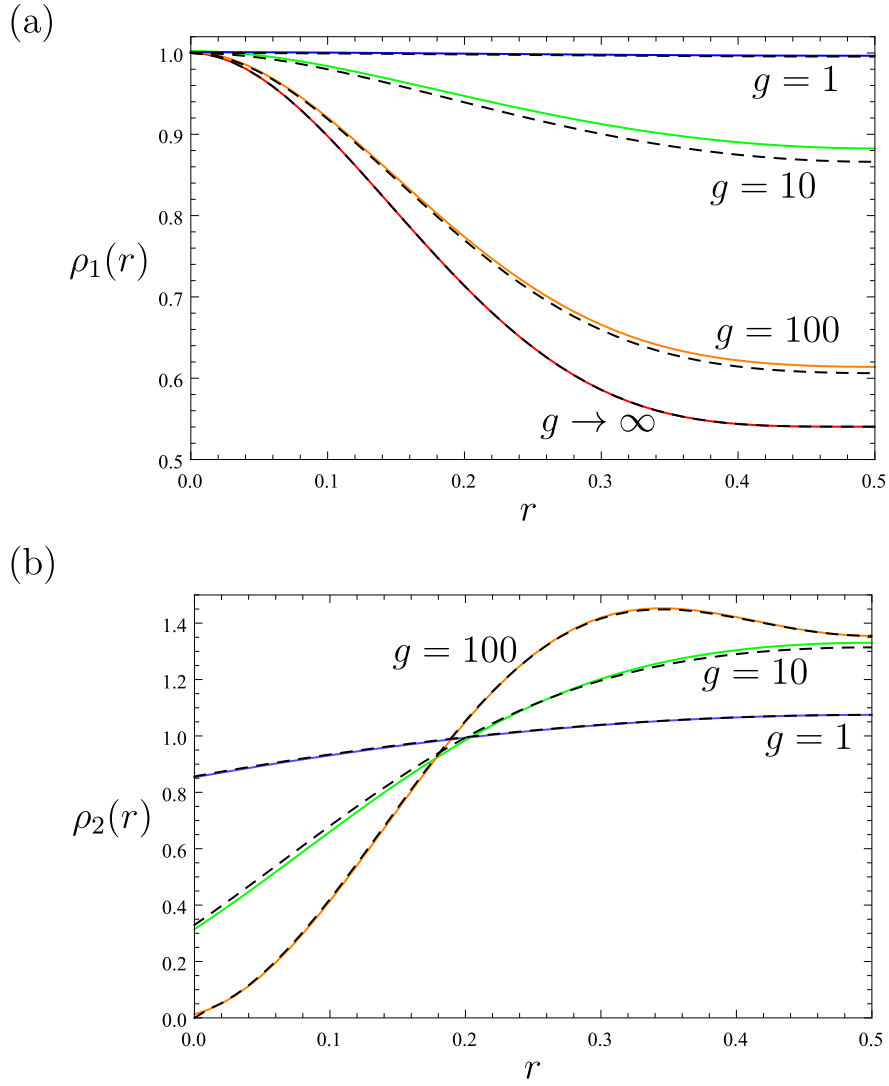


Figura 3.3: Comparação dos resultados obtidos pelo *Ansatz* de Jastrow (linhas sólidas coloridas) e pela solução exata (linhas pretas tracejadas) para (a) função de correlação de uma partícula e (b) função de correlação de pares, para diferentes interações.

Outra grandeza básica é a função de correlação de pares, definida como [47, 41]

$$\rho_2(x_1, x_2) = \int_0^L dx_3 \dots \int_0^L dx_N \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N)^* \quad (3.7)$$

que é interpretada como a probabilidade de um par de partículas encontrar-se a uma distância relativa  $|x_1 - x_2|$ .

Na Fig. 3.3 (a) comparamos resultados para a função de correlação de uma partícula  $\rho_1(r)$ , onde  $r = |x - x'|$ . Notamos que a concordância é muito boa nos limites de interação forte ( $g \rightarrow \infty$ , linha sólida vermelha) ou fraca ( $g = 1$ , linha sólida azul), como pequenos desvios nos valores intermediários de  $g$ . Na Fig. 3.3 (b), temos os resultados para a função de correlação de pares  $\rho_2(r)$  em função da coordenada relativa  $r = |x_1 - x_2|$  para diferentes interações. Novamente encontramos uma concordância

muito boa, mesmo em interações intermediárias.

Com isso, confirmamos que o *Ansatz* de Jastrow fornece bons resultados para quantidades como a energia e as funções de correlação no caso integrável. Assim, podemos supor que ele é capaz de descrever de maneira confiável as propriedades física de interesse do sistema em questão, em particular porque a distribuição de momento e o fator de estrutura são definidos a partir das funções de correlação (mais detalhes sobre essas quantidades serão discutidos no próximo capítulo).

# Capítulo 4

## Efeitos da Quebra da Integrabilidade

Neste capítulo, veremos quais efeitos a quebra da integrabilidade ( $g \neq g'$ ) tem sobre quantidades como a energia e as funções de correlação no modelo de três bósons não-integrável. Uma vez obtidas as funções de correlação, analisaremos o comportamento da distribuição de momento, do parâmetro de contato e do fator de estrutura estático nesse sistema. Parte dos resultados aqui apresentados são originais e estão descritos em [46].

### 4.1 Energia

A energia para o modelo no qual todas as interações são iguais pode ser obtida pelo *Ansatz* de Bethe, como discutido no capítulo anterior, e é dada simplesmente pela Eq. 2.7. No caso do *Ansatz* de Jastrow, porém, estamos utilizando uma função de onda que não é autofunção do Hamiltoniano. Para obter uma expressão analítica para a energia quando as interações não são iguais, calculamos o valor médio do Hamiltoniano dado na Eq. 3.4 como  $\langle \psi | H | \psi \rangle$ , onde  $|\psi\rangle$  é o *Ansatz* de Jastrow para três partículas (Eq. 3.5). É importante notar que uma vez que não temos a diagonalização exata do modelo, a energia será dada por uma expressão mais complexa que a Eq. 2.7 (o resultado analítico para a energia é dado no Apêndice B).

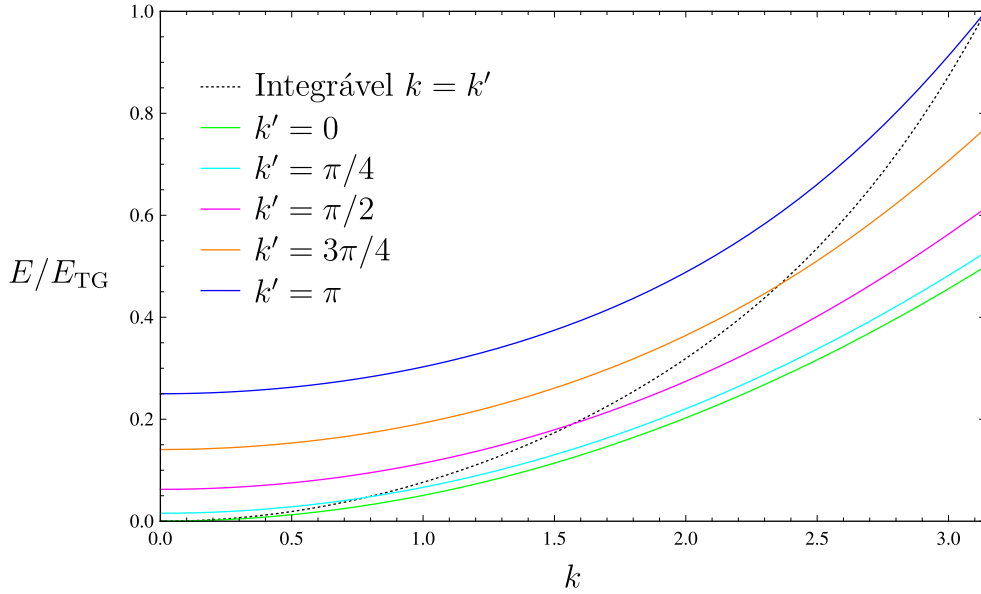


Figura 4.1: Energia (normalizada pelo seu valor no limite da repulsão infinita  $E_{TG}$ ) em função de  $k$ , para diferentes valores de  $k'$ . O caso integrável  $k = k'$  é representado na linha preta pontilhada.

Na Fig. 4.1, apresentamos os resultados para a energia (normalizada pelo seu valor no limite da repulsão infinita  $E_{TG}$ ) em função do parâmetro  $k$  obtidas utilizando o *Ansatz* de Jastrow no caso não-integrável de dois átomos e uma impureza, para diversos valores fixos de  $k'$ . Lembramos que  $k$  determina a intensidade da interação entre a impureza e os demais átomos, enquanto  $k'$  corresponde à interação entre o par idêntico. A linha pontilhada preta corresponde ao caso em que  $k = k'$ , que no limite de  $k = \pi$  deve corresponder à energia exata do modelo. É possível notar que, nos casos em que  $k \neq k'$  as curvas coloridas necessariamente cruzam a curva preta, precisamente nos pontos em que  $k' = k$ .

## 4.2 Função de Correlação de uma Partícula

Nesta seção obtemos resultados para a função de correlação de uma partícula no regime não-integrável. Essa grandeza é definida pela Eq. C.2, mas é importante notar que, no caso de átomos distinguíveis, ela pode ser obtida para o bóson impureza (1), integrando sobre as coordenadas  $x_2$  e  $x_3$ , ou para um dos bósons idênticos (2 ou 3), integrando sobre as coordenadas  $x_1$  e  $x_2$  ou  $x_1$  e  $x_3$ . Essa distinção é importante uma vez que as interações entre esses dois tipos de bósons podem ser de intensidades diferentes.

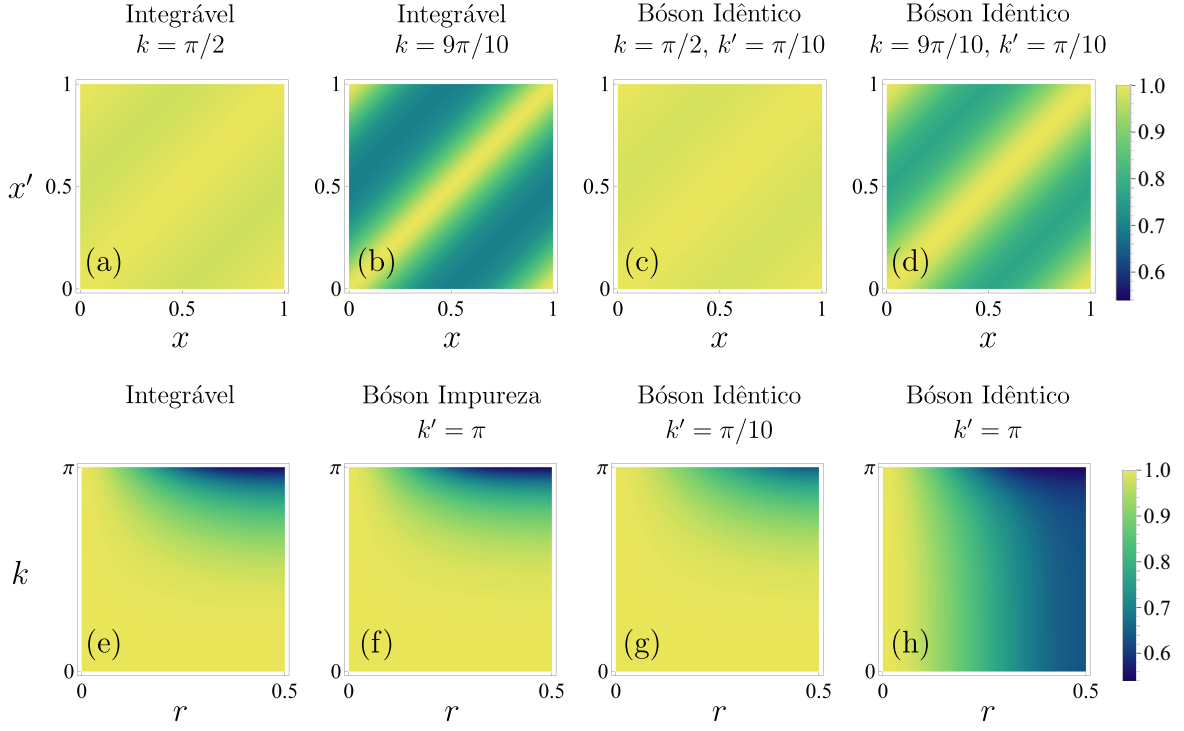


Figura 4.2: Função de correlação de uma partícula para interações representativas nos casos integrável, bóson idêntico e impureza. Perda de coerência da interação (a) fraca para a interação (b) forte no caso integrável e da interação com a impureza (c) fraca para (d) forte. Comportamento de  $\rho_1(r = |x - x'|)$  como função do parâmetro de interação  $k$  nos casos (e) integrável, (f) impureza com interação forte entre os bósons idênticos e bóson idêntico com interações (g) fraca e (h) forte. Cores claras correspondem a densidades maiores.

Na Fig. 4.2, temos resultados para a função de correlação de uma partícula em diversos casos: em (a)-(d), calculamos  $\rho_1(x, x')$  para dois casos integráveis e dois casos para um bóson idêntico (2 ou 3). Em (a), consideramos uma interação intermediária ( $k = k' = \pi/2$ ) e podemos notar que a predominância de valores próximos de 1 para  $\rho_1(x, x')$  significa que o átomo encontra-se “deslocalizado”, podendo ocupar aproximadamente qualquer posição no sistema. Em (b), temos novamente o caso integrável, mas para uma interação forte ( $k = k' = 9\pi/10$ ). Percebemos que agora a  $\rho_1(x, x')$  tem valores máximos em torno da diagonal  $x = x'$  (e, devido às condições de contorno periódicas, nos limites  $x, x' = L$ ). Isso ocorre devido à forte repulsão que caracteriza o sistema, o que resulta em uma forte localização dos átomos em torno de sua origem no sistema de coordenadas. A transição de um sistema do tipo descrito em (a) para o sistema em (b) caracteriza a localização ou “perda de coerência” da função de onda [61, 62, 63, 64]. Em sistemas de átomos na rede, esse fenômeno corresponde à diminuição dos termos fora da diagonal da matriz de densidade reduzida, que é a grandeza análoga à função de correlação de uma partícula em sistemas homogêneos. Nas Figs. 4.2 (c) e (d), temos a função de correlação para um bóson idêntico no regime não-integrável. Nessas figuras temos um par idêntico fracamente interagente ( $k' = \pi/10$ ) que transita

de uma interação intermediária ( $k = \pi/2$ ) para uma interação forte ( $k = 9\pi/10$ ) com a impureza. O resultado é um forte aumento da localização do bóson idêntico, como produto somente da repulsão por parte da impureza. Essa situação está caracterizada esquematicamente na Fig. 2.1 (c). Nas Figs. 4.2 (e)-(h), temos os resultados para  $\rho_1(r)$  em função de parâmetro  $k$  e da distância relativa  $r$ , onde  $r = |x - x'|$ , como na Fig. 3.3. No limite integrável (e), vemos que um átomo encontra-se fracamente localizado para baixos valores de  $k$  e  $k'$ . O mesmo ocorre para o bóson impureza em baixos valores de  $k$ , mesmo com o parâmetro  $k'$  em seu valor máximo (Fig. 4.2 (f)). Isso ocorre pois o comportamento da impureza independe da repulsão entre os bósons idênticos. Já nas Figs. 4.2 (g) e (h), vemos um forte aumento na localização de um bóson idêntico quando a repulsão entre os dois átomos dessa espécie aumenta de  $k' = \pi/10$  para  $k' = \pi$ .

### 4.3 Distribuição de Momento

Uma grandeza de grande relevância para sistemas de átomos ultrafrios unidimensionais é a distribuição de momento  $n(p)$ . Ela representa, qualitativamente, a probabilidade de que uma partícula do *ensemble* tenha um determinado valor de momento  $p$ . Ela é definida em sistemas homogêneos como [34]

$$n(p) = \frac{1}{L} \int_0^L dx \int_0^L dx' \rho_1(x, x') e^{-ip(x-x')}, \quad (4.1)$$

onde  $p$  está definido em unidades de  $(2\pi s/L)$  com  $s$  inteiro e  $\rho_1(x, x')$  é a função de correlação de uma partícula normalizada definida na Eq. C.2. Consideramos também  $\hbar = 1$ . No Apêndice C demonstramos que isso é equivalente a escrever [47, 25]

$$n(p) = \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N |\phi(p, x_2, \dots, x_N)|^2, \quad (4.2)$$

onde  $\phi(p, x_2, \dots, x_N)$  é a transformada de Fourier da função de onda em relação à coordenada  $x$ :

$$\phi(p, x_2, \dots, x_N) = L^{-1/2} \int_0^L dx e^{-ipx} \psi(x, x_2, \dots, x_N). \quad (4.3)$$

Um resultado importante obtido para a distribuição de momento de um sistema unidimensional de bósons é o seu comportamento universal para altos valores de  $p$  [26, 65]:

$$n(p) = \frac{\mathcal{C}}{p^4}, \text{ para } p \rightarrow \infty, \quad (4.4)$$

onde  $\mathcal{C}$  é uma constante de proporcionalidade cuja expressão foi primeiramente deduzida para bósons com interações iguais em [25]:

$$\mathcal{C} = \frac{4(N-1)\rho_2(0)}{a_{1D}^2}, \quad (4.5)$$

onde  $a_{1D}$  é o comprimento de espalhamento unidimensional, definido como  $a_{1D} = -2/mg$  [53].

A constante  $\mathcal{C}$  é chamada parâmetro de contato, e é uma propriedade universal de sistemas com interações do tipo  $\delta$  [66]. Para um valor fixo de interação  $g$ ,  $\mathcal{C}$  depende da probabilidade de um par de partículas encontrar-se no mesmo ponto, ou seja  $\rho_2(0)$ . No limite termodinâmico, expressões para  $\rho_2(0)$  nos regimes de fraca e forte repulsão foram obtidas em [67].

Na Fig. 4.3 podemos verificar que o comportamento assintótico da distribuição de momento obtida usando o *Ansatz* de Jastrow obedece à lei  $n(p) \stackrel{|p| \rightarrow \infty}{\propto} 1/p^4$ . No painel (a) temos a distribuição de momento no regime integrável resultante da Eq. 4.2 para diversos valores do parâmetro  $k$  (pontos coloridos) em relação à curva prevista pela Eq. 4.5 (linhas pretas tracejadas). Para os casos não-integráveis em que as interações são diferentes (e  $a_{1D}$  não está univocamente definido) não há uma fórmula explícita na literatura para o parâmetro de contato. Portanto escrevemos, em analogia com os cálculos em [25], uma expressão analítica para a parte assintótica da distribuição de momento no caso não-integrável [68] (ver dedução no Apêndice D):

$$n(p) \stackrel{|p| \rightarrow \infty}{\propto} \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \left| \sum_{i=2}^N (2L^{-1/2}/a_{1D}^{1i}) e^{-ipx_i} \psi(x_1 = x_i, \dots, x_i, \dots, x_N) \right|^2 \frac{1}{p^4}, \quad (4.6)$$

onde podemos identificar o pré-fator como o parâmetro de contato. O índice  $i$  em  $a_{1D}^{1i}$  é incluído para levar em conta as interações diferentes entre os pares de átomos. Para o caso particular de três átomos que estudamos, a intensidade da interação entre a impureza e o par idêntico é a mesma (portanto  $a_{1D}^{12} = a_{1D}^{13}$ ), e a diferença para o parâmetro de contato integrável será resultante apenas da diferença na função de onda. Para o parâmetro de contato de um átomo idêntico, o comprimento de espalhamento entre os pares será diferente (por exemplo,  $a_{1D}^{21} \neq a_{1D}^{23}$ ).



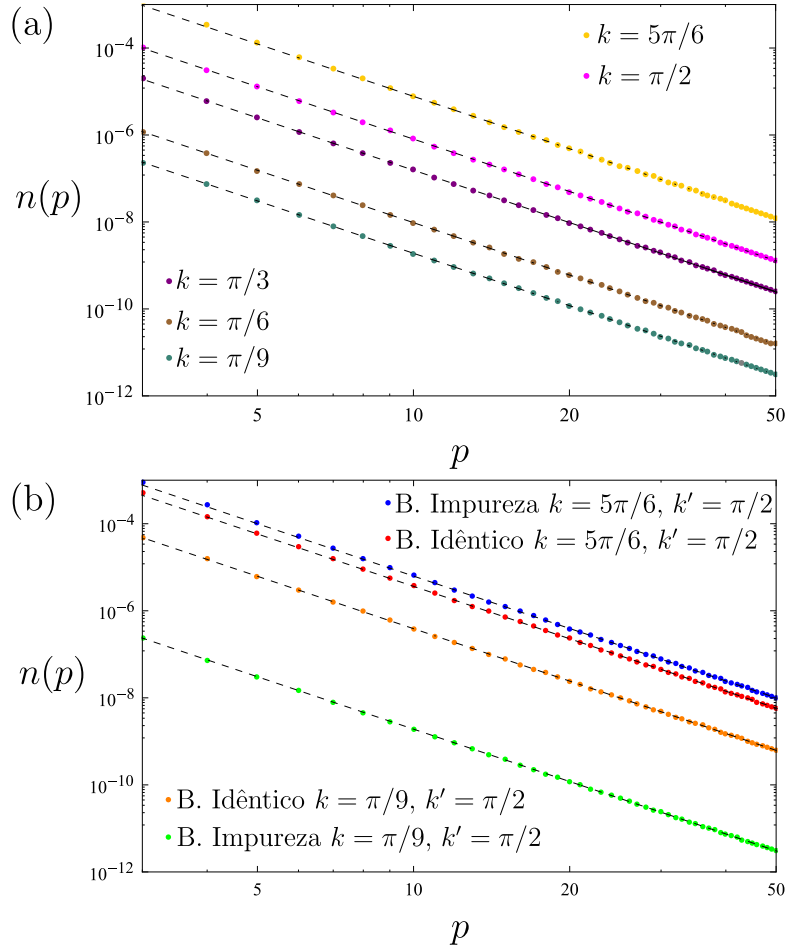
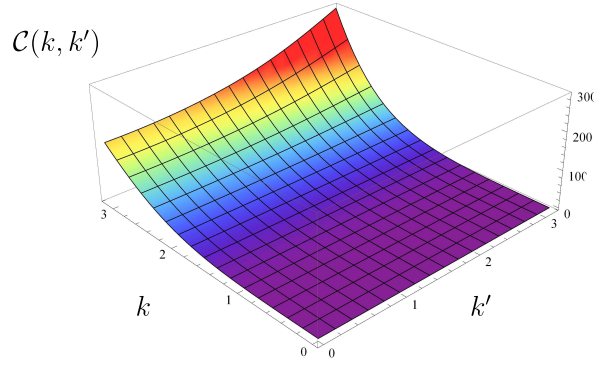


Figura 4.3: Distribuição de momento adimensional em escala log-log ( $p$  é escrito em unidades de  $2\pi/L$ ) para os casos (a) integráveis e (b) não-integráveis. As linhas tracejadas pretas são dadas pelas expressões (a) 4.4 (onde  $\mathcal{C}$  advém da expressão 4.5) e (b) 4.6.

No painel (b) da Fig. 4.3, vemos que a distribuição de momento para os casos não-integráveis também concorda com os valores previstos para o contato (Eq. 4.6) nessas situações. Podemos também perceber como a distribuição de momento para o bóson impureza é mais drasticamente afetada por alterações no parâmetro  $k$  do que um bóson idêntico.

Considerando isso, podemos agora analisar o comportamento do contato  $\mathcal{C}$  nos casos não-integráveis em função dos parâmetros  $k$  e  $k'$ . Na Fig. 4.4 (a), temos os valores de  $\mathcal{C}$  para o bóson impureza. É fácil notar que os valores do parâmetro de contato são fortemente dependentes de  $k$ , enquanto permanecem inalterados com o aumento de  $k'$ . No caso (b) temos a mesma grandeza, mas para um átomo idêntico. Podemos perceber que nesse caso  $\mathcal{C}$  depende de maneira simétrica de  $k$  e  $k'$ , o que é um reflexo da construção do *Ansatz* de Jastrow mas também captura o comportamento qualitativo esperado para esse sistema.

(a) Bóson Impureza



(b) Bóson Idêntico

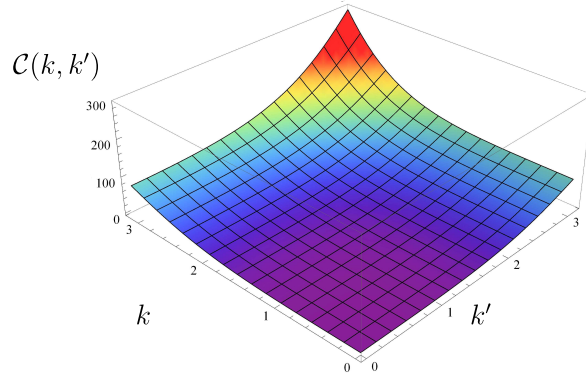


Figura 4.4: Parâmetro de contato adimensional  $\mathcal{C}$  com função dos parâmetros de interação  $k$  e  $k'$  para (a) o bóson impureza e (b) um bóson idêntico.

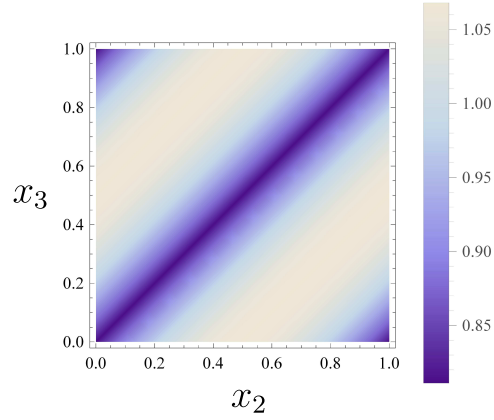
## 4.4 Função de Correlação de Pares

A função de correlação de pares, como mencionado na seção anterior, determina a probabilidade que um par de partículas encontre-se a uma dada distância no sistema. Na Eq. 3.7 definimos essa quantidade para as coordenadas  $x_1$  e  $x_2$ . No regime não-integrável, isso corresponde à correlação entre o par formado entre o bóson impureza e um bóson idêntico (par 12 na Fig. 3.1). No entanto, nesta seção estaremos interessados na correlação entre um par de bósons idênticos (23) e sua dependência nos parâmetros  $k$  e  $k'$ .

Na Fig. 4.5, temos  $\rho_2(x_2, x_3)$  para um caso integrável e um caso não-integrável. No painel (a), consideramos o caso  $k = k' = \pi/3$  que corresponde a uma interação fraca entre os bósons idênticos. Notamos que o valor obtido é mínimo para a diagonal  $x_2 = x_3$  ou nos limites  $x_2, x_3 = L$ , onde o par de partículas se encontra na mesma posição. Mais interessante, no entanto, é o caso representado no painel (b), onde  $k = 5\pi/6$  e  $k' = \pi/3$ . Nessa situação, o par 23 tem uma probabilidade pequena de ocupar a diagonal  $x_2 = x_3$ , mas o efeito mais notável é o surgimento de mínimos adicionais no

entorno de  $|x_2 - x_3| = L/2$ . Isso se dá em função do aumento na repulsão desse par em relação à impureza, o que faz com que eles tendam a ocupar regiões mais próximas um do outro, como descrito na Fig. 3.1 (c).

(a) Integrável



(b) Não-Integrável

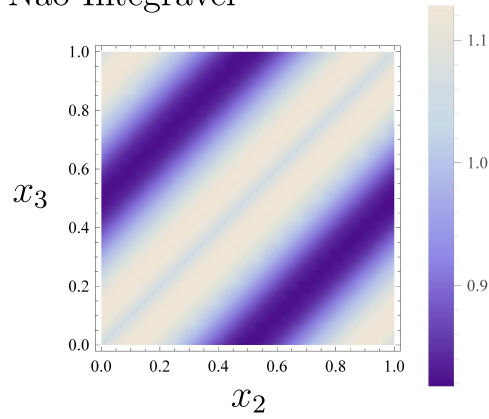


Figura 4.5: Função de correlação de pares para o par de bósons idênticos (23). (a) Caso integrável  $k = k' = \pi/3$ . (b) Caso não-integrável  $k = 5\pi/6$  e  $k' = \pi/3$ . Cores claras indicam densidades mais altas.

Na Fig. 4.6 temos a mesma quantidade, agora em termos da coordenada relativa  $r = |x_2 - x_3|$ . O caso da Fig. 4.5 (b) está representado pela linha sólida verde. Novamente observamos o surgimento de um mínimo em  $r = 0.5$ , causado pela forte repulsão sofrida pelo par idêntico em relação à impureza. Os casos integráveis de repulsão infinita (linha sólida vermelha) e não-interagente (linha sólida preta) são incluídos como referência.

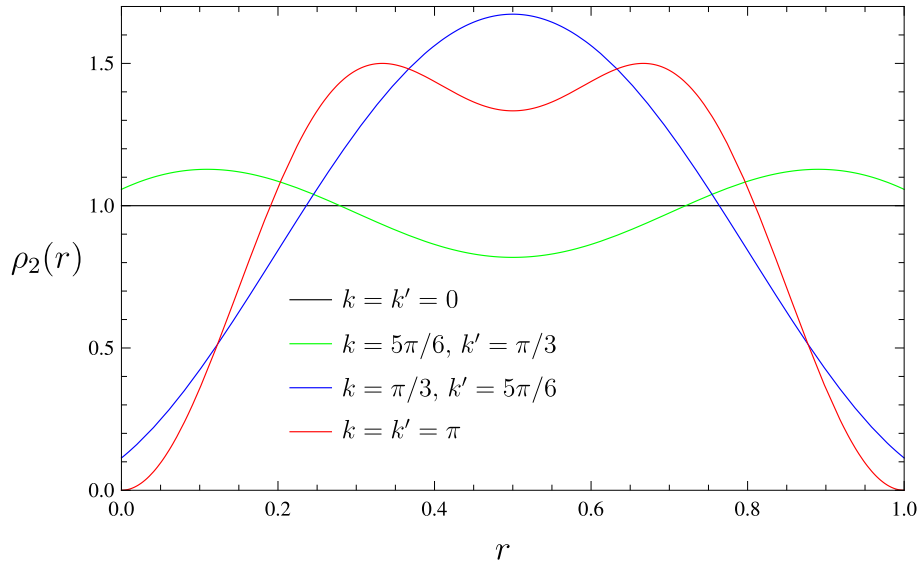


Figura 4.6: Função de correlação de pares para o par de bósons idênticos (23) como função da coordenada relativa  $r = |x_2 - x_3|$ . A linha sólida preta corresponde ao caso não-interagente e a linha sólida vermelha corresponde ao caso integrável com repulsão infinita.

## 4.5 Fator de Estrutura Estático

O fator de estrutura é uma grandeza em geral medida através de espectroscopia de Bragg, com o objetivo de analisar a organização dos átomos em redes cristalinas. Mais recentemente, medidas que utilizam a técnica de espalhamento de dois-fótons foram capazes de determinar o fator de estrutura de condensados de Bose-Einstein em sistemas de átomos ultrafrios [69]. Esses experimentos consistem normalmente de dois feixes de laser com frequências e vetores de onda distintos que incidem sobre uma amostra atômica. A emissão estimulada de luz pelos átomos pode ser medida e fornece a chamada resposta dinâmica do sistema, que está diretamente relacionada ao fator de estrutura. Medidas sensíveis tanto às alterações na frequência  $\omega$  dos feixes quanto aos vetores de onda  $p$  dão origem ao fator de estrutura dinâmico  $S(\omega, p)$  [26]. A integral dessa quantidade sobre todas as frequências dá origem ao fator de estrutura estático  $S(p)$ , que para um sistema homogêneo unidimensional é definido como [34]:

$$S(p) = 1 + n \int_0^L dx_j \int_0^L dx_i e^{-ip(x_i - x_j)} [g(x_i, x_j) - 1] \quad (4.7)$$

onde  $p$  é novamente quantizado como  $2\pi s$ ,  $n = N/L$  é a densidade linear de átomos (no nosso caso particular,  $n = 3$ ) e  $g(x_i, x_j)$  é a função de correlação de pares renormalizada por conveniência para  $N(N-1)/N^2 = 6/9$ . Como a função de correlação de pares pode ser calculada para um par de bósons idênticos ou para um par bóson impureza+bóson idêntico, o resultado do fator de estrutura também depende dessa escolha. Na Fig. 4.7

temos o fator de estrutura estático na região de pequeno  $p$  para diversos casos integráveis e não-integráveis, onde os casos não-integráveis são apresentados para um par idêntico (23) ou um par impureza+bóson idêntico (12).

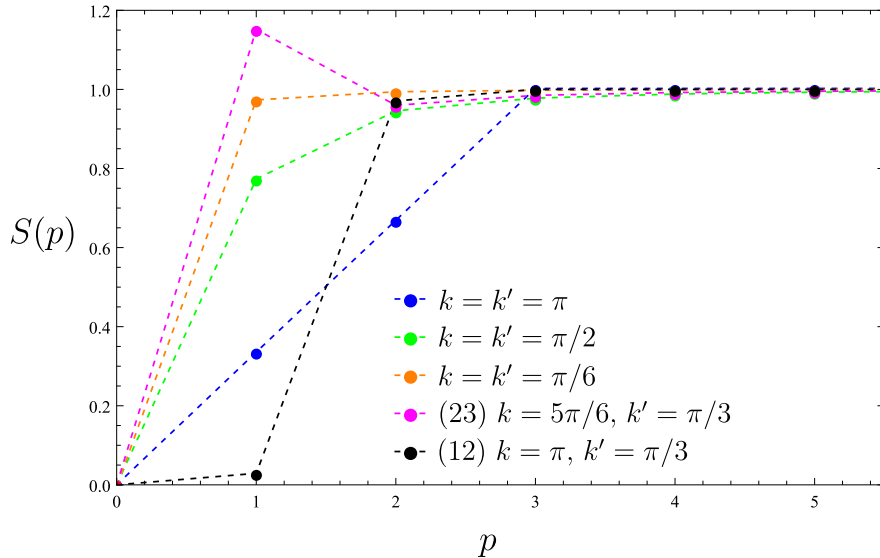
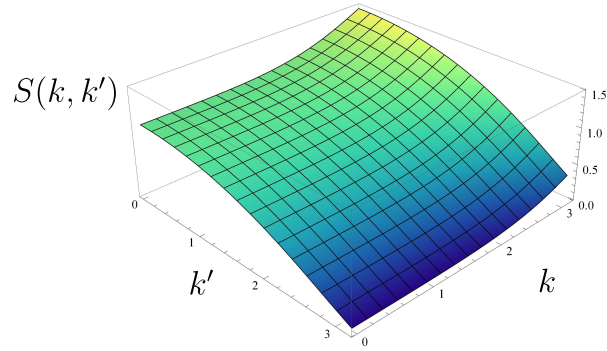


Figura 4.7: Fator de estrutura estático adimensional ( $p$  é dado em unidades de  $2\pi/L$ ) para diversos valores de interação. A linha tracejada azul corresponde ao caso integrável infinitamente repulsivo.

Notamos que, em todos os casos, o fator de estrutura estático satura em  $S(p) = 1$  para  $p \geq 3$ , caso em que o fóton de prova não é espalhado pelo sistema. Nos casos integráveis e na região de baixo momento  $0 \leq p \leq 3$ , a saturação se dá de maneira mais lenta no limite da repulsão infinita (linha tracejada azul) que apresenta um comportamento linear  $S = |p|/2\pi n$ , como previsto pela teoria hidrodinâmica [70]. Esse resultado é característico de sistema com excitações de fônons, e pode ser interpretado com um indicativo do surgimento de uma estrutura cristalina na qual os átomos estão igualmente espaçados e aproximadamente fixos. Para os casos não integráveis, a região  $p = 2$  pode situar-se acima ou abaixo desse comportamento linear, com o caso mais notável sendo o pico em que  $S(p) > 1$ , observado para o par (23) quando a repulsão entre a impureza e os bósons idênticos é mais forte que a repulsão entre o par idêntico ( $k = 5\pi/6$  e  $k' = \pi/3$ ). Como vimos no estudo da função de correlação de pares, nesse regime de interação o par idêntico tende a aglomerar-se (linha sólida verde na Fig. 4.6). Esse resultado remete ao gás de bósons com interação atrativa (gás de super-Tonks [71]) e demonstra o surgimento de uma atração efetiva entre o par idêntico como resultado da repulsão com a impureza.

(a) Par 23



(b) Par 12

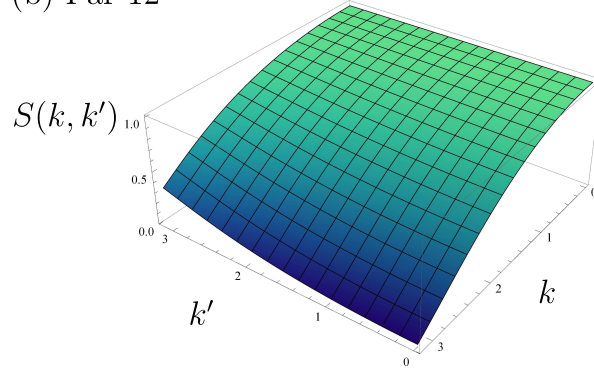


Figura 4.8: Fator de estrutura estático adimensional como função dos parâmetros  $k$  e  $k'$  para (a) o par de bósons idênticos e (b) um par impureza+bóson idêntico.

Fixando o valor de  $p$  em 2, podemos observar o comportamento do fator de estrutura estático como função dos parâmetros  $k$  e  $k'$ . Na Fig. 4.8 (a), temos  $S(k, k')$  para o par idêntico (23), onde observamos a região de atração efetiva para valores pequenos de  $k'$  e grandes de  $k$ . Na Fig. 4.8 (b), temos  $S(k, k')$  para um par impureza-bóson idêntico (12), no qual um cenário efetivamente atrativo não é evidente. Isso ocorre pois os pares 12 e 13 não tendem a aglomerar-se como resultado de diferenças nas interações, quaisquer sejam as combinações entre  $k$  e  $k'$ .

# Capítulo 5

## Conclusão

Neste trabalho investigamos os efeitos da quebra da integrabilidade no modelo do gás de bósons com interação  $\delta$  em uma dimensão no regime repulsivo. Partindo do caso de  $N$  bósons resolvido por Lieb e Liniger através do *Ansatz* de Bethe, revisamos a solução exata para dois casos particulares de poucos átomos. O caso de dois bósons é de especial interesse pois configura a base para a construção de uma função de onda de pares correlacionados, conhecida como *Ansatz* de Jastrow. Isso nos permitiu tratar o modelo de bósons com interações diferentes, em que a integrabilidade é quebrada. Focamos em particular no modelo mínimo não-integrável, que corresponde ao caso em que a interação entre um dos pares de bósons é diferente das demais. O *Ansatz* de Jastrow foi proposto, portanto, como uma alternativa para acessar as propriedades físicas desse modelo não-integrável. Sua validade foi confirmada ao demonstrarmos sua capacidade de recuperar satisfatoriamente os resultados esperados para a energia e as funções de correlação nos casos integráveis em todo o espectro de interações.

Aplicamos o *Ansatz* de Jastrow no cálculo da energia, funções de correlação, distribuição de momento e fator de estrutura estático para o estado fundamental no caso não-integrável de três bósons. Em todas essas propriedades, pudemos verificar efeitos consideráveis advindos da alteração nas interações entre os pares. Na energia, verificamos um deslocamento das curvas como função do parâmetro de integração  $k$ , exibindo, como esperado, uma intersecção entre os casos integrável e não-integrável nos pontos em que  $k' = k$ . A função de correlação de uma partícula apresentou diferenças notáveis na dependência dos parâmetros  $k$  e  $k'$ , em virtude da escolha dessa quantidade para um bóson idêntico ou para o bóson impureza. A distribuição de momento, uma quantidade mensurável de interesse crescente em sistemas de átomos ultrafrios, mostrou obedecer a lei  $\mathcal{C}/p^4$  no limite assintótico mesmo nos casos não-integráveis, uma possibilidade até agora pouco explorada. Além disso, a utilização do *Ansatz* de Jastrow possibilitou manipular uma expressão analítica para o parâmetro de contato  $\mathcal{C}$  em sistemas com misturas bosônicas. A função de correlação de pares mostra também o surgimento de

efeitos não previstos para os casos integráveis. Em especial no caso em que  $g' \ll g$ , notamos o aparecimento de mínimos que demonstram a tendência de aglomeração do par de bósons idênticos em virtude da repulsão com a impureza. Um efeito semelhante é o pico obtido no fator de estrutura estático para essa mesma situação. Aí observamos que essa grandeza apresenta um comportamento parecido ao do gás de bósons no regime atrativo. Estes efeitos podem, em princípio, ser detectados em experimentos de ponta, possibilitando assim uma excelente oportunidade de explorar e testar a natureza da integrabilidade em átomos ultrafrios.

Nossa abordagem pode também ser estendida para o regime atrativo. Nesse caso, no entanto, um cenário diferente emerge, com a possibilidade de estados ligados. Em princípio, um *Ansatz* do tipo Jastrow pode ser construído, mas diferentes funções de onda de pares devem ser consideradas. Nossa proposta pode ser adaptada para diferentes sistemas, como férmions interagentes, bósons interagentes e misturas destes, bem como compostos de átomos com maiores valores de spin. Adicionalmente, também pode ser ajustada para lidar com um sistema de partículas em uma armadilha harmônica ou em diferentes geometrias, servindo como uma alternativa eficiente e mais simples aos métodos já existentes. Finalmente, nossa proposta pode ser diretamente utilizada para discutir o caso de um maior número de partículas, que é atualmente um tópico de pesquisa ativo, especialmente na discussão da transição da física de poucos corpos para a física de muitos corpos.



# Referências Bibliográficas

- [1] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, (Springer, New York, 1978).
- [2] H. Bethe, *Z. F. Phys.* 71, 205 (1931).
- [3] W. Heisenberg, *Z. F. Phys.* 49, 619 (1928).
- [4] M. Gaudin, *The Bethe Wavefunction*, (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2014).
- [5] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London A* 266, 238 (1963).
- [6] E. H. Lieb & W. Liniger *Phys. Rev.* 130, 1605 (1963).
- [7] E. H. Lieb & W. Liniger *Phys. Rev.* 130, 1616 (1963).
- [8] M. Gaudin, *Phys. Lett. A* 24, 55 (1967).
- [9] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* 19, 1312 (1967).
- [10] J. S. Caux & J. Mossel, *J. Stat. Mech.*, P02023 (2011).
- [11] B. Sutherland, *Beautiful Models: 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-body Problems*, (World Scientific, Singapore, 2004).
- [12] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband & W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 87, 130402 (2001).
- [13] T. Kinoshita, T. Wenger & D. S. Weiss *Phys. Rev. Lett.* 95, 190406 (2005).
- [14] Y. Liao, A. S. C. Rittner, T. Paprotta, W. Li, G. B. Partridge, R. G. Hulet, S. K. Baur & E. J. Mueller, *Nature* 467, 567 (2010).
- [15] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, & S. Jochim, *Phys. Rev. Lett.* 108, 075303 (2012).

- [16] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch & I. Bloch, *Nature* 429, 277 (2004).
- [17] T. Kinoshita, T. Wenger & D. S. Weiss, *Science* 305, 1125 (2004).
- [18] S. B. Papp, J. M. Pino & C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* 101, 040402 (2008).
- [19] G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi & M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* 100, 210402 (2008).
- [20] E. Haller, M. J. Mark, R. Hart, J. G. Danzl, L. Reichsöllner, V. Melezhik, P. Schmelcher & H. C. Nägerl, *Phys. Rev. Lett.* 104, 153203 (2010).
- [21] He X., Xu P., Wang J. & Zhan M., *Optics Express* 18, 13586 (2010).
- [22] R. Bourgain, J. Pellegrino, A. Fuhrmanek, Y. R. P. Sortais & A. Browaeys, *Phys. Rev. A* 88, 023428 (2013).
- [23] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz & S. Jochim, *Science* 332, 336 (2011).
- [24] A. N. Wenz, G. Zürn, S. Murmann, I. Brouzos, T. Lompe & S. Jochim, *Science* 342, 457 (2013).
- [25] M. Olshanii & V. Dunjko, *Phys. Rev. Lett.* 91, 090401 (2003).
- [26] J. S. Caux, P. Calabrese & N. A. Slavnov, *J. Stat. Mech.*, P01008 (2007).
- [27] A. Minguzzi, P. Vignolo & M.P. Tosi, *Phys. Lett. A* 294, 222 (2002).
- [28] G. J. Lapeyre, Jr., M. D. Girardeau & E. M. Wright, *Phys. Rev. A* 66, 023606 (2002).
- [29] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch & I. Bloch, *Nature* 415, 39 (2002).
- [30] Y. Y. Chen, Y. Z. Jiang, X. W. Guan & Q. Zhou, *Nature Communications* 5, 5140 (2014).
- [31] E. D. Kuhnle, H. Hu, X.-J. Liu, P. Dyke, M. Mark, P. D. Drummond, P. Hannaford & C. J. Vale, *Phys. Rev. Lett.* 105, 070402 (2010).
- [32] Y. Sagi, T. E. Drake, R. Paudel & D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* 109, 220402 (2012).
- [33] S. Hoinka, M. Lingham, K. Fenech, H. Hu, C. J. Vale, J. E. Drut & S. Gandolfi, *Phys. Rev. Lett.* 110, 055305 (2013).

- [34] G. E. Astrakharchik & S. Giorgini, Phys. Rev. A 68, 031602(R) (2003).
- [35] C. Menotti, M. Krämer, L. Pitaevskii & S. Stringari, Phys. Rev. A 67, 053609 (2003).
- [36] M. Panfil & J. S. Caux, Phys. Rev. A 89, 033605 (2014).
- [37] N. Fabbri, M. Panfil, D. Clément, L. Fallani, M. Inguscio, C. Fort & J. S. Caux, Phys. Rev. A 91, 043617 (2015).
- [38] T. Kinoshita, T. Wenger & D. S. Weiss, Nature 440, 900 (2006).
- [39] M. Rigol, Phys. Rev. Lett. 103, 100403 (2009).
- [40] A. Lamacraft, Phys. Rev. A 87, 012707 (2013).
- [41] I. Brouzos & A. Foerster, Phys. Rev. A 89, 053623 (2014).
- [42] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell & C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. 78, 586 (1997).
- [43] J. Catani, L. De Sarlo, G. Barontini, F. Minardi & M. Inguscio, Phys. Rev. A 77, 011603 (2008).
- [44] D. J. McCarron, H. W. Cho, D. L. Jenkin, M. P. Köppinger & S. L. Cornish, Phys. Rev. A 84, 011603 (2011).
- [45] R. Jastrow, Phys. Rev. 98, 1479 (1955).
- [46] R. E. Barfknecht, I. Brouzos & A. Foerster, Phys. Rev. A 91, 043640 (2015).
- [47] C. J. Pethick & H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, (Cambridge University Press, Nova York, 2008).
- [48] M. Girardeau, J. Math. Phys. 1, 516 (1960).
- [49] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac & M. Rigol, Rev. Mod. Phys. 83, 1405 (2011).
- [50] M. Takahashi, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*, (Cambridge University Press, Nova York, 1999).
- [51] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, (Academic Press, New York, 1982).
- [52] M. Jimbo, Int. J. Mod. Phys. 15, 3759 (1989).

- [53] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. 81, 938 (1998).
- [54] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. 50, 1395 (1983).
- [55] B. Wilson, A. Foerster, C.C.N. Kuhn, I. Roditi & D. Rubeni, Phys. Lett. A, 14, 1065 (2014).
- [56] L. Amico, A. Osterloh & F. Cataliotti, Phys. Rev. Lett. 95, 063201 (2005).
- [57] M. Vangeleyn, B. M. Garraway, H. Perrin & A. S. Arnold, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47, 071001 (2014).
- [58] L. P. Pitaevskii & S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Oxford University Press, Nova York, 2003).
- [59] M. E. Peskin, *An introduction to quantum field theory*, (Boulder : Westview Press, 1995).
- [60] M. D. Girardeau & E. M. Wright, Phys. Rev. Lett. 87, 050403 (2001).
- [61] S. Zöllner, H. D. Meyer & P. Schmelcher, Phys. Rev. A 74, 063611 (2006).
- [62] K. Sakmann, A. I. Streltsov, O. E. Alon & L. S. Cederbaum, Phys. Rev. A 78, 023615 (2008).
- [63] I. Brouzos, S. Zöllner & P. Schmelcher, Phys. Rev. A 81, 053613 (2010).
- [64] M. K. Kang & U. R. Fischer Phys. Rev. Lett. 113, 140404 (2014).
- [65] M. Barth & W. Zwerger, Ann. of Phys. 326, 2544 (2011).
- [66] X. Guan, Int. J. Mod. Phys. B 28, 1430015 (2014).
- [67] D. M. Gangardt & G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. 90, 010401 (2003).
- [68] V. Dunjko, (private communication), 2014.
- [69] J. Stenger, S. Inouye, A. P. Chikkatur, D. M. Stamper-Kurn, D. E. Pritchard & W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 82, 4569 (1999).
- [70] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 47, 1840 (1981).
- [71] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras & S. Giorgini, Phys. Rev. Lett. 95, 190407 (2005).
- [72] V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov & A. G. Izergin, *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*, (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1993).

# Apêndice A

## Relação entre os Parâmetros de Interação: Tabela $g \times k$

Neste apêndice, apresentamos a relação entre os parâmetros de interação  $g$  e  $k$  dadas pela relação de consistência  $g = 2k \tan(k/2)$  (Eq. 2.27). Utilizando esta expressão podemos construir uma tabela comparativa para valores de  $g$  e  $k$ . Lembramos que estamos considerando  $k$  e  $g$  em unidades de  $1/L$ .

$g$	$k$
1	0.960189
10	2.28445
100	3.0209

Tabela A.1: Relação entre os valores de  $g$  e  $k$  utilizados na Fig. 3.3.

Na Tabela A.1 apresentamos os valores de  $g$  utilizados na Fig. 3.3 e os correspondentes valores de  $k$  obtidos para o *Ansatz* de Jastrow.

$k$	$g$
0	0
$\pi/10$	0.0995159
$\pi/9$	0.123099
$\pi/6$	0.280596
$\pi/3$	1.2092
$\pi/2$	3.14159
$5\pi/6$	19.541
$9\pi/10$	35.7034
$\pi$	$\infty$

Tabela A.2: Relação entre os valores de  $k$  e  $g$  utilizados ao longo dos capítulos 2 e 3.

Na Tabela A.2 escrevemos os valores relevantes de  $k$  utilizados em todos os outros gráficos, e os valores correspondentes de  $g$ . O valor de  $g$  em cada caso é importante

para estabelecer um parâmetro fixo de comparação entre a intensidade da repulsão no *Ansatz* de Bethe e no *Ansatz* de Jastrow.

# Apêndice B

## Expressões Analíticas

Neste apêndice apresentamos alguns resultados analíticos obtidos utilizando o *Ansatz* de Jastrow para três bósons, nos casos integráveis e não-integráveis. Utilizamos as unidades  $\hbar = m = 1$  e o comprimento unitário  $L = 1$ . Os parâmetros  $k_1$  e  $k_2$  correspondem a  $k$  e  $k'$ , respectivamente, e estão em unidades de  $1/L$ .

As expressões aqui apresentadas foram geradas automaticamente pelo programa utilizado para obtê-las.

- Normalização no caso integrável:

$$N = \frac{48+32k_1^2+3\text{Cos}[k_1]+8k_1^2\text{Cos}[k_1]-48\text{Cos}[2k_1]-3\text{Cos}[3k_1]+108k_1\text{Sin}[k_1]}{256k_1^2}$$

- Normalização no caso não-integrável:

$$N = \frac{1}{32k_2(k_1^3-k_1k_2^2)^2} \\ \left(4k_1^4k_2\text{Cos}[k_2]\text{Sin}[k_1]^2 + 4k_2(k_1^2-k_2^2)^2(k_1+\text{Sin}[k_1])^2 + \right. \\ \left. k_1(4k_1^5-10k_1^3k_2^2+6k_1k_2^4+8(k_1^2-k_2^2)^2\text{Sin}[k_1]+ \right. \\ \left. (-3k_1^2k_2^2+k_2^4)\text{Sin}[2k_1])\text{Sin}[k_2]\right)$$

- Energia no caso integrável:

$$E = \frac{12k_1^2(12+8k_1^2+\text{Cos}[k_1]-12\text{Cos}[2k_1]-\text{Cos}[3k_1]+28k_1\text{Sin}[k_1])}{48+32k_1^2+(3+8k_1^2)\text{Cos}[k_1]-48\text{Cos}[2k_1]-3\text{Cos}[3k_1]+108k_1\text{Sin}[k_1]}$$

- Energia no caso não-integrável:

$$\begin{aligned}
E = & \\
& \left( k_2^3 (k_1^2 - k_2^2)^2 \right. \\
& (4k_1^3 (3 + 8k_1^2) + 4k_1 (3 + 4k_1^2) k_2^2 - 24k_1 (2k_1^2 + k_2^2) \text{Cos}[k_1] - \\
& 6k_1 (3k_1^2 + k_2^2) \text{Cos}[2k_1] + 24 (1 + k_1^2) (2k_1^2 + k_2^2) \text{Sin}[k_1] + \\
& 3(k_1 - k_2)(k_1 + k_2)\text{Sin}[2k_1]) + \\
& 3k_1^2 k_2 \text{Cos}[k_2] \\
& \left( 4k_1 (k_1^2 - k_2^2)^2 (4k_1^2 + 3k_2^2) + \right. \\
& k_2^2 (8k_1 (-k_1^4 + k_2^4) \text{Cos}[k_1] + \\
& 2k_1 (-3k_1^4 + 2k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \text{Cos}[2k_1] + \\
& 8 (2k_1^4 + k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \text{Sin}[k_1] + \\
& \left. (k_1^4 + 6k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \text{Sin}[2k_1] \right) - \\
& 6k_1^2 \\
& (2k_1 (3k_2^6 - 3k_2^8 - 4k_1^6 (-1 + k_2^2) + k_1^4 k_2^2 (-6 + 5k_2^2) + \\
& k_1^2 (k_2^4 + 2k_2^6)) + \\
& k_2^2 (4k_1 (k_1^4 + k_1^2 k_2^2 + 2k_2^4) \text{Cos}[k_1] + 2k_1 k_2^2 (k_1^2 + k_2^2) \text{Cos}[2k_1] - \\
& 8 (k_1^6 - 2k_1^4 k_2^2 + k_2^6) \text{Sin}[k_1] - \\
& k_2^2 (-3k_1^4 + 2k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \text{Sin}[2k_1]) \text{Sin}[k_2]) / \\
& \left( 4k_1 k_2^2 \left( 4k_1^4 k_2 \text{Cos}[k_2] \text{Sin}[k_1]^2 + 4k_2 (k_1^2 - k_2^2)^2 (k_1 + \text{Sin}[k_1])^2 + \right. \right. \\
& k_1 \left( 4k_1^5 - 10k_1^3 k_2^2 + 6k_1 k_2^4 + 8 (k_1^2 - k_2^2)^2 \text{Sin}[k_1] + \right. \\
& \left. \left. (-3k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \text{Sin}[2k_1] \right) \text{Sin}[k_2] \right)
\end{aligned}$$

- Função de correlação de pares para o par de bósons idênticos no caso integrável ( $N$  corresponde à normalização da função de onda):

$$\begin{aligned}
N\rho_2(r) = & \\
& \frac{1}{16k_1} \text{Cos} \left[ \frac{1}{2}(k_1 - 2k_1 r) \right]^2 \\
& (4k_1 + 2k_1 r \text{Cos}[2k_1(-1 + r)] - 2k_1(-1 + r) \text{Cos}[2k_1 r] + \\
& 8\text{Sin}[k_1] + \text{Sin}[2k_1 r] + \text{Sin}[2k_1 - 2k_1 r])
\end{aligned}$$



- Função de correlação de pares para o par de bósons idênticos no caso não-integrável ( $N$  corresponde à normalização da função de onda):

$$N\rho_2(r) =$$

$$\frac{1}{16k_1} \text{Cos} \left[ \frac{1}{2}(k_2 - 2k_1 r) \right]^2$$

$$(4k_1 + 2k_1 r \text{Cos}[2k_1(-1 + r)] - 2k_1(-1 + r) \text{Cos}[2k_1 r] +$$

$$8\text{Sin}[k_1] + \text{Sin}[2k_1 r] + \text{Sin}[2k_1 - 2k_1 r])$$

# Apêndice C

## Expressão para a Distribuição de Momento

Na subseção 4.3, citamos a equivalência entre as Eqs. 4.1 e 4.2, para a distribuição de momento. A Eq. 4.1 fornece:

$$n(p) = \frac{1}{L} \int_0^L \rho_1(x, x') e^{-ip(x-x')} dx dx', \quad (\text{C.1})$$

onde consideramos  $\hbar = 1$  e  $\rho_1(x, x')$  é a função de correlação de uma partícula definida na Eq. C.2 para uma função de onda normalizada como:

$$\rho_1(x, x') = \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi(x, x_2, \dots, x_N) \psi(x', x_2, \dots, x_N)^*. \quad (\text{C.2})$$

Podemos, portanto, escrever:

$$n(p) = \frac{1}{L} \int_0^L \left( \int_0^L \psi(x, x_2, \dots, x_N) \psi(x', x_2, \dots, x_N)^* dx_2, \dots, dx_N \right) e^{-ip(x-x')} dx dx'. \quad (\text{C.3})$$

Como as integrações são sobre todo o domínio  $\{0, L\}$ , podemos alterar sua ordem livremente. Portanto:

$$n(p) = \frac{1}{L} \int_0^L \left( \int_0^L \psi(x, x_2, \dots, x_N) e^{-ipx} dx \right) \left( \int_0^L \psi(x', x_2, \dots, x_N)^* e^{ipx'} dx' \right) dx_2, \dots, dx_N. \quad (\text{C.4})$$

Notamos que os termos entre parênteses são as transformadas de Fourier da função de onda, o que corresponde à sua representação no espaço de momento:

$$\phi(p, x_2, \dots, x_N) = L^{-1/2} \int_0^L \psi(x, x_2, \dots, x_N) e^{-ipx}. \quad (\text{C.5})$$

Isso nos permite escrever diretamente

$$n(p) = \int_0^L |\phi(p, x_2, \dots, x_N)|^2 dx_2, \dots, dx_N, \quad (\text{C.6})$$

que é a Eq. 4.2.

# Apêndice D

## Expressão para o Parâmetro de Contato nos Casos Não-Integráveis

Os resultados deste apêndice são obtidos em analogia com os cálculos para o comportamento assintótico da distribuição de momento em um sistema unidimensional de bósons encontrados em [25]. Por clareza, restauraremos neste apêndice as unidades  $\hbar$ ,  $L$  e  $m$ .

Para sistemas com interação do tipo delta, a função de onda no ponto de contato entre duas partículas experimenta uma descontinuidade na derivada proporcional ao valor da função de onda nesse ponto [6, 50, 72]. Podemos escrever, portanto:

$$\begin{aligned} \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) &= \psi(x_1, \dots, R_{ji}, \dots, R_{ji}, \dots, x_N) \\ &\times \{1 - |r_{ji}|/a_{1D}^{ij} + \epsilon(\{|r_{ji}|\}; \{R_{ji}\})\}, \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

onde  $r_{ji} = x_j - x_i$  e  $R_{ji} = (x_j + x_i)/2$  são as coordenadas relativa e do centro de massa do par  $ji$ , respectivamente,  $a_{1D}^{ij}$  é o comprimento de espalhamento unidimensional definido como  $a_{1D}^{ij} = -2\hbar^2/mg_{ij}$ , e  $\{R_{ji}\}$  é um conjunto que compreende as coordenada  $R_{ji}$  do centro de massa e todas as demais coordenadas  $x$ , exceto  $x_i$  e  $x_j$ . Os termos em  $\epsilon(\{|r_{ji}|\}; \{R_{ji}\})$  são de ordem  $\mathcal{O}(|r_{ij}|^2)$ .

Para uma função periódica  $f(x)$ , definida no intervalo  $[0, L]$ , com uma singularidade do tipo  $|x - x_0|^\alpha F(x)$ , onde  $F(x)$  é uma função regular,  $\alpha > -1$  e  $\alpha \neq 0, 2, 4, \dots$ , temos a expansão assintótica da transformada de Fourier dada por:

$$\int_0^L dx e^{-ipx} f(x) \stackrel{|p| \rightarrow \infty}{\cong} 2 \cos \left[ \frac{\pi}{2}(\alpha + 1) \right] \Gamma(\alpha + 1) e^{-ipx_0} F(x_0) \frac{1}{|p|^{\alpha+1}} + \mathcal{O} \left( \frac{1}{|p|^{\alpha+2}} \right), \quad (\text{D.2})$$

onde a função gama é definida como  $\Gamma(n + 1) = n!$ . Podemos agora reescrever, usando

a expressão D.1, a transformada de Fourier da função de onda como

$$\begin{aligned}\phi(p, x_2 \dots x_N) &= L^{-1/2} \int_0^L dx_1 e^{-ipx_1/\hbar} \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &\stackrel{\forall 2 \leq i \leq N}{=} L^{-1/2} \int_0^L dx_1 e^{-ipx_1/\hbar} \psi(x_1 = R_{1i}, \dots, x_i = R_{1i}, \dots, x_N) \\ &\quad \times \{1 - |r_{1i}|/a_{1D}^{1i} + \dots\},\end{aligned}\tag{D.3}$$

que pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\phi(p, x_2 \dots x_N) &\stackrel{\forall 2 \leq i \leq N}{=} L^{-1/2} \int_0^L dx_1 e^{-ipx_1/\hbar} \psi(x_1 = R_{1i}, \dots, x_i = R_{1i}, \dots, x_N) \\ &- L^{-1/2} \int_0^L dx_1 e^{-ipx_1/\hbar} \psi(x_1 = R_{1i}, \dots, x_i = R_{1i}, \dots, x_N) \times \frac{|r_{1i}|}{a_{1D}^{1i}} \\ &+ L^{-1/2} \int_0^L dx_1 e^{-ipx_1/\hbar} \psi(x_1 = R_{1i}, \dots, x_i = R_{1i}, \dots, x_N) \times \mathcal{O}(|r_{ij}|^2)\end{aligned}\tag{D.4}$$

Notamos inicialmente que  $\psi(x_1 = R_{1i}, \dots, x_i = R_{1i}, \dots, x_N)$  é constante, de modo que a primeira integral se resume a  $L \sin(s\pi)/s\pi$  (lembrando que  $p = 2\pi s/L$ ) onde  $s$  é um inteiro. Portanto, o resultado da integral é zero para qualquer valor inteiro de  $s$ , e estamos particularmente interessados nos valores grandes de  $s$ , quando  $p \rightarrow \infty$ . Para as outras duas integrais, podemos aplicar o teorema D.2. O resultado da terceira integral terá uma dependência em  $p^{-3}$ , o que torna esse termo subdominante [68]; podemos, portanto, desconsiderá-lo. O teorema D.2 se aplica para funções com uma singularidade do tipo  $|x - x_0|^\alpha F(x)$ , o que corresponde à descontinuidade da derivada no ponto de contato entre duas partículas. Para um sistema com  $N$  partículas, é necessário somar sobre todas as contribuições das descontinuidades da derivadas no contato entre cada par de bósons. O resultado fica escrito como

$$\phi(p, x_2 \dots x_N) \stackrel{\forall 2 \leq i \leq N}{=} -2 \sum_{i=2}^N \frac{L^{1/2}}{a_{1D}^{1i}} \cos(\pi) \Gamma(2) e^{-ipx_i/\hbar} \psi(x_1 = x_i, \dots, x_i, \dots, x_N) \frac{1}{|p|^2},\tag{D.5}$$

que é simplesmente reescrito como

$$\phi(p, x_2 \dots x_N) \stackrel{\forall 2 \leq i \leq N}{=} \sum_{i=2}^N \frac{2L^{1/2}}{a_{1D}^{1i}} e^{-ipx_i/\hbar} \psi(x_1 = x_i, \dots, x_i, \dots, x_N) \frac{1}{|p|^2}.\tag{D.6}$$

Lembramos agora que a Eq. C.6 nos permite escrever

$$n(p) = \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N |\phi(p, x_2, \dots, x_N)|^2.\tag{D.7}$$

Temos, portanto,

$$n(p) \stackrel{|p| \rightarrow \infty}{=} \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \left| \sum_{i=2}^N \frac{2L^{-1/2}}{a_{1D}^{1i}} e^{-ipx_i/\hbar} \psi(x_1 = x_i, \dots, x_i, \dots, x_N) \right|^2 \frac{1}{p^4}, \quad (\text{D.8})$$

que é a Eq. 4.6, onde designamos

$$\mathcal{C} = \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \left| \sum_{i=2}^N \frac{2L^{-1/2}}{a_{1D}^{1i}} e^{-ipx_i/\hbar} \psi(x_1 = x_i, \dots, x_i, \dots, x_N) \right|^2 \quad (\text{D.9})$$

como o parâmetro de contato para os casos não-integráveis. É importante notar que aqui estamos tratando apenas da distribuição de momento para a partícula de coordenada  $x_1$ . No nosso modelo de três bósons, a partícula 1 corresponde à impureza. Nesse caso, temos  $a_{1D}^{12} = a_{1D}^{13}$ , já que  $g_{12} = g_{13} = g$ . Já no caso da distribuição de momento para um bóson idêntico (partículas 2 ou 3), temos  $a_{1D}^{21} \neq a_{1D}^{23}$ , e o resultado numérico para o parâmetro de contato será mais fortemente dependente em  $g_{23} = g'$ .

# Apêndice E

## Programas

Neste apêndice apresentaremos um programa modelo com o código principal utilizado no Wolfram Mathematica 9 para obter a maioria dos resultados apresentados nessa dissertação. Algumas expressões analíticas podem ser obtidas, como a normalização e as expressões para energia e função de correlação de pares. Por outro lado, grandezas como a função de correlação de uma partícula e a distribuição de momento foram obtidas através de integração numérica. Alguns resultados intermediários foram omitidos por simplicidade.

In[1]:= Clear ["Global`\*"]

In[2]:= assumptions =

{x1, x2, x3, y1, x2, k1, k2, p} ∈ Reals && k1 > 0 && k1 ≤ π && k2 > 0 && k2 ≤ π;

In[3]:= N = 3;

L = 1;

■ Função de Onda (Jastrow Ansatz)

In[47]:=  $\psi[k1\_ , k2\_ , x1\_ , x2\_ , x3\_ ] = \text{Cos}[k1 (\text{Abs}[x1 - x2] / L - 1 / 2)]$   
 $\text{Cos}[k1 (\text{Abs}[x1 - x3] / L - 1 / 2)] \text{Cos}[k2 (\text{Abs}[x2 - x3] / L - 1 / 2)];$

$\chi[k1\_ , k2\_ , x1\_ , x2\_ , x3\_ ] = \text{Cos}[k1 ((x2 - x1) / L - 1 / 2)]$   
 $\text{Cos}[k1 ((x3 - x1) / L - 1 / 2)] \text{Cos}[k2 ((x3 - x2) / L - 1 / 2)];$

■ Normalização (por partes e total)

Assuming[assumptions , Integrate [

$\chi[k1, k1, x1, x2, x3] \chi[k1, k1, x1, x2, x3], \{x3, 0, L\}, \{x2, 0, x3\}, \{x1, 0, x2\}]$

$\frac{1}{1536 k1^2} (48 + 32 k1^2 + (3 + 8 k1^2) \text{Cos}[k1] - 48 \text{Cos}[2 k1] - 3 \text{Cos}[3 k1] + 108 k1 \text{Sin}[k1])$

Assuming[assumptions , Integrate [

$\psi[k1, k1, x1, x2, x3] \psi[k1, k1, x1, x2, x3], \{x3, 0, 1\}, \{x2, 0, 1\}, \{x1, 0, 1\}]$

$\frac{1}{256 k1^2} (48 + 32 k1^2 + 3 \text{Cos}[k1] + 8 k1^2 \text{Cos}[k1] - 48 \text{Cos}[2 k1] - 3 \text{Cos}[3 k1] + 108 k1 \text{Sin}[k1])$

■ A normalização na região  $0 < x1 < x2 < x3 < L$  deve ser 1/6 da normalização total:

FullSimplify [

$\left( \frac{1}{1536 k1^2} (48 + 32 k1^2 + (3 + 8 k1^2) \text{Cos}[k1] - 48 \text{Cos}[2 k1] - 3 \text{Cos}[3 k1] + 108 k1 \text{Sin}[k1]) \right) /$

$\left( \frac{1}{256 k1^2}$

$(48 + 32 k1^2 + 3 \text{Cos}[k1] + 8 k1^2 \text{Cos}[k1] - 48 \text{Cos}[2 k1] - 3 \text{Cos}[3 k1] + 108 k1 \text{Sin}[k1]) \right) ]$

$\frac{1}{6}$

■ Derivadas (termo cinético)



$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} (D[D[\chi[k1, k1, x1, x2, x3], x1], x1] + \\
& \quad D[D[\chi[k1, k1, x1, x2, x3], x2], x2] + D[D[\chi[k1, k1, x1, x2, x3], x3], x3]) \\
& \frac{1}{2} \left( 6 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \right. \\
& \quad 2 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] + \\
& \quad 2 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \\
& \quad \left. 2 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \right)
\end{aligned}$$

■ Energia Integrável

Assuming [assumptions, Integrate [\chi[k1, k1, x1, x2, x3]

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{1}{2} \left( 6 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \right. \right. \\
& \quad 2 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] + \\
& \quad 2 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \\
& \quad \left. \left. 2 k1^2 \cos\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \sin\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \right) \right), \\
& \{x3, 0, L\}, \{x2, 0, x3\}, \{x1, 0, x2\}
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{128} (12 + 8 k1^2 + \cos[k1] - 12 \cos[2 k1] - \cos[3 k1] + 28 k1 \sin[k1])$$

■ Expressão completa para a energia no caso integrável

$$\text{In[99]= Eint [k1_] = FullSimplify \left[ \left( \frac{6}{128} (12 + 8 k1^2 + \cos[k1] - 12 \cos[2 k1] - \cos[3 k1] + 28 k1 \sin[k1]) \right) / \left( \frac{1}{256 k1^2} (48 + 32 k1^2 + 3 \cos[k1] + 8 k1^2 \cos[k1] - 48 \cos[2 k1] - 3 \cos[3 k1] + 108 k1 \sin[k1]) \right) \right]$$

$$\text{Out[99]= } \left( 12 k1^2 (12 + 8 k1^2 + \cos[k1] - 12 \cos[2 k1] - \cos[3 k1] + 28 k1 \sin[k1]) \right) / \left( 48 + 32 k1^2 + (3 + 8 k1^2) \cos[k1] - 48 \cos[2 k1] - 3 \cos[3 k1] + 108 k1 \sin[k1] \right)$$

■ Energia no limite da repulsão infinita

$$\begin{aligned}
& N \left[ \left( \frac{1}{128} (12 + 8 k1^2 + \cos[k1] - 12 \cos[2 k1] - \cos[3 k1] + 28 k1 \sin[k1]) \right) / \right. \\
& \quad \left. \left( \frac{1}{1536 k1^2} (48 + 32 k1^2 + (3 + 8 k1^2) \cos[k1] - \right. \right. \\
& \quad \quad \left. \left. 48 \cos[2 k1] - 3 \cos[3 k1] + 108 k1 \sin[k1]) \right) \right] /. k1 \rightarrow \pi
\end{aligned}$$

39.4784

■ Comparação com resultados do Bethe Ansatz

(\*Equações do Ansatz de Bethe \*)

**BAE**[L\_, N\_, g\_] :=

**Table** [k[j] L + 2 **Sum**[**ArcTan** [(k[j] - k[l]) / g], {l, N}] == -2 Pi \* (j - (N + 1) / 2), {j, N}]

(\*Solução para os quasimomenta k\*)

**BAERoots** [L\_, N\_, g\_] := **FindRoot** [BAE[L, N, g], **Table** [{k[i], 0}, {i, 1, N}]]

(\*Energia \*)

**Energy** [L\_, N\_, g\_] :=  $\sum_{j=1}^N \frac{1}{2} k[j]^2$  /. **BAERoots** [L, N, g]

**Energy** [1, 3, 10<sup>10</sup>]

39.4784

■ Normalização Não-Integrável (por partes)

In[77]:= **Integrate** [ $\chi$ [k1, k2, x1, x2, x3]  $\chi$ [k1, k2, x1, x2, x3], {x3, 0, L},  
{x2, 0, x3}, {x1, 0, x2}, **Assumptions** → {k1 ≥ 0, k1 ≤ π, k2 ≥ 0, k2 ≤ π}]

In[78]:= **Integrate** [ $\chi$ [k1, k2, x2, x1, x3]  $\chi$ [k1, k2, x2, x1, x3], {x3, 0, L},  
{x1, 0, x3}, {x2, 0, x1}, **Assumptions** → {k1 ≥ 0, k1 ≤ π, k2 ≥ 0, k2 ≤ π}]

$$\begin{aligned}
& \text{In[81]:= } \text{normaNI [k1_, k2_] = FullSimplify} \left[ 4 \left( -\frac{1}{768 k_1^3 (k_1 - k_2)^3 k_2^3 (k_1 + k_2)^3} \right. \right. \\
& \quad \left( 3 k_1^2 k_2 \text{Cos}[k_2] \left( k_1 k_2^2 (k_1^2 - k_2^2)^2 \text{Cos}[2 k_1] + 8 k_2^2 (-k_1^4 + k_2^4) \text{Sin}[k_1] + \right. \right. \\
& \quad \quad \left. \left. k_1 (-8 k_1^6 + 19 k_1^4 k_2^2 - 22 k_1^2 k_2^4 + 11 k_2^6 + 6 k_1 k_2^4 \text{Sin}[2 k_1]) \right) + 6 k_1 k_2^3 \right. \\
& \quad \quad \left. \text{Cos}[k_1]^2 \left( (k_1^2 - k_2^2)^3 + (k_1^3 - k_1 k_2^2)^2 \text{Cos}[k_2] - 2 k_1^2 k_2 (k_1^2 + k_2^2) \text{Sin}[k_2] \right) + \right. \\
& \quad \quad \left. 6 k_2^3 \text{Cos}[k_1] \left( k_1^2 \text{Cos}[k_2] \left( 4 k_1 (k_1^2 - k_2^2)^2 + (k_1^4 + k_2^4) \text{Sin}[k_1] \right) + (k_1^2 - k_2^2) \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left. \left( (k_1^4 + k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \text{Sin}[k_1] + 4 k_1 \left( (k_1^2 - k_2^2)^2 + 2 k_1^2 k_2 \text{Sin}[k_2] \right) \right) \right) \right) - \\
& \quad \quad \left. 2 \left( 3 k_1 k_2^3 \text{Sin}[k_1]^2 \left( (k_1^2 - k_2^2)^3 - 2 k_1^2 k_2 (k_1^2 + k_2^2) \text{Sin}[k_2] \right) + \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. 2 \left( k_1 (3 + 4 k_1^2) k_2^3 (k_1^2 - k_2^2)^3 + 3 k_1^3 (2 k_1^6 (-1 + k_2^2) - 3 k_2^6 (-1 + k_2^2) + k_1^2 \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left. k_2^4 (-5 + 8 k_2^2) + k_1^4 (6 k_2^2 - 7 k_2^4) + k_1 k_2^6 \text{Sin}[2 k_1] \right) \text{Sin}[k_2] \right) - 3 k_2^2 \\
& \quad \quad \quad \left. \text{Sin}[k_1] \left( -4 (k_1^2 - k_2^2)^2 \left( (1 + k_1^2) k_2 (k_1^2 - k_2^2) + k_1^2 (k_1^2 - 2 k_2^2) \text{Sin}[k_2] \right) + \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left. k_1^2 k_2^2 \text{Cos}[k_1] (-3 k_1^2 k_2 + 3 k_2^3 + 2 (k_1^4 + k_2^4) \text{Sin}[k_2]) \right) \right) \right) \right) + \\
& \quad \left. 2 \left( \frac{1}{768} \left( \frac{24 \text{Sin}[k_1] (k_2 + \text{Sin}[k_2])}{k_1 k_2} + \frac{8 (2 k_2^3 + 3 k_2 \text{Cos}[k_2] + 3 (-1 + k_2^2) \text{Sin}[k_2])}{k_2^3} \right) - \right. \right. \\
& \quad \quad \frac{1}{k_1^3 (k_1 - k_2)^3 (k_1 + k_2)^3} 6 \left( -2 k_1^7 + 6 k_1^5 k_2^2 - 6 k_1^3 k_2^4 + 2 k_1 k_2^6 + \right. \\
& \quad \quad \left. (k_1^2 - k_2^2)^3 \text{Sin}[2 k_1] + k_1^3 \text{Cos}[k_2] (-2 k_1^4 + 2 k_2^4 + k_1 (k_1^2 + 3 k_2^2) \text{Sin}[2 k_1]) - \right. \\
& \quad \quad \left. 3 k_1^5 k_2 \text{Sin}[k_2] + 2 k_1^7 k_2 \text{Sin}[k_2] - k_1^3 k_2^3 \text{Sin}[k_2] - 4 k_1^5 k_2^3 \text{Sin}[k_2] + \right. \\
& \quad \quad \left. 2 k_1^3 k_2^5 \text{Sin}[k_2] - 3 k_1^5 k_2 \text{Cos}[k_1]^2 \text{Sin}[k_2] - k_1^3 k_2^3 \text{Cos}[k_1]^2 \text{Sin}[k_2] + \right. \\
& \quad \quad \left. \left. 3 k_1^5 k_2 \text{Sin}[k_1]^2 \text{Sin}[k_2] + k_1^3 k_2^3 \text{Sin}[k_1]^2 \text{Sin}[k_2] \right) + \frac{1}{k_1^3 (k_1^2 - k_2^2)^2} \right. \\
& \quad \quad \left. 3 \left( -2 k_1 (k_1 - k_2) (k_1 + k_2) \text{Cos}[2 k_1] (k_1^2 - k_2^2 + k_1^2 \text{Cos}[k_2]) + \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left( (k_1^2 - k_2^2)^2 + k_1^2 (k_1^2 + k_2^2) \text{Cos}[k_2] \right) \text{Sin}[2 k_1] - \right. \\
& \quad \quad \quad \left. 4 k_1^2 k_2 \text{Cos}[k_1] (k_1 \text{Cos}[k_1] + (k_1 - k_2) (k_1 + k_2) \text{Sin}[k_1]) \text{Sin}[k_2] \right) + \\
& \quad \quad \left. \left( 24 \left( - (k_1^2 - k_2^2)^2 (k_1 \text{Cos}[k_1] - \text{Sin}[k_1]) + k_1^2 \text{Cos}[k_2] \right. \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left. (k_1 (-k_1^2 + k_2^2) \text{Cos}[k_1] + (k_1^2 + k_2^2) \text{Sin}[k_1]) + k_1^2 k_2 \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left. \left. (-2 k_1 \text{Cos}[k_1] + (-k_1^2 + k_2^2) \text{Sin}[k_1]) \text{Sin}[k_2] \right) \right) \right) / (k_1^3 (k_1^2 - k_2^2)^2) \right) \right) \left. \right]
\end{aligned}$$

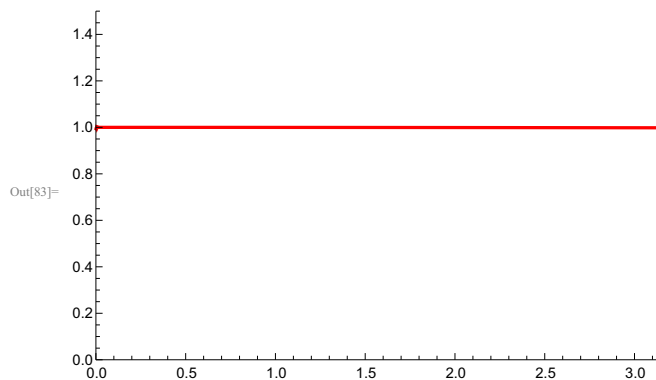
$$\text{Out[81]} = \frac{1}{128 k_1^3 k_2^3 (k_1^2 - k_2^2)^3} \left( (k_1 - k_2)^3 k_2^3 (k_1 + k_2)^3 \right. \\ \left. (4 k_1 (3 + 4 k_1^2) - 24 k_1 \cos[k_1] - 6 k_1 \cos[2 k_1] + 24 (1 + k_1^2) \sin[k_1] - 3 \sin[2 k_1]) + \right. \\ \left. 3 k_1^2 \cos[k_2] (2 (k_1 - k_2) k_2 (k_1 + k_2) (4 k_1^5 - 6 k_1^3 k_2^2 + 6 k_1 k_2^4 + \right. \\ \left. k_2^2 ((-k_1^3 + k_1 k_2^2) (4 \cos[k_1] + \cos[2 k_1]) + 4 (k_1^2 + k_2^2) \sin[k_1])) - \right. \\ \left. k_2^3 (k_1^4 + 6 k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \sin[2 k_1] \right) + \\ \left. 6 k_1^2 (-4 k_1^7 + 4 k_1^5 (3 + k_1^2) k_2^2 - 2 k_1^3 (5 + 7 k_1^2) k_2^4 + 2 k_1 (3 + 8 k_1^2) k_2^6 - \right. \\ \left. 6 k_1 k_2^8 + 2 k_2^4 (4 k_1 (-k_1^2 + k_2^2) \cos[k_1] + k_1 (k_1^2 + k_2^2) \cos[2 k_1]) - \right. \\ \left. 2 (-k_1^2 k_2 + k_2^3)^2 (-2 k_1^2 + 4 k_2^2 + k_2^2 \cos[k_1]) \sin[k_1] \right) \sin[k_2] \Big)$$

$$\text{In[82]} = \text{normal}[k_1] = \frac{1}{256 k_1^2} \\ (48 + 32 k_1^2 + 3 \cos[k_1] + 8 k_1^2 \cos[k_1] - 48 \cos[2 k_1] - 3 \cos[3 k_1] + 108 k_1 \sin[k_1])$$

$$\text{Out[82]} = \frac{1}{256 k_1^2} (48 + 32 k_1^2 + 3 \cos[k_1] + 8 k_1^2 \cos[k_1] - 48 \cos[2 k_1] - 3 \cos[3 k_1] + 108 k_1 \sin[k_1])$$

■ Comparação normalização integrável e não-integrável

**In[83]** = **Plot** [normal[k1] / normaNI[k1, 0.999 k1], {k1, 0.001, π},  
PlotRange → {{0, π}, {0, 1.5}}, PlotStyle → {Red, Thick}]



■ Normalização não-integrável (integração completa)

**In[84]** = **FullSimplify** [Integrate [ψ[k1, k2, x1, x2, x3] ψ[k1, k2, x1, x2, x3], {x3, 0, 1},  
{x2, 0, 1}, {x1, 0, 1}, Assumptions → {k1 ≥ 0, k1 ≤ π, k2 ≥ 0, k2 ≤ π}]]

$$\text{Out[84]} = \left( 4 k_1^4 k_2 \cos[k_2] \sin[k_1]^2 + 4 k_2 (k_1^2 - k_2^2)^2 (k_1 + \sin[k_1])^2 + \right. \\ \left. k_1 (4 k_1^5 - 10 k_1^3 k_2^2 + 6 k_1 k_2^4 + 8 (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin[k_1] + (-3 k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \sin[2 k_1]) \right. \\ \left. \sin[k_2] \right) / \left( 32 k_2 (k_1^3 - k_1 k_2^2)^2 \right)$$

$$\text{In[94]= } \text{normaNItotal [k1_, k2_]} = \left( 4 k1^4 k2 \text{Cos}[k2] \text{Sin}[k1]^2 + 4 k2 (k1^2 - k2^2)^2 (k1 + \text{Sin}[k1])^2 + \right. \\ \left. k1 \left( 4 k1^5 - 10 k1^3 k2^2 + 6 k1 k2^4 + 8 (k1^2 - k2^2)^2 \text{Sin}[k1] + (-3 k1^2 k2^2 + k2^4) \text{Sin}[2 k1] \right) \right. \\ \left. \text{Sin}[k2] \right) / \left( 32 k2 (k1^3 - k1 k2^2)^2 \right)$$

$$\text{Out[94]= } \left( 4 k1^4 k2 \text{Cos}[k2] \text{Sin}[k1]^2 + 4 k2 (k1^2 - k2^2)^2 (k1 + \text{Sin}[k1])^2 + \right. \\ \left. k1 \left( 4 k1^5 - 10 k1^3 k2^2 + 6 k1 k2^4 + 8 (k1^2 - k2^2)^2 \text{Sin}[k1] + (-3 k1^2 k2^2 + k2^4) \text{Sin}[2 k1] \right) \right. \\ \left. \text{Sin}[k2] \right) / \left( 32 k2 (k1^3 - k1 k2^2)^2 \right)$$

■ Derivadas (termo cinético)

$$\text{In[79]= } -\frac{1}{2} \left( \text{D}[\text{D}[\chi[k1, k2, x1, x2, x3], x1], x1] + \right. \\ \left. \text{D}[\text{D}[\chi[k1, k2, x1, x2, x3], x2], x2] + \text{D}[\text{D}[\chi[k1, k2, x1, x2, x3], x3], x3] \right)$$

$$\text{Out[79]= } \frac{1}{2} \left( 4 k1^2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] + \right. \\ 2 k2^2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \\ 2 k1^2 \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] + \\ 2 k1 k2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Sin}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \\ \left. 2 k1 k2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \right)$$

$$\text{In[80]= } -\frac{1}{2} \left( \text{D}[\text{D}[\chi[k1, k2, x2, x1, x3], x1], x1] + \right. \\ \left. \text{D}[\text{D}[\chi[k1, k2, x2, x1, x3], x2], x2] + \text{D}[\text{D}[\chi[k1, k2, x2, x1, x3], x3], x3] \right)$$

$$\text{Out[80]= } \frac{1}{2} \left( 4 k1^2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} + x1 - x2\right)\right] \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] + \right. \\ 2 k2^2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} + x1 - x2\right)\right] \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] + \\ 2 k1 k2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} + x1 - x2\right)\right] \text{Sin}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] - \\ 2 k1^2 \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} + x1 - x2\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \\ \left. 2 k1 k2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} + x1 - x2\right)\right] \text{Sin}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \right)$$

■ Energia não-integrável (integração por partes)

$$\begin{aligned}
\text{In[85]:= ENI1 [k1_, k2_] = Integrate } & \left[ \chi[k1, k2, x1, x2, x3] \right. \\
& \left( \frac{1}{2} \left( 4 k1^2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] + \right. \\
& \quad 2 k2^2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \\
& \quad 2 k1^2 \text{Cos}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] + \\
& \quad 2 k1 k2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Sin}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] - \\
& \quad \left. \left. 2 k1 k2 \text{Cos}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x2\right)\right] \text{Sin}\left[k1 \left(-\frac{1}{2} - x1 + x3\right)\right] \text{Sin}\left[k2 \left(-\frac{1}{2} - x2 + x3\right)\right] \right) \right], \\
& \{x3, 0, L\}, \{x2, 0, x3\}, \{x1, 0, x2\} \\
\text{Out[85]=} & \frac{1}{768 k1^3 (k1 - k2)^2 k2^3 (k1 + k2)^2} \\
& \left( 3 k1^2 k2 \text{Cos}[k2] \left( (-3 k1^5 k2^2 + 2 k1^3 k2^4 + k1 k2^6) \text{Cos}[2 k1] + 8 k2^2 (2 k1^4 + k1^2 k2^2 + k2^4) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \text{Sin}[k1] + k1 (16 k1^6 - 17 k1^4 k2^2 - 10 k1^2 k2^4 + 11 k2^6 + 6 k1 k2^4 \text{Sin}[2 k1]) \right) \right) - \\
& 6 k1 k2^3 \text{Cos}[k1]^2 \left( (k1^2 - k2^2)^2 (3 k1^2 + k2^2) + k1^2 (3 k1^4 - 2 k1^2 k2^2 - k2^4) \text{Cos}[k2] + \right. \\
& \quad \left. 2 k1^2 k2 (k1^2 + k2^2) \text{Sin}[k2] \right) - 6 k2^2 \text{Cos}[k1] \\
& \left( (-k1^6 k2 + k2^7) \text{Sin}[k1] - k1^2 k2 \text{Cos}[k2] (-4 k1^5 + 4 k1 k2^4 + (k1^4 + k2^4) \text{Sin}[k1]) + \right. \\
& \quad \left. 4 k1 (2 k1^6 k2 - 3 k1^4 k2^3 + k2^7 + k1^2 (k1^4 + k1^2 k2^2 + 2 k2^4) \text{Sin}[k2]) \right) + \\
& 2 \left( 3 k1 k2^3 \text{Sin}[k1]^2 \left( (k1^2 - k2^2)^2 (3 k1^2 + k2^2) + 2 k1^2 k2 (k1^2 + k2^2) \text{Sin}[k2] \right) + \right. \\
& \quad \left. 2 \left( k1 k2^3 (k1^2 - k2^2)^2 (8 k1^4 + 3 k2^2 + k1^2 (3 + 4 k2^2)) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \frac{3}{2} k1^3 (2 (4 k1^6 (-1 + k2^2) + 3 k2^6 (-1 + k2^2) + k1^4 (6 k2^2 - 5 k2^4) - k1^2 (k2^4 + 2 k2^6)) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. (-3 k1^3 k2^4 + 2 k1 k2^6) \text{Sin}[2 k1] \right) \text{Sin}[k2] \right) + \\
& 3 k2^2 \text{Sin}[k1] \left( -k1^2 k2^3 \text{Cos}[k1] (3 k1^2 - 3 k2^2 - 2 k2^3 \text{Sin}[k2]) + \right. \\
& \quad \left. \left. 4 \left( (1 + k1^2) k2 (k1^2 - k2^2)^2 (2 k1^2 + k2^2) + 2 k1^2 (k1^6 - 2 k1^4 k2^2 + k2^6) \text{Sin}[k2] \right) \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{In[86]= ENI2 [k1_, k2_] = Integrate } & \left[ \chi[k1, k2, x2, x1, x3] \right. \\
& \left( \frac{1}{2} \left( 4 k1^2 \text{Cos}[k1 \left( -\frac{1}{2} + x1 - x2 \right)] \text{Cos}[k2 \left( -\frac{1}{2} - x1 + x3 \right)] \text{Cos}[k1 \left( -\frac{1}{2} - x2 + x3 \right)] + \right. \right. \\
& \quad 2 k2^2 \text{Cos}[k1 \left( -\frac{1}{2} + x1 - x2 \right)] \text{Cos}[k2 \left( -\frac{1}{2} - x1 + x3 \right)] \text{Cos}[k1 \left( -\frac{1}{2} - x2 + x3 \right)] + \\
& \quad 2 k1 k2 \text{Cos}[k1 \left( -\frac{1}{2} - x2 + x3 \right)] \text{Sin}[k1 \left( -\frac{1}{2} + x1 - x2 \right)] \text{Sin}[k2 \left( -\frac{1}{2} - x1 + x3 \right)] - \\
& \quad 2 k1^2 \text{Cos}[k2 \left( -\frac{1}{2} - x1 + x3 \right)] \text{Sin}[k1 \left( -\frac{1}{2} + x1 - x2 \right)] \text{Sin}[k1 \left( -\frac{1}{2} - x2 + x3 \right)] - \\
& \quad \left. \left. 2 k1 k2 \text{Cos}[k1 \left( -\frac{1}{2} + x1 - x2 \right)] \text{Sin}[k2 \left( -\frac{1}{2} - x1 + x3 \right)] \text{Sin}[k1 \left( -\frac{1}{2} - x2 + x3 \right)] \right) \right], \\
& \{x3, 0, L\}, \{x1, 0, x3\}, \{x2, 0, x1\} \\
& \left. \right] \\
\text{Out[86]=} & \frac{1}{768 k1^3 (k1 - k2)^2 k2^3 (k1 + k2)^2} \\
& \left( 3 k1^2 k2 \text{Cos}[k2] \left( (-3 k1^5 k2^2 + 2 k1^3 k2^4 + k1 k2^6) \text{Cos}[2 k1] + 8 k2^2 (2 k1^4 + k1^2 k2^2 + k2^4) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \text{Sin}[k1] + k1 (16 k1^6 - 17 k1^4 k2^2 - 10 k1^2 k2^4 + 11 k2^6 + 6 k1 k2^4 \text{Sin}[2 k1]) \right) - \right. \\
& \quad 6 k1 k2^3 \text{Cos}[k1]^2 \left( (k1^2 - k2^2)^2 (3 k1^2 + k2^2) + k1^2 (3 k1^4 - 2 k1^2 k2^2 - k2^4) \text{Cos}[k2] + \right. \\
& \quad \left. 2 k1^2 k2 (k1^2 + k2^2) \text{Sin}[k2] \right) - 6 k2^2 \text{Cos}[k1] \\
& \quad \left( (-k1^6 k2 + k2^7) \text{Sin}[k1] - k1^2 k2 \text{Cos}[k2] (-4 k1^5 + 4 k1 k2^4 + (k1^4 + k2^4) \text{Sin}[k1]) + \right. \\
& \quad \left. 4 k1 (2 k1^6 k2 - 3 k1^4 k2^3 + k2^7 + k1^2 (k1^4 + k1^2 k2^2 + 2 k2^4) \text{Sin}[k2]) \right) + \\
& \quad 2 \left( 3 k1 k2^3 \text{Sin}[k1]^2 \left( (k1^2 - k2^2)^2 (3 k1^2 + k2^2) + 2 k1^2 k2 (k1^2 + k2^2) \text{Sin}[k2] \right) + \right. \\
& \quad \left. 2 \left( k1 k2^3 (k1^2 - k2^2)^2 (8 k1^4 + 3 k2^2 + k1^2 (3 + 4 k2^2)) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \frac{3}{2} k1^3 (2 (4 k1^6 (-1 + k2^2) + 3 k2^6 (-1 + k2^2) + k1^4 (6 k2^2 - 5 k2^4) - k1^2 (k2^4 + 2 k2^6)) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. (-3 k1^3 k2^4 + 2 k1 k2^6) \text{Sin}[2 k1] \right) \text{Sin}[k2] \right) + \\
& \quad \left. 3 k2^2 \text{Sin}[k1] \left( -k1^2 k2^3 \text{Cos}[k1] (3 k1^2 - 3 k2^2 - 2 k2^3 \text{Sin}[k2]) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. 4 \left( (1 + k1^2) k2 (k1^2 - k2^2)^2 (2 k1^2 + k2^2) + 2 k1^2 (k1^6 - 2 k1^4 k2^2 + k2^6) \text{Sin}[k2] \right) \right) \right) \right)
\end{aligned}$$

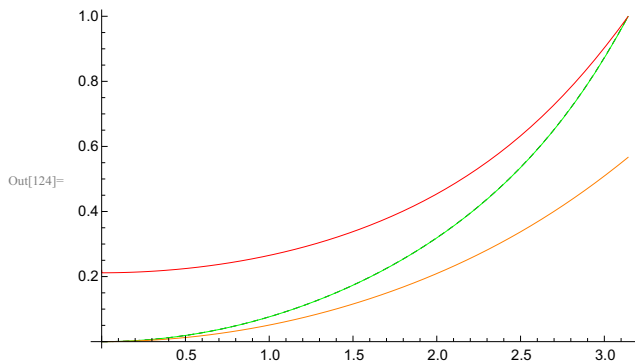
- Expressão completa para energia no caso não-integrável

In[95]= **EnergiaNINT** [k1\_, k2\_] =  
**FullSimplify** [(4 ENI1 [k1, k2] + 2 ENI2 [k1, k2]) / normaNItotal [k1, k2]]

Out[95]= 
$$\left( k_2^3 (k_1^2 - k_2^2)^2 \right. \\
\left. (4 k_1^3 (3 + 8 k_1^2) + 4 k_1 (3 + 4 k_1^2) k_2^2 - 24 k_1 (2 k_1^2 + k_2^2) \cos [k_1] - 6 k_1 (3 k_1^2 + k_2^2) \right. \\
\left. \cos [2 k_1] + 24 (1 + k_1^2) (2 k_1^2 + k_2^2) \sin [k_1] + 3 (k_1 - k_2) (k_1 + k_2) \sin [2 k_1] \right) + \\
3 k_1^2 k_2 \cos [k_2] (4 k_1 (k_1^2 - k_2^2)^2 (4 k_1^2 + 3 k_2^2) + \\
k_2^2 (8 k_1 (-k_1^4 + k_2^4) \cos [k_1] + 2 k_1 (-3 k_1^4 + 2 k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \cos [2 k_1] + \\
8 (2 k_1^4 + k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \sin [k_1] + (k_1^4 + 6 k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \sin [2 k_1]) \left. \right) - \\
6 k_1^2 (2 k_1 (3 k_2^6 - 3 k_2^8 - 4 k_1^6 (-1 + k_2^2) + k_1^4 k_2^2 (-6 + 5 k_2^2) + k_1^2 (k_2^4 + 2 k_2^6)) + \\
k_2^2 (4 k_1 (k_1^4 + k_1^2 k_2^2 + 2 k_2^4) \cos [k_1] + 2 k_1 k_2^2 (k_1^2 + k_2^2) \cos [2 k_1] - \\
8 (k_1^6 - 2 k_1^4 k_2^2 + k_2^6) \sin [k_1] - k_2^2 (-3 k_1^4 + 2 k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \sin [2 k_1]) \left. \right) \\
\sin [k_2] \left. \right) / \left( 4 k_1 k_2^2 (4 k_1^4 k_2 \cos [k_2] \sin [k_1])^2 + 4 k_2 (k_1^2 - k_2^2)^2 (k_1 + \sin [k_1])^2 + \right. \\
\left. k_1 (4 k_1^5 - 10 k_1^3 k_2^2 + 6 k_1 k_2^4 + 8 (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin [k_1] + (-3 k_1^2 k_2^2 + k_2^4) \sin [2 k_1]) \right. \\
\left. \sin [k_2] \right)$$

■ Comparação energia integrável e não-integrável

In[124]= **Plot** [{**Eint** [k1] / (4 π<sup>2</sup>), **EnergiaNINT** [k1, 0.999 k1] / (4 π<sup>2</sup>),  
**EnergiaNINT** [k1, 0.999 π] / (4 π<sup>2</sup>), **EnergiaNINT** [k1, 0.01] / (4 π<sup>2</sup>)},  
{k1, 0, π}, **PlotStyle** → {{**Black**, **Dashed**}, **Green**, **Red**, **Orange**}]



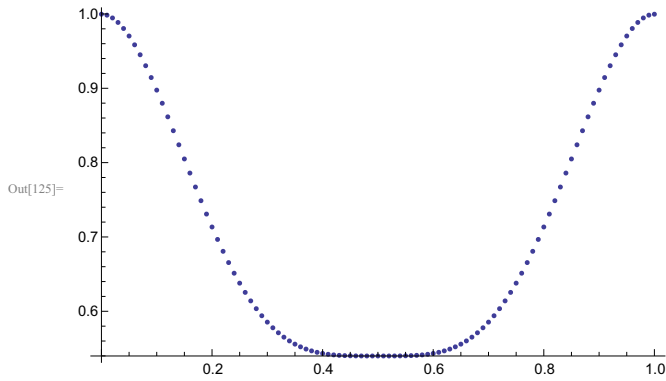
■ Cálculo numérico da função de correlação de uma partícula

In[112]=  $\rho_1$ [k1\_, k2\_, x1\_, y1\_] :=  
**NIntegrate** [ψ[k1, k2, x1, x2, x3] ψ[k1, k2, y1, x2, x3]\*, {x3, 0, 1}, {x2, 0, 1}]

In[171]= **list1** = **Table** [  
{r, (ρ<sub>1</sub>[π, 0.999 π, (1 - r) / 2, (1 + r) / 2]) / normaNI [π, 0.999 π]}, {r, 0, 1, 0.01}];



In[125]:= ListPlot [ {list1 } ]



■ Função de correlação de pares no caso integrável

In[146]:= rho [k1\_, x2\_, x3\_] = Assuming[assumptions ,  
Integrate [psi[k1, k1, x1, x2, x3] psi[k1, k1, x1, x2, x3], {x1, 0, 1}]]

In[159]:= FullSimplify [rho [k1, (1 - r) / 2, (1 + r) / 2]]

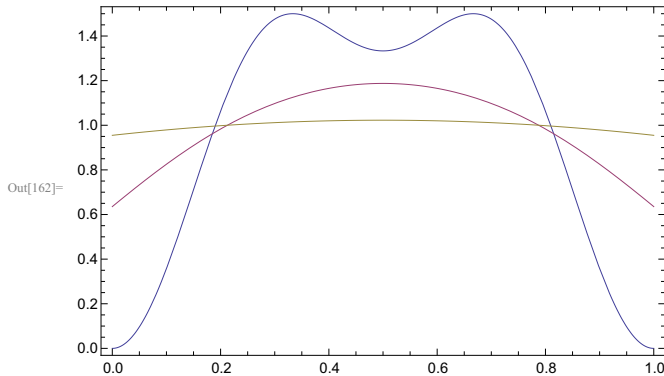
$$\text{Out[159]= } \begin{cases} \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ \frac{k_1}{2} - k_1 r \right]^2 (2 k_1 \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] + \text{Sin} [2 k_1] + 4 (k_1 + \text{Sin} [k_1 (2 - r)] + \text{Sin} [k_1 r])) & r > 1 \\ \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ k_1 \left( \frac{1}{2} + r \right) \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 (1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] - 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (1 + r)] + 8 \text{Sin} [k_1] - \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 (1 + r)]) & -1 \leq r < 0 \\ \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ k_1 \left( \frac{1}{2} + r \right) \right]^2 (2 k_1 \text{Cos} [2 k_1 (1 + r)] + \text{Sin} [2 k_1] + 4 (k_1 - \text{Sin} [k_1 r] + \text{Sin} [k_1 (2 + r)])) & r < -1 \\ \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ \frac{k_1}{2} - k_1 r \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] - 2 k_1 (-1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] + 8 \text{Sin} [k_1] + \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 - 2 k_1 r]) & \text{True} \end{cases}$$

■ Expressão completa para a função de correlação de pares no caso integrável (não-normalizada)

In[161]:= rho2 [k1\_, r\_] = FullSimplify [  $\frac{1}{16 k_1}$   
 $\text{Cos} \left[ \frac{k_1}{2} - k_1 r \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] - 2 k_1 (-1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] +$   
 $8 \text{Sin} [k_1] + \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 - 2 k_1 r]) ]$

Out[161]=  $\frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ \frac{1}{2} (k_1 - 2 k_1 r) \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] -$   
 $2 k_1 (-1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] + 8 \text{Sin} [k_1] + \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 - 2 k_1 r])$

In[162]:= **Plot** [ { $\rho_2[\pi, r] / \text{normal}[\pi]$ ,  $\rho_2[\pi/2, r] / \text{normal}[\pi/2]$ ,  $\rho_2[\pi/6, r] / \text{normal}[\pi/6]$ }, {r, 0, 1}, **Frame** → **Automatic** ]



■ Função de correlação de pares no caso não-integrável

In[158]:= **rhoNINT** [k1\_, k2\_, x2\_, x3\_] = **Assuming**[assumptions , **Integrate** [ψ[k1, k2, x1, x2, x3] ψ[k1, k2, x1, x2, x3], {x1, 0, 1}]]

In[160]:= **FullSimplify** [rhoNINT [k1, k2, (1 - r) / 2, (1 + r) / 2]]

$$\text{Out[160]=} \begin{cases} \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ \frac{k_2}{2} - k_2 r \right]^2 (2 k_1 \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] + \text{Sin} [2 k_1] + 4 (k_1 + \text{Sin} [k_1 (2 - r)] + \text{Sin} [k_1 r])) & r > 1 \\ \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ k_2 \left( \frac{1}{2} + r \right) \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 (1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] - 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (1 + r)] + 8 \text{Sin} [k_1] - \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 (1 + r)]) & -1 \leq r < 0 \\ \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ k_2 \left( \frac{1}{2} + r \right) \right]^2 (2 k_1 \text{Cos} [2 k_1 (1 + r)] + \text{Sin} [2 k_1] + 4 (k_1 - \text{Sin} [k_1 r] + \text{Sin} [k_1 (2 + r)])) & r < -1 \\ \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ \frac{k_2}{2} - k_2 r \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] - 2 k_1 (-1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] + 8 \text{Sin} [k_1] + \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 - 2 k_1 r]) & \text{True} \end{cases}$$

■ Expressão completa para a função de correlação de pares no caso não-integrável (não-normalizada)

In[164]:= **NINT** $\rho_2$ [k1\_, k2\_, r\_] = **FullSimplify**  $\left[ \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ \frac{k_2}{2} - k_2 r \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] - 2 k_1 (-1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] + 8 \text{Sin} [k_1] + \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 - 2 k_1 r]) \right]$

$$\text{Out[164]=} \frac{1}{16 k_1} \text{Cos} \left[ \frac{1}{2} (k_2 - 2 k_2 r) \right]^2 (4 k_1 + 2 k_1 r \text{Cos} [2 k_1 (-1 + r)] - 2 k_1 (-1 + r) \text{Cos} [2 k_1 r] + 8 \text{Sin} [k_1] + \text{Sin} [2 k_1 r] + \text{Sin} [2 k_1 - 2 k_1 r])$$

■ Verificação de consistência entre os casos integrável e não integrável

In[166]:= **FullSimplify** [ $\rho_2$ [k1, r] / **NINT** $\rho_2$ [k1, k1, r]]

Out[166]= 1

- Transformada de Fourier da função de onda (caso não-integrável) para o bóson impureza

```
In[168]:=  $\phi$ [k1_, k2_, p_, x2_, x3_] =
  Assuming[assumptions, Integrate [ $\psi$ [k1, k2, x1, x2, x3] Exp[-i p x1], {x1, 0, 1}]]
```

- Cálculo numérico da distribuição de momentum caso não-integrável

```
In[169]:= n[k1_, k2_, p_] := NIntegrate [
  ( $\phi$ [k1, k2, p, x2, x3]  $\phi$ [k1, k2, p, x2, x3]*) / normaNI [k1, k2], {x2, 0, 1}, {x3, 0, 1}]
```

- Cálculo numérico do fator de estrutura estático caso não-integrável

```
In[170]:= S[k1_, k2_, p_] := 1 +
  3 NIntegrate [Exp[-i p (x3 - x2)]  $\left(\frac{6}{9} \frac{\text{rhoNINT}[k1, k2, x2, x3]}{\text{normaNI}[k1, k2]} - 1\right)$ , {x2, 0, 1}, {x3, 0, 1}]
```

# Apêndice F

## Trabalho Publicado

Neste apêndice incluímos a publicação resultante do trabalho que deu origem à esta dissertação, que constitui a principal contribuição do autor para a área [46].

**Contact and static structure factor for bosonic and fermionic mixtures**Rafael E. Barfknecht,<sup>1,\*</sup> Ioannis Brouzos,<sup>2,†</sup> and Angela Foerster<sup>1,‡</sup><sup>1</sup>*Instituto de Física da UFRGS, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, RS, Brazil*<sup>2</sup>*Center for Integrated Quantum Science and Technology, Institute for Complex Quantum Systems, Universität Ulm, D-89069 Ulm, Germany*

(Received 23 January 2015; revised manuscript received 12 March 2015; published 30 April 2015)

We study measurable quantities of bosonic and fermionic mixtures on a one-dimensional ring. These few-body ensembles consist of majority atoms obeying certain statistics (Fermi or Bose) and an impurity atom in a different hyperfine state. The repulsive interactions between majority-impurity and majority-majority are varied from weak to strong. We show that the majority-impurity repulsion is mainly responsible for the loss of coherence in the strongly interacting regime. The momentum distribution follows the  $C/p^4$  universal behavior for the high-momentum tail, but the contact  $C$  is strongly dependent on the strength of the majority-impurity and in a different way on the majority-majority interactions. The static structure factor of the majority atoms exposes a low-momentum peak for strong majority-impurity repulsion, which is attributed to an effective attraction not expected for purely repulsive forces.

DOI: 10.1103/PhysRevA.91.043640

PACS number(s): 67.85.-d, 02.30.Ik, 03.75.Hh

**I. INTRODUCTION**

Nonlocal measurable quantities of cold atom systems play a major role in the experimental probe of their properties. From the momentum distributions in the first realizations of Bose-Einstein condensates [1,2] and the time-of flight images of phase transitions in optical lattices [3], to the probing of the Tonks-Girardeau (TG) gas (an infinitely repulsive one-dimensional (1D) bosonic ensemble with fermionic properties [4,5]), experimental techniques have given rise to an unprecedented degree of control, manipulation, and measurement of atomic systems [6–8]. For 1D systems, theoretical research has developed analytical and numerical methods to study properties of those quantities, like the universal  $C/p^4$  asymptotic behavior of the momentum distribution [9–11], which is governed by the contact  $C$ . This is a notion that captures all universal properties of such systems even close to phase transitions [12] and has been recently measured in ultracold gases [13–15]. The structure factor, another important concept originated in solid-state physics to probe crystalline lattices, has recently been studied [16–18] and observed for 1D Bose gases via Bragg spectroscopy [19].

More recent advances in experiments deal with mixtures of Bose-Bose, Bose-Fermi, and Fermi-Fermi cold gases [20–23]. It also became possible to realize few-body ensembles of bosons [24,25] and fermions in different hyperfine states [26] and measure the effects of an impurity by increasing the number of fermions one by one [27]. For composite mixtures of bosons and fermions several local quantities have been studied and have exhibited various phases not present in pure ensembles [28–30], but some advances are still to be done on the side of nonlocal correlators [31].

In this work we investigate, using a Jastrow-type ansatz, some measurable nonlocal quantities for a few-body ensemble of bosons or fermions in a 1D ring in the presence of an impurity of the same mass but in a different hyperfine state.

In these systems, repulsive interactions between impurity majority or, for the bosonic case, majority-majority pairs can be tuned via Feshbach resonances. For the integrable system constituted by an impurity in a Fermi sea, the ground state wave functions and energies have been exactly obtained in Ref. [32] and results for correlations are discussed in Ref. [33]. For a system of bosons, if all interaction strengths are equal, the Lieb-Liniger integrable model can be applied [34]. However, when the interaction strengths differ and the system becomes nonintegrable [35–37], we show that all measurable nonlocal correlation quantities exhibit a behavior substantially different from that of the integrable one. In particular, the reduced one-body density matrix of the majority atoms, a correlation function that shows the degree of coherence in its off-diagonal terms, is strongly dependent on the impurity-majority coupling strength. At the same time, the high-momentum tail of the momentum distribution obeys a  $C/p^4$  universal behavior for all cases studied here. The numerical values for the contact  $C$  depend not only on the impurity-majority and majority-majority couplings, but also on the nature of the atom being considered. For different interactions, the static structure factor deviates from the integrable case, above and below the phononic behavior of the TG gas; most surprisingly, a pronounced peak arises for strong majority-impurity repulsion, which is an indicator of a quasicrystalline structure and of effective attractive correlations in a purely repulsively interacting ensemble. The results obtained here for the correlations via a simple Jastrow ansatz are compared with the exact solutions in the corresponding cases where those solutions exist, showing in general very good agreement.

**II. SYSTEM HAMILTONIAN AND ANSATZ**

We consider a system of three atoms on a 1D ring of length  $L$  with contact interactions and periodic boundary conditions. The Hamiltonian reads

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \sum_{i<j} g_{ij} \delta(x_i - x_j), \quad (1)$$

\*rafael.barfknecht@ufrgs.br

†ioannis.brouzos@uni-ulm.de

‡angela@if.ufrgs.br

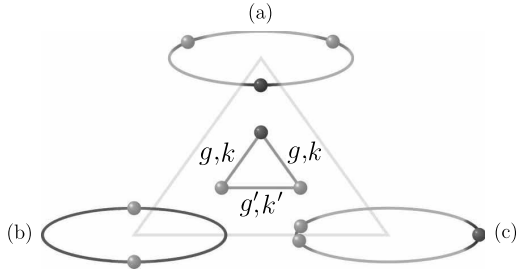


FIG. 1. (Color online) Schematic depiction of the physical system for representative cases: (a) strongly repulsive integrable case, in which the separation between the three atoms is at maximum. (b) The interaction between the majority pair is strong, but the impurity-majority interaction is weak; therefore the impurity atom appears “delocalized” across the ring. (c) The impurity strongly repels the majority pair but the majority-majority interaction is weak, so these atoms tend to bunch together on the other side of the ring.

where the lengths are in units of  $L$  and energies in units of  $\hbar^2/mL^2$ . The interaction strength  $g_{ij}$  may be different for each pair of atoms  $i, j$  and is controllable via Feshbach or confinement-induced resonances since  $g = g_{1D}/(\hbar^2/mL)$  with  $g_{1D} = \frac{2\hbar^2 a_{3D}}{ma_{\perp}^2} (1 - \frac{\zeta(1/2)a_{3D}}{\sqrt{2}a_{\perp}})^{-1}$ , where  $m$  is the atom mass,  $\zeta$  is the Riemann zeta function,  $a_{3D}$  is the three-dimensional  $s$ -wave scattering length, and  $a_{\perp}$  is the length of the transversal confinement [38]. The latest is assumed to be very small such that the system is effectively 1D. The composite system where the only difference between the atoms is the coupling strengths  $g_{ij}$  with respect to each other can be realized experimentally by using atoms of the same species in different hyperfine states.

As shown in Fig. 1 we consider three atoms on a ring, with two of them being in the same hyperfine state and obeying fermionic or bosonic statistics, and the third (which we call the impurity) in a different hyperfine state. Therefore we have two important parameters, the coupling strength  $g$  between impurity and majority atoms and the  $g'$  for the bosonic case for the interaction between the majority atoms. In the case where the majority atoms are fermions, the  $s$ -wave scattering is forbidden due to the statistics, and the only parameter that remains is the impurity-majority coupling strength.

### A. Underlying physics

In Fig. 1 we schematically depict the extreme cases that indicate the basic underlying physical scenarios that appear in this system. Figure 1(a) represents the integrable case where  $g = g'$  and the atoms are strongly repulsive, so they tend to maximize the distance between them. In Fig. 1(b) only the majority atoms repel strongly each other (or obey the Pauli exclusion principle if they are fermions), and therefore they tend to localize on diametric positions on the ring. The impurity is delocalized all over as a single particle since the interaction with the others is vanishing. On the other hand,

in Fig. 1(c) the interaction between the bosonic majority atoms  $g'$  is vanishing or very weak, and the impurity strongly repels both. In this case the majority atoms tend to maximize the distance with the impurity, and this leads to an effectively “attractive” scenario, where they bunch together (this kind of effect has also been verified in harmonically trapped systems [39]). We will see that this indirect attraction of the majority atoms via the impurity induces various effects in the observable properties, the most striking being the peak in low momentum for the static structure factor. Let us stress here that at least these extreme situations are representative also for ensembles of many majority atoms, since the underlying physics are similar to those explained above.

### B. Ansatz

Extreme cases in bosonic systems like the one depicted in Fig. 1(a) also allow for exact solutions of the many-body Schrödinger equation that are obtained by means of Bose-Fermi mapping [40], which “maps” the infinitely repulsive bosons to free fermions. The Jastrow-type ansatz that we employ here is based on those solutions and also on the two-body integrable Lieb-Liniger case:

$$\psi_{ij} = \cos[k_{ij}(|x_i - x_j| - 1/2)], \quad (2)$$

where  $k_{ij}$  (in units of  $1/L$ ) is related to the interaction strength  $g_{ij}$  by  $k_{ij} = 2 \arctan(g_{ij}/2k_{ij})$ , with  $k_{ij} \in [0, \pi]$ . The Jastrow ansatz for our system of three bosons reads:

$$\psi = \mathcal{N} \cos[k(|x_i - x_{m1}| - 1/2)] \cos[k(|x_i - x_{m2}| - 1/2)] \times \cos[k'(|x_{m1} - x_{m2}| - 1/2)], \quad (3)$$

where  $\mathcal{N}$  is a normalization constant,  $x_i$  denotes the position of the impurity atom,  $x_{m1}$  and  $x_{m2}$  the positions of the majority atoms, and  $k, k'$  are related to  $g$  and  $g'$ , respectively. Although here we conveniently write the ansatz for our particular system it is clear that it can be generalized for more atoms and different pairs. Indeed, for fermionic majority atoms, we modify the last term to  $\sin[\pi(x_{m1} - x_{m2})]$ , which respects the fermionic exchange property. Note that, contrary to the bosonic case, this term does not correspond to the exact ground state wave function for a pair of identical fermions (see Ref. [41] for details). However, as we will show next, this expression, besides of being simpler to handle, is able to reproduce the relative correlations for the cases that we study here.

In Fig. 2 we compare the results for correlations using the Jastrow ansatz to the exact ones given by the Bethe ansatz in the integrable cases. We particularly focus on basic quantities such as the one-body correlation function,

$$\rho(x, x') = \int dx_2 \cdots dx_N \psi(x, x_2, \dots, x_N) \psi^*(x', x_2, \dots, x_N), \quad (4)$$

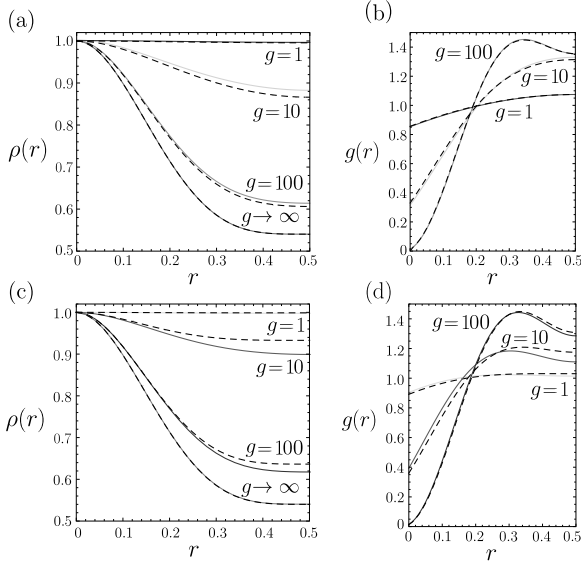


FIG. 2. (Color online) Comparison of results from Jastrow ansatz and exact solutions for different interaction strengths for (a) one-body correlation function and (b) pair correlations in the integrable bosonic case and (c) one-body correlation function for the impurity fermion and (d) pair correlation for a fermionic impurity-majority pair. Black dashed lines correspond to the results obtained using the corresponding exact wave functions.

and the pair correlation function,

$$g(x_1, x_2) = \int dx_3 \cdots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2, \quad (5)$$

where we assume that the  $N$ -body wave functions are normalized to unity. In Fig. 2(a) we present the one-body correlation function with respect to the relative distance  $r = x_1 - x_2$  for the bosonic case for several interaction strengths. We find that the Jastrow ansatz is in good agreement with the existing exact solutions [34]. The same holds for the bosonic pair correlations as a function of the separation  $r = x_1 - x_2$ , as shown in Fig. 2(b). As expected, in the extreme cases of vanishing and infinite repulsion (TG gas) the agreement is at best since the Jastrow ansatz coincides with the exact solution [42]. For the case of two majority fermions with an impurity, we compare the results of the Jastrow ansatz with the exact solution [32,33] in Figs. 2(c) and 2(d). Again we find that the agreement is very good in the weak and strong interaction limits, with slight deviations for intermediate interaction strengths. Here  $\rho(x, x')$  refers to the impurity fermion, and the pair correlation function is calculated for an impurity-majority pair, so  $x_1 = x_i$  and  $x_2 = x_{m+1}$ . For the homogeneous cases discussed here where an exact solution exists, the Jastrow ansatz provides a simple and reliable approximation of this solution. Therefore, we can state that even without a variational approach, this ansatz captures the basic physics of the systems that we discuss here. We mention that an approach to correlations for bosons in a harmonic trap has been discussed in Ref. [43], while correlations for the two-component trapped fermionic system have been studied in Refs. [44,45]

### III. MEASURABLE QUANTITIES

#### A. One-body correlation function

In our system we can find either the correlation function for the impurity or the majority atoms by integrating out the coordinates of the other pair of atoms in each case. The one-body correlation function, and in particular its off-diagonal terms, characterizes the degree of coherence of a given atom of the system. As we observe for the integrable case in Fig. 3(a) when the interactions are weak or intermediate ( $k = \pi/2$  corresponds to  $g = \pi$ ) there is coherence in the ensemble since diagonal and off-diagonal terms are almost equal. This behavior resembles that of the Bose-Einstein condensate, which is a coherent ensemble of many bosonic atoms. On the other hand, when the repulsive interaction becomes very strong as in Fig. 3(b) ( $k = 9\pi/10$  corresponds to  $g \approx 35.7$ ) the atoms tend to localize and lose coherence. The diagonal  $x = x'$  peak (and due to the periodic boundary conditions and symmetry the peak at distance  $L$ ) becomes much more pronounced than the off-diagonal area around distance  $L/2$ . This is typical for few body 1D ensembles at strong interactions which are no longer represented by a single coherent wave function but are occupying higher single-particle states (orbitals), an effect known as depletion of the condensate or fragmentation [46–49]. We have a similar effect for the impurity atom when the impurity-majority interaction is strong and also for the majority atoms when the interaction between them is strong. The most interesting nonintegrable case is depicted in Figs. 3(c) and 3(d) where we see the loss of coherence for the majority atoms solely due to the increase of the strength of the interaction with the impurity. Since the direct interaction term between the majority atoms is small ( $k = \pi/10, g \approx 0.1$ ) one would expect that they remain coherent, but it is shown that if the impurity repels them strongly, then they get localized [see also schematic Fig. 1(c)]. Since the one-body density matrix is always symmetric with respect to the diagonal [as we see in Figs. 3(a)–3(d)] we can depict the whole behavior as a function of  $r = x - x'$  (as done in Fig. 2) and of the interaction. Therefore we show in Figs. 3(e)–3(i) the whole behavior of the correlation function as a function of  $k$ . The localization around  $r = 0$  again shows that the loss of coherence appears gradually for high  $k$ . Very similar behavior is obtained for the impurity atom as shown in Fig. 3(f) due to the impurity-majority strong interaction. In Fig. 3(g) the bosonic majority atom is shown to lose coherence at large impurity-majority interactions even if majority-majority coupling is rather low. A comparison between the fermionic majority atoms and bosonic majority atoms with infinite repulsion ( $k' = \pi$ ) shows that the fermionic atoms have more pronounced localization. In other words, the infinitely repulsive bosonic atoms are resembling fermions in their nonlocal correlation also as a function of the repulsive strength with the impurity, but they never get as radically localised as the majority fermions.

#### B. Momentum distribution and contact

An observable directly connected to the one-body correlation function is the momentum distribution:

$$n(p) = \int dx dx' \rho(x, x') e^{-ip(x-x')}, \quad (6)$$

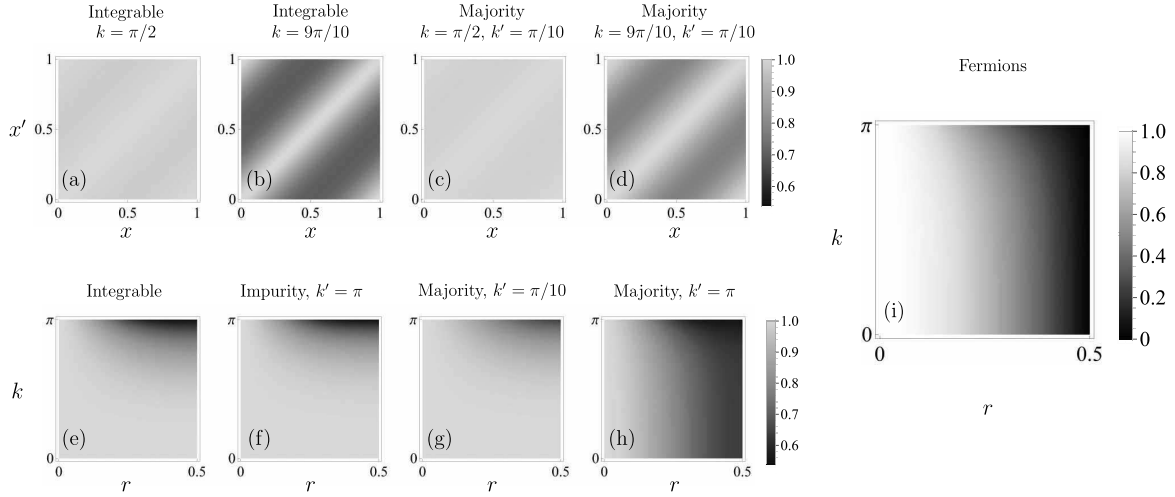


FIG. 3. (Color online) One-body correlation function for representative cases interactions in the integrable, majority, and impurity cases. Loss of coherence [depletion of the off-diagonal terms of  $\rho(x, x')$ ] from (a) weak to (b) strong interaction in the integrable case, and from (c) weak to (d) strong repulsion from the impurity for the majority bosonic atoms. Behavior of  $\rho(r = |x - x'|)$  as a function of the interaction parameter  $k$  in the cases of (e) integrable system, (f) impurity atom for strong majority interactions, majority atoms for (g) weak and (h) strong interactions, and (i) majority fermions.

where  $p = 2\pi \text{sands}$  is an integer. We show in the Appendix that this is equivalent to calculating first the many-body wave function in momentum space for one atom,

$$\phi(p, x_2, \dots, x_N) = \int dx_1 e^{-i p x_1} \psi(x_1, x_2, \dots, x_N),$$

and then integrating out the rest of the coordinates from its square modulus.

It is known that the asymptotic behavior (the large  $p$  tail) of the momentum distribution obeys an universal power law [11,31]

$$n(p) = \frac{\mathcal{C}}{p^4}, \quad \text{for } p \rightarrow \infty. \quad (7)$$

An expression for  $\mathcal{C}$  depending on the two-body correlation function is given in Ref. [50]

$$\mathcal{C} = \frac{4(N-1)\rho_2(0,0)}{a_{1D}^2}, \quad (8)$$

where  $a_{1D}$  is the 1D scattering length, defined as  $a_{1D} = -2/mg$ , and  $\rho_2(0,0)$  is the normalized two-body correlation function at vanishing distance between the atoms (an analytical expression for  $\rho_2$  in the case of three atoms is given in Ref. [37], while thermodynamic limit formulas for weak and strong interactions are found in Ref. [51]). The proportionality constant  $\mathcal{C}$  is called *contact* and is determined by the strength of the interaction. The contact characterizes all the universal properties of such systems that are independent of the details of the interaction. For a fixed interaction, it is proportional to the probability that two atoms can be found at a short distance from each other (in this case at zero separation). In Fig. 4(a) we verify the  $\mathcal{C}/p^4$  asymptotic behavior, not only for the integrable but also for all cases considered here. We

also verify that Eq. (8) is capturing the correct behavior of the contact for all our data points in the integrable case. For the nonintegrable cases where interactions are different, there is no explicit formula in the literature for the contact. Therefore we write, in analogy to the calculations in Ref. [50], an analytical expression for the asymptotics of momentum distribution [52]

$$n(p) \stackrel{|p| \rightarrow \infty}{\approx} \int dx_2 \dots dx_N \left| \sum_{j=2}^N (2/a_{1D}^{1j}) e^{-i p x_j} \times \Psi(x_1 = x_j, \dots, x_j, \dots, x_N) \right|^2 \frac{1}{p^4}, \quad (9)$$

where we identify the prefactor as the contact. The index  $j$  is inserted to account for different interactions between particle  $x_1$  and the other particles of the ensemble. For our particular case of three particles, the interaction between the impurity and the remaining pair is the same (so  $a_{1D}^{12} = a_{1D}^{13}$ ), and the difference from the integrable contact will be carried only in the wave function. For the contact of the majority atoms, the scattering length will be different for each pair ( $a_{1D}^{21} \neq a_{1D}^{23}$ ). For all nonintegrable cases this formula predicts very well the behavior of the momentum distribution at large large momentum for our data points as is shown for exemplary cases in Fig. 4(a). By using Eq. (9) we can then calculate the contact for all different interaction strengths, for impurity and majority atoms; the results for the contact as a function of the interaction parameters are presented in Figs. 4(b) and 4(c). In general the value of the contact increases with the interaction strength, but the main observation here is that the contact for the majority atoms is symmetrically dependent on  $k$  and  $k'$  while for the impurity the major change comes, as expected, from the increase of the interaction with the majority atoms  $k$ .



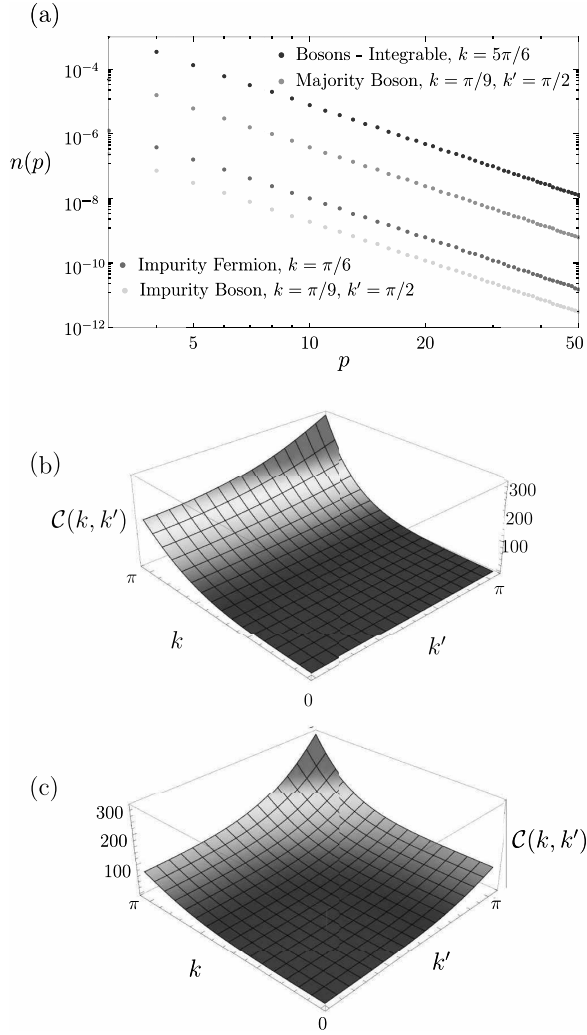


FIG. 4. (Color online) (a) Momentum distribution for different interactions, including integrable bosonic, majority, and impurity bosons and fermionic cases ( $p$  is in units of  $2\pi$ ). Dashed black lines are the predicted values given by Eqs. (8) (integrable) and (9) (nonintegrable). (b) Contact as a function of  $k$  and  $k'$ , obtained from Eq. (9) for the impurity atom. (c) Same as (b), but for a majority atom.

### C. Static structure factor

The structure factor is a property that defines how an ensemble of atoms scatters incident radiation. Experimentally, it is usually measured by two-photon Bragg scattering, in which the atom sample is subject to two detuned laser beams. The stimulated emission of light by the atoms gives rise to interference patterns that can be measured and contain information about the structure of the sample. For different wave vectors  $p$  and frequencies  $\omega$  of the beams, it is possible to measure the dynamic structure factor  $S(p, \omega)$  of the system. Its integral over all frequencies provides the static structure

factor, defined for 1D homogeneous systems as [16]

$$S(p) = 1 + \int dx_j dx_i e^{-ip(x_i - x_j)} [g(x_i, x_j) - 1], \quad (10)$$

where  $p$  is again quantized as  $2\pi s$  and the pair correlation  $g(x_i, x_j)$  is renormalized to  $N(N-1)/N^2$  for convenience. For our system, the pair correlation function can refer to an impurity-majority pair ( $x_i = x_i$  and  $x_j = x_{m1}$ ) or a majority-majority pair ( $x_i = x_{m1}$  and  $x_j = x_{m2}$ ), and  $N(N-1)/N^2 = 6/9$ .

In the low-momentum region and infinitely repulsive regime, hydrodynamic theory [53] predicts that the static structure factor should behave linearly with  $p$ . Particularly, for the TG limit this behavior is described by  $S(p) = |p|/2\pi n$ , where  $n = N/L$  is the particle density. This result is characteristic of phonon excitations in many-body systems, but we confirm it also in our few-body system in the integrable case as shown in Fig. 5(a). For high momentum the structure factor always converges to 1 (a high-speed probe would not be scattered by the cold atom ensemble). For low momentum the behavior of the nonintegrable cases deviates much from that of the integrable, the first peak being below the TG phononic behavior or above it.

Most importantly, for the majority bosons  $S$  can also be over 1, an effect that indicates a quasicrystalline structure and is not present in the integrable case. It results specifically from the fact that the repulsion with the impurity is inducing an effective attraction between the majority atoms as depicted in Fig. 1(c). This is also a characteristic of the so-called Super-Tonks gas, which is an excited state on the attractive side of the Feshbach resonance that also exhibits a peak above 1 in the structure factor at low momentum as shown in Ref. [54]. We focus in Figs. 5(b) and 5(c) on the behavior of the structure factor at low momentum  $p=1$ . In (c) we observe again this peak arising smoothly for the majority atoms and being very pronounced at low  $k'$  and high  $k$ . For the impurity-majority pair,  $S \leq 1$ , as is shown in Fig. 5(c), and the main change comes from impurity-majority repulsion. An important issue regarding the experimental determination of the structure factor is the possibility of measuring this quantity separately for impurity-majority and majority-majority pairs. This could be achieved, for instance, by having the beams polarized, in such a way that the photons could couple differently to the spin (or pseudospin) components in the system [55]. Another way to obtain this difference in the coupling involves a specific detuning of the laser beams, leading to separate measures in the components of the total structure factor, as argued in Ref. [56].

### IV. CONCLUSIONS AND OUTLOOK

We have studied the nonlocal correlation functions of few-body bosonic and fermionic mixtures in a 1D ring in the presence of an impurity in a different hyperfine state. The interaction strengths between impurity-majority and majority-majority pairs may differ, which renders the system nonintegrable. The strength of this difference is responsible for pronounced effects in observable quantities. Most of the effects that we study on the one-body correlation function,

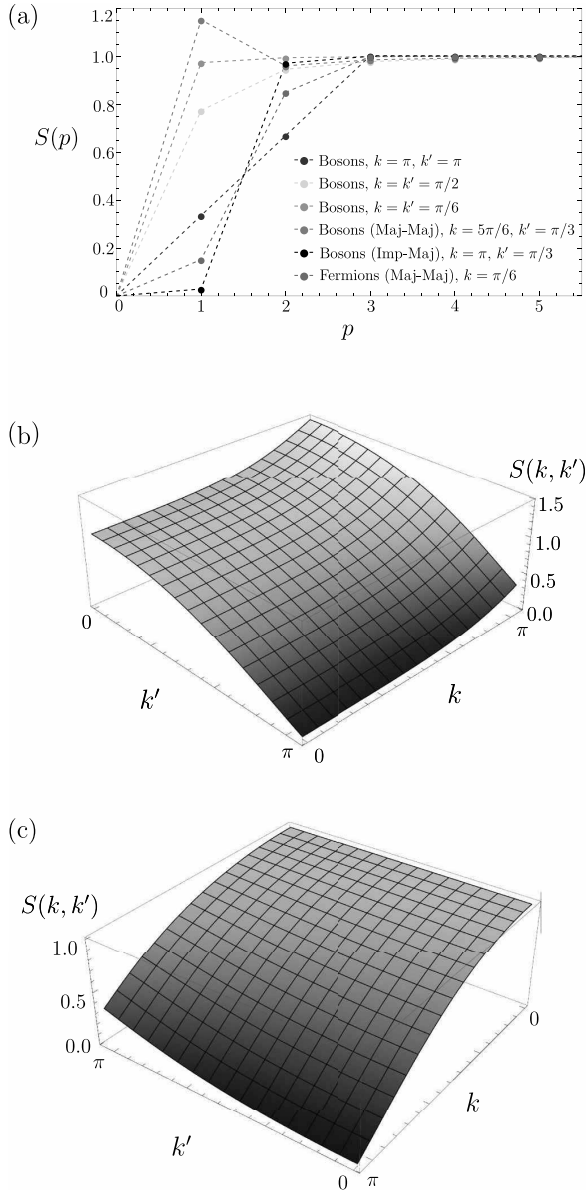


FIG. 5. (Color online) (a) Low momentum region of the static structure factor for several integrable and nonintegrable bosonic cases, as well the fermionic majority-majority case ( $p$  is in units of  $2\pi$ ). (b) Static structure factor as a function of  $k$  and  $k'$ , obtained by using the majority-majority pair correlation function for bosons, with  $p$  fixed as  $2\pi$ . (c) Same as in (b), but for an impurity-majority pair.

on the contact and on the static structure factor refer to a weakly interacting majority pair which is strongly repelled by an impurity atom. In particular, this gives rise to effective attractive interactions and a pronounced peak in the structure factor. By means of our Jastrow ansatz, which is in very good

agreement with the existing exact solutions for certain cases, we are able to provide results for several observable quantities in the nonintegrable regime.

The experimental verification of the quantities we study is possible since recent advances in ultracold atoms techniques allowed for measurements in few-body systems. Many of our results also hold qualitatively for a larger number of majority atoms. Our approach can be extended to other cases which are relevant for experiments, like differently mixed systems and larger ensembles.

#### ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank G. E. Astrakharchick and V. Dunjko for inspiring discussions. The authors acknowledge Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) for financial support.

#### APPENDIX

The momentum distribution is usually obtained by performing the Fourier transform of the one-body correlation function  $\rho(x, x')$  (assuming a normalized wave function):

$$n(p) = \int dx dx' \rho(x, x') e^{-ip(x-x')}. \quad (\text{A1})$$

We consider now  $\rho(x, x')$  as given in Eq. (4). By replacing it in Eq. (A1), we get

$$n(p) = \int dx_2 dx_3 dx dx' \psi(x, x_2, x_3) \psi^*(x', x_2, x_3) e^{-ip(x-x')}, \quad (\text{A2})$$

which can be rewritten as

$$n(p) = \int dx_2 dx_3 \int dx \psi(x, x_2, x_3) e^{-ipx} \times \int dx' \psi^*(x', x_2, x_3) e^{ipx'}. \quad (\text{A3})$$

From Eq. (7),  $\int dx \psi(x, x_2, x_3) e^{-ipx} = \phi(p, x_2, x_3)$ , so Eq. (A3) results in

$$n(p) = \int dx_2 dx_3 |\phi(p, x_2, x_3)|^2, \quad (\text{A4})$$

which can be calculated given that an expression for  $\phi(p, x_2, x_3)$  exists. For the momentum space representation of the wave function with respect to the coordinate  $x_1$

in the bosonic case, this expression reads:

$$\sqrt{\mathcal{N}_B}\phi(p, x_2, x_3) = \begin{cases} \frac{1}{2(-4k^2 p + p^3)} e^{-ip(1+2x_2+2x_3)} \cos\left[k'\left(\frac{1}{2} - x_2 + x_3\right)\right] (-i(4e^{-ip(1+2x_2+2x_3)} k^2 - 4e^{ip(1+x_2+2x_3)} k^2 - e^{2ip(x_2+x_3)}(-4k^2 + p^2) + e^{ip(1+2x_2+2x_3)}(-4k^2 + p^2)) \\ \times \cos[k(x_2 - x_3)] + 4ie^{ip(1+x_2+x_3)}(e^{ipx_2} - e^{ipx_3})k^2 \cos[k(1 - x_2 + x_3)] \\ - 2e^{ip(1+x_2+x_3)}(e^{ipx_2} + e^{ipx_3})kp\{\sin[k(x_2 - x_3)] + \sin[k(1 - x_2 + x_3)]\} \\ - ie^{2ip(x_2+x_3)}p\{p\cos[k(-1 + x_2 + x_3)] - 2ik\sin[k(-1 + x_2 + x_3)]\}), \quad \text{if } x_2 > x_3, \\ \frac{1}{2(-4k^2 p + p^3)} e^{-ip(1+2x_2+2x_3)} \cos\left[k'\left(\frac{1}{2} - 2x_2 + 2x_3\right)\right] (-i[4e^{ip(1+2x_2+2x_3)} k^2 - 4e^{ip(1+x_2+2x_3)} k^2 - e^{2ip(x_2+x_3)}(-4k^2 + p^2) + e^{ip(1+2x_2+2x_3)}(-4k^2 + p^2)] \\ \times \cos[k(x_2 - x_3)] - 4ie^{ip(1+x_2+x_3)}(e^{ipx_2} - e^{ipx_3})k^2 \cos[k(1 + x_2 - x_3)] \\ + 2e^{ip(1+x_2+x_3)}(e^{ipx_2} + e^{ipx_3})kp\{\sin[k(x_2 - x_3)] - \sin[k(1 + x_2 - x_3)]\} \\ - ie^{2ip(x_2+x_3)}p\{p\cos[k(-1 + x_2 + x_3)] - 2ik\sin[k(-1 + x_2 + x_3)]\}), \quad \text{if } x_2 < x_3, \end{cases} \quad (\text{A5})$$

where  $\mathcal{N}_B$  is the normalization for the bosonic wave function [37]. For the fermionic wave function, we obtain

$$\sqrt{\mathcal{N}_F}\phi(p, x_2, x_3) = \begin{cases} \frac{1}{2(-4k^2 p + p^3)} e^{-ip(1+2x_2+2x_3)} \sin[\pi(x_2 - x_3)] (-i[4e^{ip(1+2x_2+2x_3)} k^2 - 4e^{ip(1+x_2+2x_3)} k^2 - e^{2ip(x_2+x_3)}(-4k^2 + p^2) + e^{ip(1+2x_2+2x_3)}(-4k^2 + p^2)] \\ \times \cos[k(x_2 - x_3)] + 2ie^{ip(1+x_2+x_3)}k[2i(e^{ipx_2} - e^{ipx_3})k\cos[k(1 - x_2 + x_3)] \\ - (e^{ipx_2} + e^{ipx_3})p\{\sin[k(x_2 - x_3)] + \sin[k(1 - x_2 + x_3)]\} - ie^{2ip(x_2+x_3)} \\ \times (-1 + e^{-ip})p\{p\cos[k(-1 + x_2 + x_3)] - 2ik\sin[k(-1 + x_2 + x_3)]\}]), \quad \text{if } x_2 > x_3, \\ \frac{1}{2(-4k^2 p + p^3)} e^{-ip(1+2x_2+2x_3)} \sin[\pi(x_2 - x_3)] (-i[-4e^{ip(1+2x_2+2x_3)} k^2 + 4e^{ip(1+x_2+2x_3)} k^2 - e^{2ip(x_2+x_3)}(-4k^2 + p^2) + e^{ip(1+2x_2+2x_3)}(-4k^2 + p^2)] \\ \times \cos[k(x_2 - x_3)] - 4ie^{ip(1+x_2+x_3)}k^2 \cos[k(1 + x_2 + x_3)] + 2e^{ip(1+x_2+x_3)} \\ \times (e^{ipx_2} + e^{ipx_3})kp\{\sin[k(x_2 - x_3)] - \sin[k(1 + x_2 + x_3)]\} - ie^{2ip(x_2+x_3)} \\ \times (-1 + e^{-ip})p\{p\cos[k(-1 + x_2 + x_3)] - 2ik\sin[k(-1 + x_2 + x_3)]\}]), \quad \text{if } x_2 < x_3. \end{cases} \quad (\text{A6})$$

The normalization of the wave function for the fermionic system is given by

$$\mathcal{N}_F = \frac{2k^6 - 2k^2\pi^2 - 4k^4\pi^2 + \pi^4 + 2k^2\pi^4 + 2k^2\pi^2 \cos(2k) - \pi^4 \cos(2k) + 4k^5 \sin(k) - 8k^3\pi^2 \sin(k) + 4k\pi^4 \sin(k)}{16k^2(-k+\pi)^2(k+\pi)^2}.$$

- 
- [1] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995)
- [2] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995)
- [3] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature (London)* **415**, 39 (2002)
- [4] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature (London)* **429**, 277 (2004)
- [5] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Science* **305**, 1125 (2004)
- [6] S. B. Papp, J. M. Pino, and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 040402 (2008)
- [7] G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 210402 (2008)
- [8] E. Haller, M. J. Mark, R. Hart, J. G. Danzl, L. Reichsöllner, V. Melezhik, P. Schmelcher, and H. C. Nägerl, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 153203 (2010)
- [9] A. Minguzzi, P. Vignolo, and M. P. Tosi, *Phys. Lett. A* **294**, 222 (2002)
- [10] G. J. Lapeyre, Jr., M. D. Girardeau, and E. M. Wright, *Phys. Rev. A* **66**, 023606 (2002)
- [11] J.-S. Caux, P. Calabrese, and N. A. Slavnov, *J. Stat. Mech.* (2007) P01008.
- [12] Y. Y. Chen, Y. Z. Jiang, X. W. Guan, and Q. Zhou, *Nature Comm.* **5**, 5140 (2014)
- [13] E. D. Kuhnle, H. Hu, X.-J. Liu, P. Dyke, M. Mark, P. D. Drummond, P. Hannaford, and C. J. Vale, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 070402 (2010)
- [14] Y. Sagi, T. E. Drake, R. Paudel, and D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 220402 (2012)
- [15] S. Hoinka, M. Lingham, K. Fenech, H. Hu, C. J. Vale, J. E. Drut, and S. Gandolfi, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 055305 (2013)
- [16] G. E. Astrakharchik and S. Giorgini, *Phys. Rev. A* **68**, 031602(R) (2003)
- [17] C. Menotti, M. Krämer, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **67**, 053609 (2003)

- [18] M. Panfil and J. S. Caux, Phys. Rev. **A89**, 033605 (2014)
- [19] N. Fabbri, M. Panfil, D. Clément, L. Fallani, M. Inguscio, C. Fort, and J. S. Caux, arXiv:1406.2176 [cond-mat.quant-gas].
- [20] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell, and C.E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **78**, 586 (1997)
- [21] J. Catani, L. De Sarlo, G. Barontini, F. Minardi, and M. Inguscio, Phys. Rev. **A77**, 011603 (2008)
- [22] D. J. McCarron, H. W. Cho, D. L. Jenkin, M. P. Köppinger, and S. L. Cornish, Phys. Rev. **A84**, 011603 (2011)
- [23] G. Pagano, M. Mancini, G. Cappellini, P. Lombardi, F. Schäfer, H. Hu, X. J. Liu, J. Catani, C. Sias, M. Inguscio, and L. Fallani, Nature Phys. **10**, 198 (2014)
- [24] X. He, P. Xu, J. Wang, and M. Zhan, Optics Express **18**, 13586 (2010)
- [25] R. Bourgain, J. Pellegrino, A. Fuhrmanek, Y. R. P. Sortais, and A. Browaeys, Phys. Rev. **A88**, 023428 (2013)
- [26] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz, and S. Jochim, Science **332**, 336 (2011)
- [27] A. N. Wenz, G. Zürn, S. Murmann, I. Brouzos, T. Lompe, and S. Jochim, Science **342**, 457 (2013)
- [28] S. K. Adhikari and L. Salasnich, Phys. Rev. **A76**, 023612 (2007)
- [29] M. A. García-March, B. Juliá-Díaz, G. E. Astrakharchik, T. Busch, J. Boronat, and A. Polls, New J. Phys. **16**, 103004 (2014)
- [30] A. S. Dehkarghani, A. G. Volosniev, E. J. Lindgren, J. Rotureau, C. Forssén, D. V. Fedorov, A. S. Jensen, and N. T. Zinner, arXiv:1409.4224 [cond-mat.quant-gas].
- [31] M. Barth and W. Zwerger, Ann. Phys. **326**, 2544 (2011)
- [32] J. B. McGuire, J. Math. Phys. **6**, 432 (1965)
- [33] C. Recher and H. Kohler, J. Stat. Phys. **147**, 542 (2012)
- [34] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963)
- [35] B. Sutherland, *Beautiful Models: 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-Body Problems* (World Scientific, Singapore, 2004).
- [36] A. Lamacraft, Phys. Rev. **A87**, 012707 (2013)
- [37] I. Brouzos and A. Foerster, Phys. Rev. **A89**, 053623 (2014)
- [38] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998)
- [39] N. T. Zinner, A. G. Volosniev, D. V. Fedorov, A. S. Jensen, and M. Valiente, Europhys. Lett. **107**, 60003 (2014)
- [40] M. Girardeau, J. Math. Phys. **1**, 516 (1960)
- [41] M. Manninen, S. Viefers, and S. M. Reimann, Physica **E46**, 119 (2012)
- [42] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac, and M. Rigol, Rev. Mod. Phys. **83**, 1405 (2011)
- [43] I. Brouzos and P. Schmelcher, Phys. Rev. Lett. **108**, 045301 (2012)
- [44] S. E. Gharashi and D. Blume, Phys. Rev. Lett. **111**, 045302 (2013)
- [45] E. J. Lindgren, J. Rotureau, C. Forssén, A. G. Volosniev, and N. T. Zinner, New J. Phys. **16**, 063003 (2014)
- [46] S. Zöllner, H. D. Meyer, and P. Schmelcher, Phys. Rev. **A74**, 063611 (2006)
- [47] K. Sakmann, A. I. Streltsov, O. E. Alon, and L. S. Cederbaum, Phys. Rev. **A78**, 023615 (2008)
- [48] I. Brouzos, S. Zöllner, and P. Schmelcher, Phys. Rev. **A 81**, 053613 (2010)
- [49] M. K. Kang and U. R. Fischer, Phys. Rev. Lett. **113**, 140404 (2014)
- [50] M. Olshanii and V. Dunjko, Phys. Rev. Lett. **91**, 090401 (2003)
- [51] D. M. Gangardt and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. **90**, 010401 (2003)
- [52] V. Dunjko (private communication).
- [53] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1981)
- [54] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini, Phys. Rev. Lett. **95**, 190407 (2005)
- [55] I. Carusotto, J. Phys. B: At, Mol. Opt. Phys. **39**, S211 (2006)
- [56] R. Combescot, S. Giorgini, and S. Stringari, Europhys. Lett. **75**, 695 (2006)