

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - UFRGS

Dissertação de Mestrado

Modelo Exatamente Solúvel para Condensados de Bose-Einstein  
Hetero-triatômicos Moleculares

Aluno: Carlos Claiton Noschang Kuhn

Orientadora: Angela Foerster

Dezembro - 2008

Este trabalho é dedicado

à minha esposa.

# Agradecimentos

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

★ Aos colaboradores: Arlei Tonel, Gilberto Santos, I. Roditi e Eduardo Mattei que tiveram uma contribuição muito importante neste trabalho.

★ À minha esposa: Bárbara Caroline Colling Kuhn que foi compreensiva todos momentos que me dediquei a este trabalho.

★ Aos colegas do serviço: Cristiano Soares Mallmann, Israel Machado Gonçalves, Fábio Anziliero e Giorgi Acosta Martins que deram o apoio e seguraram o aperto nos momentos que precisei.

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

★ Ao colega e companheiro Tibério Borges Vale pela assistência prestada na solução de problemas computacionais.

*Muito Obrigado.*

# Resumo

Estudamos um Hamiltoniano exatamente solúvel que modela um condensado de Bose-Einstein hetero-triatômico molecular. Este modelo descreve a mistura de duas espécies de átomos em proporções diferentes que podem se combinar e formar uma molécula triatômica. Começando por uma análise clássica, nós determinamos os pontos fixos do sistema. Bifurcações destes pontos fixos separam o espaço de parâmetros em diferentes regiões. Três cenários distintos são encontrados, dependendo da diferença hetero-atômica. Estes resultados sugerem que as propriedades do estado fundamental do sistema exibem uma sensibilidade à diferença hetero-atômica. Subseqüentemente, nós fazemos uma análise quântica do sistema, utilizando diferentes técnicas, como a dinâmica quântica, valores esperados, o gap de energia e a fidelidade. Nós encontramos que os resultados da análise quântica confirmam as previsões da análise clássica.

# Abstract

We investigate an integrable Hamiltonian modelling a hetero-triatomic-molecular Bose-Einstein condensate. This model describes a mixture of two species of atoms in different proportions, which can combine to form a triatomic molecule. Beginning with a classical analysis, we determine the fixed points of the system. Bifurcations of these points separate the parameter space into different regions. Three distinct scenarios are found, varying with the atomic population imbalance. This result suggests the ground state properties of the quantum model exhibits a sensitivity on the atomic population imbalance, which is confirmed by a quantum analysis using different approaches, such as the ground-state expectation values, the behaviour of the quantum dynamics, the energy gap and the ground state fidelity.

# Sumário

<b>1. Introdução</b> . . . . .	2
<b>2. Modelo</b> . . . . .	8
2.1 Hamiltoniano . . . . .	9
2.2 Integrabilidade . . . . .	9
<b>3. Análise Clássica</b> . . . . .	13
3.1 Caso Negativo : $-2 \leq k < 0$ . . . . .	16
3.2 Caso Zero: $k = 0$ . . . . .	18
3.3 Caso Positivo: $0 < k \leq 1$ . . . . .	19
3.4 Diagrama de Parâmetros e curvas de nível . . . . .	20
<b>4. Análise Quântica</b> . . . . .	24
4.1 Dinâmica Quântica . . . . .	25
4.2 Valores esperados . . . . .	28
<b>5. Transições de Fase Quânticas</b> . . . . .	29
5.1 Fidelidade . . . . .	30
5.2 Gap de Energia . . . . .	32
<b>6. Conclusões</b> . . . . .	34
<b>A. Representação matricial do Hamiltoniano</b> . . . . .	37
<b>B. Método algébrico do ansatz de Bethe</b> . . . . .	43
<b>C. Verificação da Álgebra de Yang-Baxter</b> . . . . .	47
<b>Referências</b> . . . . .	50

## Capítulo 1

# Introdução

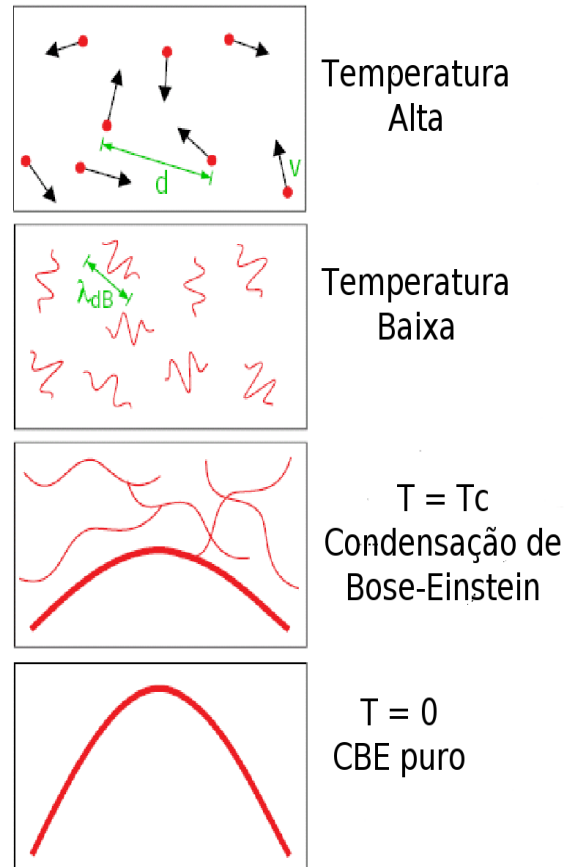
O fenômeno conhecido como Condensação de Bose-Einstein (CBE) foi previsto teoricamente em 1924 por Albert Einstein [1,2]. Esta descoberta surpreendente é uma consequência da estatística de Bose [3]. Posteriormente, este fenômeno receberia o nome de Condensados de Bose-Einstein em homenagem a estes dois cientistas. Desde a previsão teórica até a realização experimental em 1995, obtida por [4, 5, 6] usando vapores de átomos do grupo dos metais alcalinos  $^{87}\text{Rb}$ ,  $^7\text{Li}$  e  $^{23}\text{Na}$ , foram necessários muitos anos de estudo e aprimoramento das técnicas utilizadas nos laboratórios. A obtenção do condensado de Bose-Einstein em gases atômicos diluídos abriu a possibilidade de investigar o comportamento de uma nova classe de sistemas quânticos. Subseqüentemente o fenômeno tem sido cada vez mais investigado, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental.

A condensação de Bose-Einstein é fundamentada essencialmente na natureza ondulatória das partículas. Para compreender o que ocorre, vamos utilizar um argumento simples de Ketterle [7, 8]: considerando um gás de átomos com interação muito fraca, em altas temperaturas ou à temperatura ambiente podemos tratar os átomos como bolas de bilhar que se chocam dentro de um certo volume. À medida que baixamos a temperatura, os átomos podem ser tratados como pacotes de onda com comprimento de onda de Broglie  $\lambda_{dB}$ . À medida que resfriamos o gás, o comprimento de onda de Broglie aumenta. Quando atinge-se a temperatura crítica  $T = T_c$ , o comprimento de onda de Broglie torna-se comparável a distância média entre os átomos, os pacotes de onda se entrelaçam e ocorre a condensação de Bose-Einstein. Resfriando ainda mais o gás, próximo a 0K, os átomos com mais energia escapam da armadilha e ficamos com um condensado puro. Na Fig. 1.1 ilustramos este comportamento.

Para se ter uma idéia de valores típicos, os experimentos realizados que conduziram para os condensados de Bose-Einstein, usando gases alcalinos diluídos [9, 10, 11], possuem temperaturas críticas de condensação entre  $500\text{nK}$  e  $2\mu\text{K}$  e densidades entre  $10^{14}$  e  $10^{15}$  átomos por centímetro cúbico. Na Fig. 1.2 mostramos, por exemplo, como um condensado pode ser identificado, através de um aumento súbito na densidade dos átomos de  $^{87}\text{Rb}$ .

Após a realização experimental dos primeiros condensados atômicos, foram realizadas inúmeras tentativas de obtenção de moléculas ultra frias nos CBE. Em 2002, moléculas ultra frias foram finalmente produzidas num CBE através de ressonância de Feshbach, onde átomos em colisão se ligam para formar um estado ligado molecular durante um curto intervalo de tempo e se separam formando novamente um estado não ligado. Aplicando pulsos magnéticos próximos da ressonância de Feshbach num condensado de  $^{85}\text{Rb}$  [12] uma mistura coerente de átomos e moléculas diatômicas foi obtida no condensado. Estes condensados são conhecidos como condensados de Bose-Einstein atômico-moleculares (CBE-AM). A Fig. 1.3 ilustra, em um contexto geral, a formação de um CBE-AM. Usando a ressonância de Fesh-

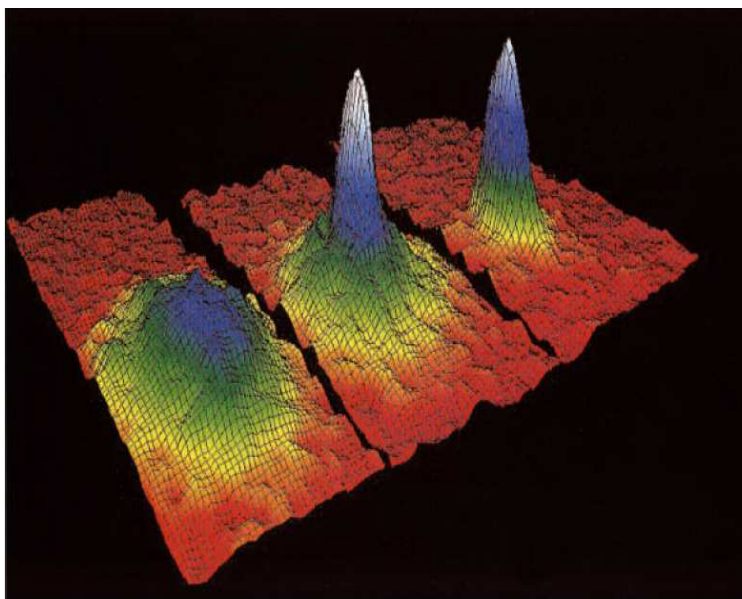




**Fig. 1.1:** 1) Em temperaturas altas ou ambiente podemos tratar os átomos como bolas de bilhar, desprezando a interação entre eles. 2) Em temperaturas baixas a extensão espacial do pacote de onda é da mesma ordem de grandeza de  $\lambda_{dB}$ . 3) Em  $T = T_c$ , a distância média entre os átomos é comparável ao comprimento de onda de de Broglie  $\lambda_{dB} \approx d$ , os pacotes de onda se entrelaçam e ocorre a condensação de Bose-Einstein. 4) Próximo a  $T = 0K$  temos um condensado puro. Figura extraída do artigo do Ketterle et al. [7, 8].

bach foram produzidos CBE-AM a partir de condensados de  $^{133}Cs$ ,  $^{23}Na$ ,  $^{87}Rb$ , [13, 14, 15]. Além disso, CBE-AM também foram obtidos por fotoassociação [17].

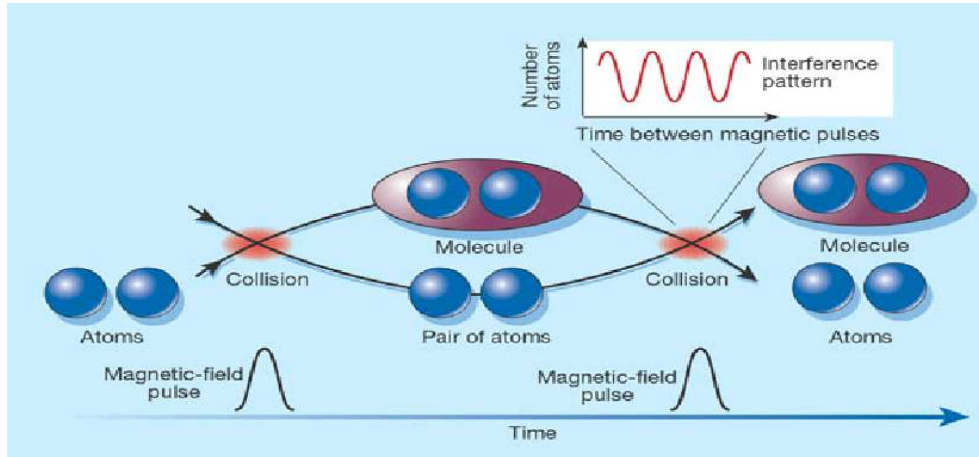
Posteriormente, foram produzidas também moléculas ultra frias hetero-atômicas, isto é, moléculas compostas por dois átomos de espécies diferentes, através de técnicas como fotoassociação utilizando misturas de  $^{39}K$  e  $^{85}Rb$  [17, 18] e ressonância de Feshbach usando misturas de  $^{87}Rb$  e  $^{41}K$  [19, 20]. Moléculas hetero-atômicas têm atraído especial interesse



**Fig. 1.2:** *Observação da formação de um condensado de Bose-Einstein por técnicas de imagem. A figura mostra uma seqüência de imagens da nuvem de  $^{87}\text{Rb}$  se expandindo após a armadilha ser desligada. À esquerda temos a nuvem a uma temperatura  $T \approx 400\text{nK}$ , acima de  $T_c$ . No centro temos a nuvem de átomos a  $T \approx 200\text{nK}$  imediatamente após o condensado ter se formado (identificado por um pico na densidade de átomos). À direita, temos um CBE quase puro a uma temperatura de  $T \approx 50\text{nK}$ . Figura extraída do artigo do Cornell [11].*

pois seu momento de dipolo permanente permite sua manipulação a partir de campos externos, possibilitando maior controle na interação molecular. Tais condensados também despertam interesse pela sua possível aplicação em diversos campos, como na espectroscopia fotoassociativa [21], em estudos de simetria fundamental [22] e até mesmo na computação quântica [23]. Até então, os condensados moleculares investigados eram basicamente do tipo “diatômicos”, tanto homonucleares quanto heteronucleares. Neste contexto, uma questão muito importante que surge é se moléculas ultra frias maiores e mais complexas poderiam ser criadas [24]. Evidências experimentais sobre a existência de estados de Efimov em gases de césio ultra frios [14, 28] forneceram os fundamentos físicos básicos e a inspiração necessária para a busca dos CBE “triatômicos moleculares”. Devido ao desenvolvimento tecnológico muito avançado na área de sistemas ultra frios, estes experimentos são apenas o início do estudo de moléculas triatômicas ultra frias. De fato, experimentos muitos recentes realizados por J. Catani e colaboradores e apresentados em conferência internacional <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Castu Cold Atom Conference realizada em 20-24 de outubro de 2008 no Center for Advanced Study of



**Fig. 1.3:** Formação de moléculas em um CBE usando pulsos magnéticos próximos da ressonância de Feshbach. No primeiro pulso a energia de colisão é modificada pelo campo magnético de forma que a energia de ligação de um estado ligado molecular é atingida, com a formação de uma superposição coerente de átomos e moléculas, (CBE-AM). No segundo pulso a superposição é quebrada e o número de átomos no condensado é medido. Figura extraída do artigo do Zoller [16].

indicam a formação de condensados hetero-triatômico moleculares utilizando compostos do tipo  $KKRb$  e  $KRbRb$  [29].

Do ponto de vista teórico, sistemas atômicos e moleculares ultra frios são caracterizados por grandes flutuações quânticas, o que inviabiliza a utilização de métodos aproximados. Neste sentido, a utilização de modelos exatamente solúveis tem se tornado cada vez mais relevante e é hoje um campo muito ativo de pesquisa [30,31,32,33,34,35,36,37,38]. Espera-se que os modelos exatamente solúveis tenham um impacto significativo na área, fato este que tem sido promovido em [39,40]. Neste cenário, a maior parte dos modelos discutidos trata de CBE diatômicos moleculares e, conseqüentemente, a investigação de modelos integráveis triatômicos moleculares adquire uma importância ainda maior.

Neste trabalho nós vamos analisar um modelo exatamente solúvel que descreve um condensado de Bose-Einstein hetero-triatômico molecular dado por

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

Acima utiliza-se a notação usual do espaço de Fock, onde  $a^\dagger$  e  $b^\dagger$  são operadores de criação

de átomos do tipo  $a$  e  $b$ , respectivamente e  $c^\dagger$  é o operador de criação de uma molécula  $c$ . Assim dois átomos do tipo  $a$  podem se combinar com outro átomo do tipo  $b$  para formar uma molécula triatômica  $c$ . Os parâmetros  $U_{ij}$  são as amplitudes de espalhamento de onda-S que quantificam as interações interatômicas, intermoleculares e também do tipo átomo-molécula,  $\mu_i$  são os potenciais externos,  $\Omega$  é a amplitude de interconversão de átomos em moléculas e vice-versa.

Nesta dissertação vamos fazer um estudo completo e detalhado deste modelo, tanto a nível clássico quanto a nível quântico. O trabalho está organizado da seguinte forma: No capítulo 2 estudamos a integrabilidade e a solução exata do Hamiltoniano que descreve o condensado hetero-triatômico molecular. No capítulo 3 fazemos uma análise clássica do modelo, apresentando o diagrama de parâmetros do modelo com diferentes comportamentos frente as diferenças hetero-atômicas. No capítulo 4 fazemos uma análise quântica do modelo obtendo o valor esperado do operador número de moléculas no estado fundamental e a dinâmica quântica. No capítulo 5 estudamos as transições de fase quânticas deste modelo utilizando os conceitos de gap e fidelidade. No capítulo 6 apresentamos as conclusões. Os resultados obtidos nos capítulos 3, 4 e 5 são originais e constituem a contribuição do autor para a área.

## Capítulo 2

# Modelo

## 2.1 Hamiltoniano

Iremos estudar o modelo geral para o Hamiltoniano que descreve um condensado de Bose-Einstein hetero-triatômico molecular, ou seja, um sistema constituído por duas espécies distintas de átomos, rotulados como átomos do tipo  $a$  e átomos do tipo  $b$ , que podem se combinar para formar uma molécula chamada de molécula  $c$ . Introduzimos os operadores canônicos criação e aniquilação  $\{a^\dagger, b^\dagger, c^\dagger, a, b, c\}$  que obedecem as relações usuais de comutação  $[a, a^\dagger] = I$ , etc, que representam os três graus de liberdade do modelo. O Hamiltoniano que representa este modelo é dado por [25]

$$H = U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{cc}N_c^2 + U_{ab}N_aN_b + U_{ac}N_aN_c + U_{bc}N_bN_c + \mu_aN_a + \mu_bN_b + \mu_cN_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger baa). \quad (2.1)$$

Os parâmetros  $U_{ij}$  são as amplitudes de espalhamento de onda-S que quantificam as interações interatômicas, intermoleculares e também do tipo átomo-molécula,  $\mu_i$ ,  $i = a, b, c$  são os potenciais externos,  $\Omega$  é a amplitude de interconversão de átomos e moléculas e  $N_i$  é o operador número, isto é,  $N_a = a^\dagger a$  é o número de átomos do tipo  $a$ ,  $N_b = b^\dagger b$  é o número de átomos do tipo  $b$  e  $N_c = c^\dagger c$  é o número de moléculas. Para este modelo, o condensado molecular  $c$  é construído de dois átomos do tipo  $a$  e um átomo do tipo  $b$ . O Hamiltoniano atua no espaço de Fock, que é gerado pelos vetores (não normalizados)

$$|N_a; N_b; N_c\rangle = (a^\dagger)^{N_a}(b^\dagger)^{N_b}(c^\dagger)^{N_c}|0\rangle, \quad (2.2)$$

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

O número total de átomos é conservado e pode ser escrito como  $N = N_a + N_b + 3N_c$ . Neste Hamiltoniano temos mais outra grandeza independente conservada

$$J = N_a - 2N_b, \quad (2.3)$$

onde  $J$  é a diferença hetero-atômica entre o número de átomos do tipo  $a$  e  $b$  e a partir deste definiremos  $k = J/N$ , chamada de diferença hetero-atômica normalizada, que terá um papel muito importante neste trabalho. Na próxima seção veremos que este modelo é integrável e como podemos obter este hamiltoniano e sua solução exata através de álgebras específicas.

## 2.2 Integrabilidade

Mostraremos nesta seção que o Hamiltoniano (2.1) é integrável, apresentaremos as equações do ansatz de Bethe e os autovalores de energia do modelo. Começamos definindo a matriz

$R$  com invariância  $SU(2)$

$$R(u) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(u) & c(u) & 0 \\ 0 & c(u) & b(u) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

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

Acima,  $u$  é o parâmetro espectral e  $\eta$  é um parâmetro arbitrário, a ser escolhido posteriormente. É fácil verificar que a matriz  $R$  (2.4) satisfaz a equação de Yang-Baxter

$$R_{12}(u - v)R_{13}(u)R_{23}(v) = R_{23}(v)R_{13}(u)R_{12}(u - v). \quad (2.5)$$

Iremos utilizar a notação usual onde, por exemplo  $R_{jk}(u)$  denota a matriz  $R$  agindo não trivialmente sobre o  $j$ -ésimo e  $k$ -ésimo espaços e como identidade nos espaços restantes. Maiores esclarecimentos sobre a notação podem ser encontrados em [26, 27].

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

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

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

$$R_{12}(u - v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u - v) \quad (2.7)$$

Com isso em mente escolhemos a seguinte representação para a matriz de monodromia [25]

$$L(u) = \pi(T(u)) = u^- G L^S(u^-) L^K(u^+), \quad (2.8)$$

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

$$L^S(u) = \frac{1}{u} \begin{pmatrix} u - \eta S^z & -\eta S^+ \\ -\eta S^- & u + \eta S^z \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

$$L^K(u) = \begin{pmatrix} u + \eta K^z & \eta K^- \\ -\eta K^+ & u - \eta K^z \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

onde utilizamos a álgebra de Lie  $SU(2)$  com os geradores  $S^z$  e  $S^\pm$  que obedecem às relações de comutação

$$[S^z, S^\pm] = \pm S^\pm, \quad [S^+, S^-] = 2S^z, \quad (2.11)$$

e utilizamos também a álgebra de Lie  $SU(1, 1)$  com os geradores  $K^z$  e  $K^\pm$  que obedecem às relações de comutação

$$[K^z, K^\pm] = \pm K^\pm, \quad [K^+, K^-] = -2K^z. \quad (2.12)$$

Agora, utilizando as relações abaixo para as álgebras  $SU(2)$  e  $SU(1, 1)$

$$\begin{aligned} S^+ &= b^\dagger c, & S^- &= c^\dagger b, & S^z &= \frac{N_b - N_c}{2}, \\ K^+ &= \frac{(a^\dagger)^2}{2}, & K^- &= \frac{(a)^2}{2}, & K^z &= \frac{2N_a + 1}{4}. \end{aligned}$$

Vamos mostrar como construir o Hamiltoniano (2.1). Explicitamente, temos para o operador  $L(u)$

$$L(u) = \begin{pmatrix} (u - \omega - \eta S^z)(u + \omega + \eta K^z) + \eta^2 S^+ K^+ & \eta K^-(u - \omega - \eta S^z) - \eta S^+(u + \omega - \eta K^z) \\ \eta S^-(u + \omega + \eta K^z) - \eta K^+(-u + \omega - \eta S^z) & (u + \omega - \eta K^z)(-u + \omega - \eta S^z) + \eta^2 S^- K^- \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

que satisfaz a relação

$$R_{12}(u - v)L_1(u)L_2(v) = L_2(v)L_1(u)R_{12}(u - v). \quad (2.14)$$

Assim, podemos checar que a álgebra de Yang-Baxter (2.7) para matriz de monodromia  $T$  também é satisfeita. Desta forma podemos então definir a matriz de transferência da forma usual como

$$t(u) = \text{tr} \pi(T(u)) = \pi(A(u) + D(u)), \quad (2.15)$$

Pode-se mostrar a partir da relação (2.7) que a matriz de transferência comuta para diferentes valores do parâmetro espectral, isto é,

$$[t(u), t(v)] = 0, \quad \forall u, v. \quad (2.16)$$

o que significa que o modelo é integrável.



Além disso, pode-se obter diretamente da matriz de transferência (2.15), o Hamiltoniano (2.1) através da relação

$$H = t(0) + \frac{1}{2}\omega\eta + \alpha I^2 + \beta J^2 + \gamma IJ \quad (2.17)$$

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

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

Portanto, devido a existência da equação (2.17), se resolvermos o problema de autovalores da matriz de transferência (2.15), saberemos como diagonalizar o Hamiltoniano (2.1). Para isto, vamos aplicar o método algébrico do ansatz de Bethe (para maiores detalhes ver Apêndice B) para então obtermos as equações do ansatz de Bethe (EAB)

$$-\frac{(v_i - \omega - \eta s_z)(v_i + \omega + \eta k)}{(v_i - \omega + \eta s_z)(v_i + \omega - \eta k)} = \prod_{i \neq j}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad i, j = 1, \dots, M, \quad (2.18)$$

e também as energias do Hamiltoniano (2.1) [25]

$$\begin{aligned} E &= (\omega - \eta s_z)(\omega - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{v_i + \eta}{v_i} \\ &\quad - (\omega + \eta s_z)(\omega + \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{v_i - \eta}{v_i} \\ &\quad + \frac{1}{2}\omega\eta + \alpha I^2 + \beta J^2 + \gamma IJ. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Acima, cada conjunto  $\{v_i, i = 1 \dots M\}$ , solução das EAB, parametriza um autovetor da matriz de transferência e, conseqüentemente do Hamiltoniano (2.1) com energia dada pela equação (2.19).

Capítulo 3

# Análise Clássica

Neste capítulo vamos fazer uma análise clássica do modelo (2.1) para condensados de Bose-Einstein hetero-triatômico moleculares. Em particular, estudaremos os pontos fixos do Hamiltoniano e suas respectivas curvas de nível. Consideremos agora  $N_j, \theta_j, j = a, b, c$  como sendo variáveis quânticas satisfazendo as seguintes relações canônicas

$$[\theta_j, \theta_k] = [N_j, N_k] = 0, \quad [N_j, \theta_k] = i\delta_{jk}I.$$

Fazemos então a seguinte mudança de variáveis a partir dos operadores  $\{j, j^\dagger | j = a, b, c\}$  para uma representação número-fase utilizando

$$j = \exp(i\theta_j)\sqrt{N_j} \quad j = a, b, c$$

de tal forma que as relações de comutação canônicas mantém-se preservadas. Fazemos agora uma outra troca de variáveis

$$z = \frac{1}{N}(N_a + N_b - 3N_c)$$

$$\theta = \frac{N}{6}(2\theta_a + \theta_b - \theta_c)$$

sendo que  $z$  e  $\theta$  são variáveis canonicamente conjugadas; i.e.,

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

Acima  $z$  é a diferença normalizada entre o número de átomos e o número de moléculas, sendo assim  $z \in [-1, 1]$ .

No limite clássico onde  $N$  é muito grande, mas ainda finito, podemos considerar o Hamiltoniano (reescalonado)

$$H = \frac{4\Omega N^2}{36}[\lambda z^2 + 2(\alpha - \lambda)z + \beta + (z + c_+)\sqrt{(z + c_-)(1 - z)} \cos(\frac{6\theta}{N})] \quad (3.1)$$

onde

$$\lambda = \Delta(4U_{aa} + U_{bb} + U_{cc} + 2U_{ab} - 2U_{ac} - U_{bc})$$

$$\alpha = \Delta[4(c_+ + 1)U_{aa} + (c_- + 1)U_{bb} + (c_+ + c_- + 2)U_{ab} - (1 + c_+)U_{ac} - (1 + c_-)\frac{U_{bc}}{2} + \frac{3}{N}(2\mu_a + \mu_b - \mu_c)]$$

$$\beta = \Delta[4U_{aa}c_+^2 + U_{bb}c_-^2 + U_{cc} + 2U_{ab}c_+c_- + 2U_{ac}c_+ + U_{bc}c_- + \frac{6}{N}(2\mu_a c_+ + \mu_b c_- + \mu_c)]$$

com

$$c_- = 1 - 2k, \quad c_+ = 1 + k, \quad \Delta = \frac{1}{4\Omega},$$

$$k = \frac{J}{N}, \quad k \in [-2, 1].$$

Como  $N$  e  $k$  são conservados, os trataremos como constantes. Um procedimento semelhante a este foi adotado em [41, 42] para os modelos de condensados acoplados por tunelamento Josephson e o modelo homo-atômico molecular.

Nós agora vamos considerar (3.1) como um Hamiltoniano clássico e investigar os pontos fixos do sistema. O primeiro passo é derivar as equações de movimento a partir do Hamiltoniano, que são dadas por

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \theta} = -\frac{4\Omega N}{6}(z + c_+)\sqrt{(z + c_-)(1 - z)} \sin\left(\frac{6\theta}{N}\right), \\ \frac{d\theta}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial z} = \frac{4\Omega N^2}{36}[2\lambda z + 2(\alpha - \lambda) \\ &+ \frac{2(z + c_-)(1 - z) + (z + c_+)(1 - z) - (z + c_+)(z + c_-)}{2\sqrt{(z + c_-)(1 - z)}} \cos\left(\frac{6\theta}{N}\right)]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Os pontos fixos do sistema são determinados pela condição

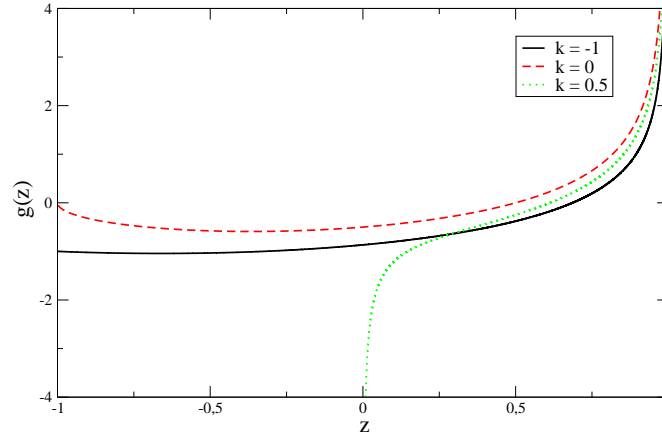
$$\frac{\partial H}{\partial \theta} = \frac{\partial H}{\partial z} = 0. \quad (3.3)$$

Devido a periodicidade das soluções, restringimos nossa análise ao intervalo  $\theta \in [0, N\pi/3)$ . Acima zerando a primeira equação de (3.2) utilizando  $\theta = 0$ , obtém-se da segunda equação de (3.2) duas funções, convenientemente definidas por:

$$f(z) = \lambda z + \alpha - \lambda, \quad (3.4)$$

$$g(z) = -\frac{2(1 - z)(z + c_-) + (1 - z)(z + c_+) - (z + c_+)(z + c_-)}{4\sqrt{(1 - z)(z + c_+)}}. \quad (3.5)$$

Note que o domínio de  $g(z)$  é  $z \in [-1, 1)$ , quando  $k \in [-2, 0]$  e  $z \in (2k - 1, 1)$  quando  $k \in (0, 1)$ . Podemos verificar que a diferença hetero-atômica normalizada  $k$  tem um papel importante no comportamento da função  $g(z)$ . Para  $k \leq 0$ ,  $g(z)$  é divergente somente em  $z = 1$ , enquanto que para o caso de  $k > 0$ ,  $g(z)$  diverge em  $z = 2k - 1$  e  $z = 1$ . Uma vez que  $k$  afeta o domínio e a forma da função  $g(z)$ , esta propriedade afeta os tipos de soluções de (3.3). Na Fig. 3.1 nós ilustramos o comportamento da função  $g(z)$  para diferentes valores de  $k$ . Isto faz com que seja necessário tratar os três casos de  $k < 0$ ,  $k = 0$  e  $k > 0$  separadamente.



**Fig. 3.1:** O comportamento da função  $g(z)$  para três valores diferentes de  $k$ .

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

Aqui o domínio da função  $g(z)$  é  $z \in [-1, 1)$  e  $g(z)$  diverge em  $z = 1$ , mas é finita em  $z = -1$ . Isto nos leva a seguinte classificação das soluções de (3.3):

- $\theta = 0$  e  $z$  é solução de

$$f(z) = g(z), \tag{3.6}$$

que pode admitir zero, uma ou duas soluções.

Na Fig 3.2 apresentamos um exemplo de solução gráfica da equação (3.6), ilustrando as possíveis soluções.

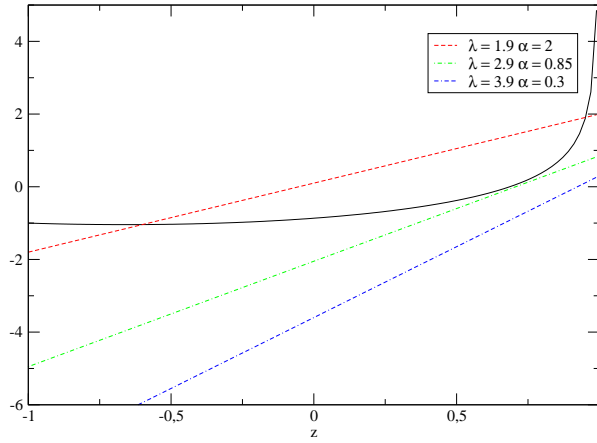
- $\theta = N\pi/6$  e  $z$  é solução de

$$f(z) = -g(z), \tag{3.7}$$

que pode admitir zero, uma ou duas soluções.

- $z = -c_+$ , que anula a primeira equação de (3.2) e reduz a segunda equação de (3.2) para a expressão

$$-2\lambda(c_+ + 1) + 2\alpha = -\frac{(-c_+ + c_-)(1 + c_+)}{\sqrt{(1 + c_+)(-c_+ + c_-)}} \cos\left(\frac{6\theta}{N}\right), \tag{3.8}$$



**Fig. 3.2:** Solução gráfica da equação transcendental (3.6). A intersecção entre a reta (lado esquerdo da eq. (3.6)) e a curva (lado direito da eq. (3.6)) para diferentes valores de  $\lambda$  e  $\alpha$  representa a solução para cada caso.

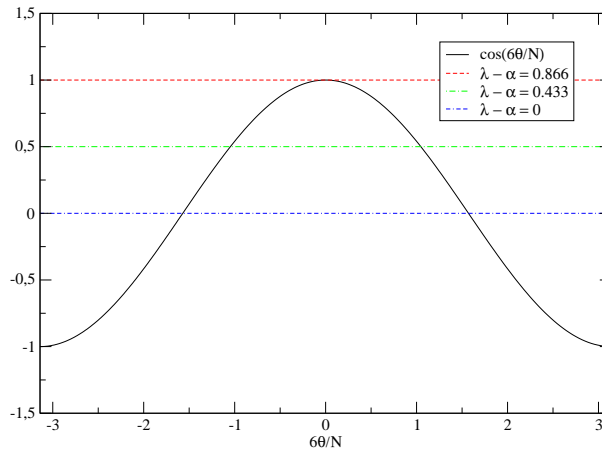
substituindo os valores de  $c_+$  e  $c_-$  em termos da diferença hetero-atômica normalizada  $k$  na eq. (3.8) e isolando  $\lambda$  obtivemos

$$\lambda = \frac{\alpha}{k+2} + \frac{\sqrt{-3k(k+2)}}{2(k+2)} \cos\left(\frac{6\theta}{N}\right), \quad (3.9)$$

sendo que  $\theta$  é solução de

$$\cos\left(\frac{6\theta}{N}\right) = -\frac{2\sqrt{-3k(k+2)}}{3k} \left( \lambda - \frac{\alpha}{k+2} \right). \quad (3.10)$$

para a qual existem duas soluções para  $\left| \frac{2\sqrt{-3k(k+2)}}{3k} \left( \lambda - \frac{\alpha}{k+2} \right) \right| < 1$  e uma solução em  $(z = -c_+, \theta = 0)$ , conforme ilustramos na Fig. 3.3



**Fig. 3.3:** Solução gráfica da equação transcendental (3.10). A intersecção da reta (lado direito da eq. (3.10)) com a curva (lado esquerdo da eq. (3.10)) para diferentes valores de  $\lambda$  e  $\alpha$  representa a solução para cada caso. Utilizamos  $k = -1$ .

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

Agora nós vamos considerar o caso  $k = 0$ , onde o domínio de  $g(z)$  é  $z \in (-1, 1)$  e  $g(z)$  diverge em  $z = 1$ , mas é finita em  $z = -1$ , similar ao caso anterior. Isto nos leva a seguinte classificação para o problema geral:

- $\theta = 0$  e  $z$  é solução de

$$f(z) = g(z) \tag{3.11}$$

que pode admitir zero, uma ou duas soluções, conforme ilustramos na Fig. 3.4

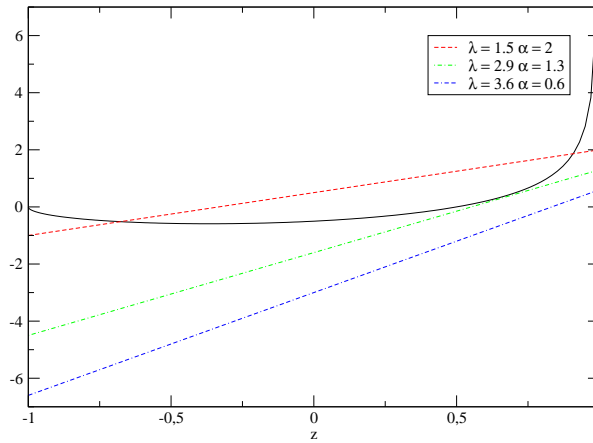
- $\theta = N\pi/6$  e  $z$  é uma solução de

$$f(z) = -g(z) \tag{3.12}$$

que pode admitir zero, uma ou duas soluções.

- $z = -1$ , que anula a primeira equação de (3.2) e reduz a segunda equação de (3.2) para a seguinte equação linear entre os parâmetros de acoplamento

$$\lambda = \frac{\alpha}{2}, \tag{3.13}$$



**Fig. 3.4:** Solução gráfica da equação transcendental (3.11). A intersecção entre a reta (lado esquerdo da eq. (3.11)) e a curva (lado direito da eq. (3.11)) para diferentes valores de  $\lambda$  e  $\alpha$  representa a solução para cada caso.

que pode admitir somente uma solução. Este resultado é compatível com aquele obtido no caso anterior, onde podemos fazer o limite  $k \rightarrow 0$  na equação (3.9)

### 3.3 Caso Positivo: $0 < k \leq 1$

Neste caso o domínio de  $g(z)$  é  $z \in (2k-1, 1)$  e  $g(z)$  diverge em ambos extremos do intervalo,  $z = 2k - 1$  e  $z = 1$ . Agora, um cenário diferente emerge, comparado com os dois casos anteriores. Isto nos leva a seguinte caracterização geral do problema:

- $\theta = 0$  e  $z$  é solução de

$$f(z) = g(z) \tag{3.14}$$

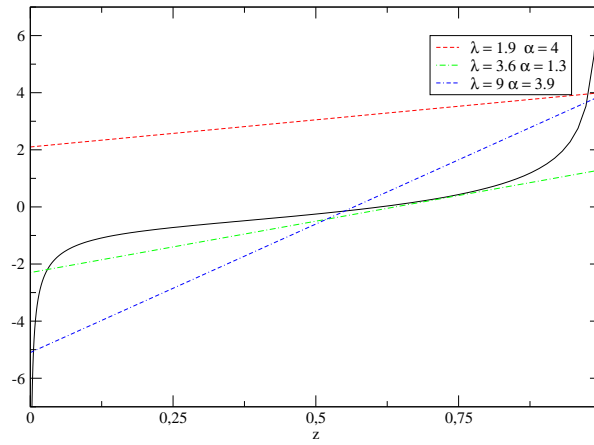
que pode admitir uma, duas ou três soluções, conforme ilustramos na Fig. (3.5)

- $\theta = N\pi/6$  e  $z$  é solução de

$$f(z) = -g(z) \tag{3.15}$$

que pode admitir uma, duas ou três soluções.





**Fig. 3.5:** Solução gráfica da equação transcendental (3.14). A intersecção entre a reta (lado esquerdo da eq. (3.14)) e a curva (lado direito da eq. (3.14)) para diferentes valores de  $\lambda$  e  $\alpha$  representa a solução para cada caso.

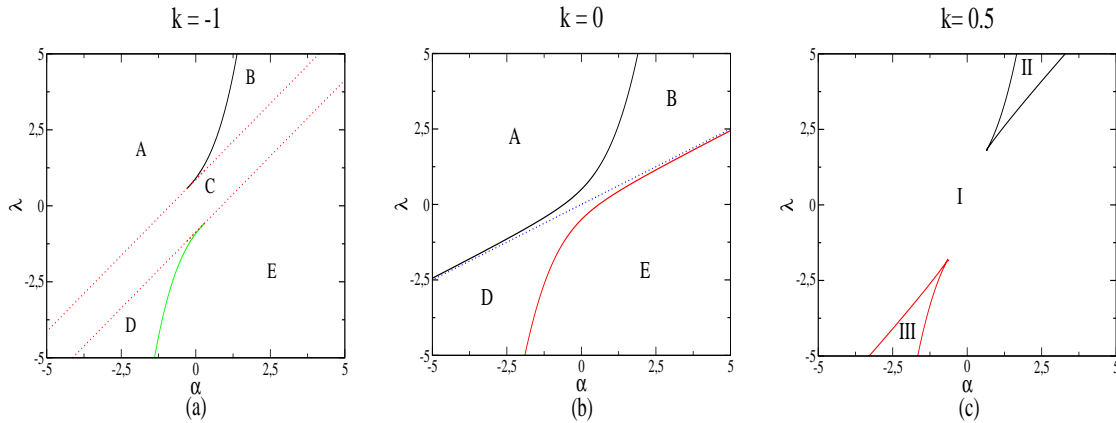
### 3.4 Diagrama de Parâmetros e curvas de nível

Nós podemos coletar todos os tipos diferentes de soluções da eq. (3.3) em um diagrama de parâmetros, dividindo o espaço de parâmetros em diferentes regiões, para cada caso de  $k$  discutido acima. Por exemplo, para o caso de  $k$  positivo, para construir este diagrama, nós observamos que as fronteiras entre regiões ocorre quando  $f$  é a linha tangente à  $\pm g$ ; isto é, para valores de  $\lambda$  e  $\alpha$  tais que

$$\begin{aligned} \lambda &= \pm \frac{dg}{dz} \Big|_{z_0}, \\ f(z_0) &= \pm g(z_0). \end{aligned}$$

para algum  $z_0$ . Este procedimento determina as fronteiras no espaço de parâmetros, que são mostradas na Fig. 3.6(c) para  $k = 0.5$ .

Como no caso de  $k$  positivo, nós podemos determinar as fronteiras no espaço de parâmetros para os outros dois casos. Todavia, por causa da existência das soluções dadas por (3.9,3.13), que não tem uma análoga para o caso de  $k$  positivo, nós observamos o aparecimento de novas fronteiras dadas pelas condições  $\lambda = (\alpha \mp g(-k - 1))/(k + 2)$  para  $k$  negativo e  $\lambda = \alpha/2$  para  $k = 0$ . As fronteiras no espaço de parâmetro são ilustradas na Fig. 3.6(a) e Fig. 3.6(b) para  $k = -1$  e  $k = 0$ , respectivamente. Note que as fronteiras adicionais, que delimitam a região



**Fig. 3.6:** Diagramas de parâmetros identificando os tipos diferentes de soluções para eq.(3.3) para diferentes valores de  $k = -1; 0; 0.5$ . Nós observamos: (a) cinco regiões distintas para o caso  $k$  negativo; (b) quatro regiões distintas para  $k = 0$ ; (c) três regiões distintas para o caso  $k$  positivo. Em (a) as fronteiras adicionais são dadas por  $\lambda = (\alpha \mp g(-k - 1))/(k + 2)$  enquanto em (b) a fronteira adicional é dada por  $\lambda = \alpha/2$ .

C, para  $k = -1$  são reduzidas a uma única fronteira para  $k = 0$ , qual não esta presente para  $k = 0.5$ . Assim, nós temos um cenário diferente para os diagramas de parâmetros, dependendo se a diferença hetero-atômica normalizada  $k$  é negativa, zero ou positiva, como ilustrado na Fig. 3.6. Basicamente, nós podemos resumir o comportamento típico dos diagramas de parâmetros da seguinte forma: quando  $k$  é negativo, o diagrama de parâmetros é dividido em 5 regiões: na região A não existe solução para  $z$  quando  $\theta = 0$  e existe uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$ . Na região B existem duas soluções para  $z$  quando  $\theta = 0$  e uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$ . Na região C existe uma solução para  $z$  quando  $\theta = 0$ , uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$  e duas soluções para  $\theta$  quando  $z = -k - 1$ . Na região D existe uma solução para  $z$  quando  $\theta = 0$  e duas soluções para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$ . Na região E existe uma solução para  $z$  quando  $\theta = 0$  e nenhuma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$ . Para o caso de  $k = 0$ , a região C desaparece e o diagrama de parâmetros fica com quatro regiões A, B, D, E discutidas anteriormente. Quando  $k$  é positivo o diagrama é dividido em três regiões: na região I existe uma solução para  $z$  quando  $\theta = 0$  e uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$ . Na região II existem três soluções para  $z$  quando  $\theta = 0$  e uma solução para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$ . Na região III existe uma solução para  $z$  quando  $\theta = 0$  e três soluções para  $z$  quando  $\theta = N\pi/6$ .

Para ajudar a visualizar a dinâmica clássica, é útil plotarmos as curvas de nível do Hamiltoniano (3.1). Uma vez que os pontos fixos do sistema mudam a topologia das curvas de

nível, mudanças qualitativas podem ser observadas entre as diferentes regiões. Os resultados são mostrados na Fig. 3.7 para  $k = -1$  (à esquerda),  $k = 0$  (no meio) e  $k = 0.5$  (à direita). Por uma questão de clareza, nós vamos usar intervalos convenientes para  $\theta$  e  $z$ .

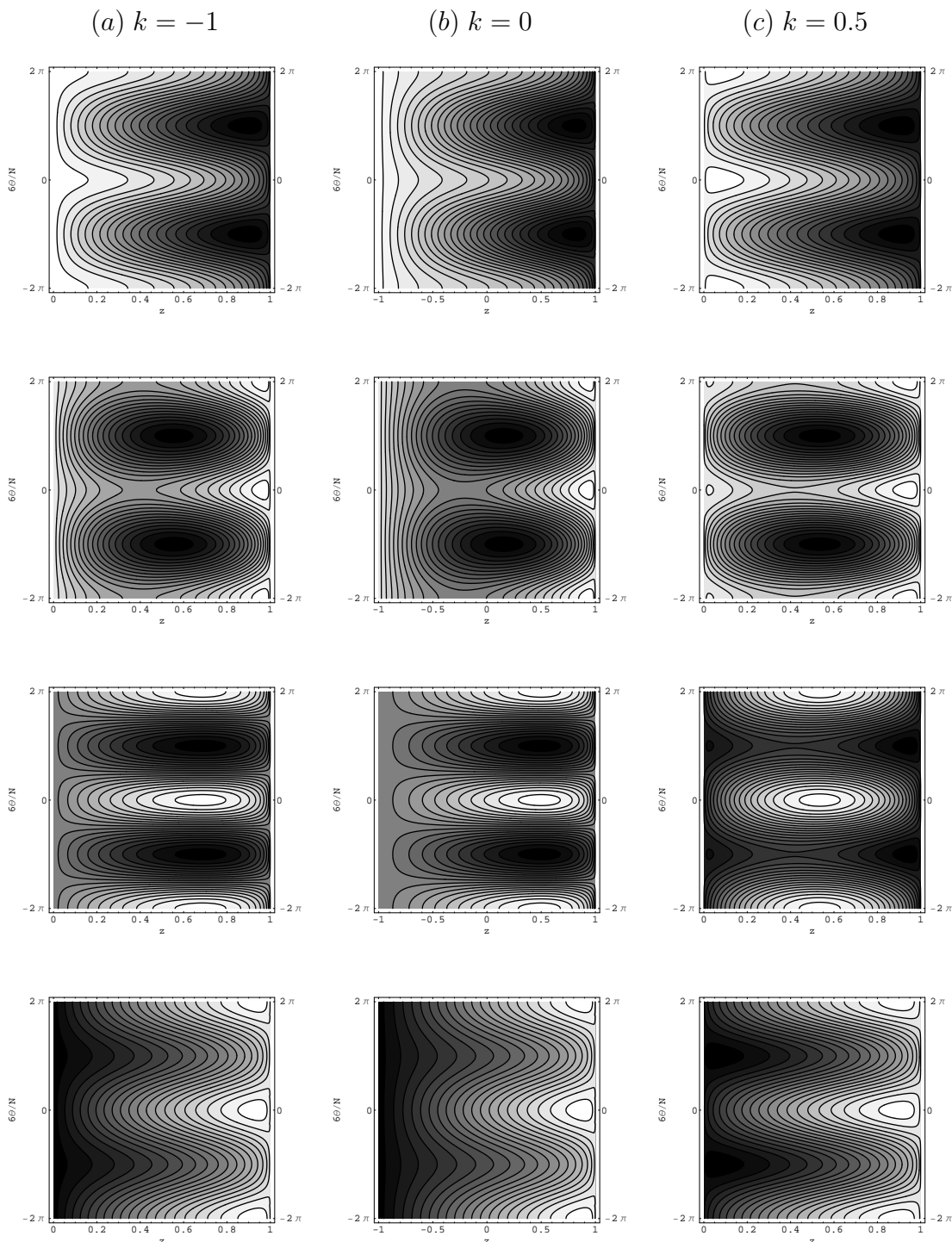
Na Fig. 3.7(a) nós mostramos as curvas de nível do Hamiltoniano (3.1) para  $k = -1$ , ilustrando o comportamento típico das regiões A, B, C e E (de cima para baixo). Na região A existem mínimos locais em  $6\theta/N = \pm\pi$ . Além dos mínimos em  $6\theta/N = \pm\pi$ , dois pontos fixos adicionais (um máximo e um ponto de sela) podem ser vistos na região B ocorrendo em  $\theta = 0$ . Na região C existem mínimos em  $6\theta/N = \pm\pi$  e para  $\theta = 0$  somente um ponto fixo, um máximo. Na região E somente um ponto fixo, um máximo, ocorre para  $\theta = 0$ .

Na Fig. 3.7(b) nós mostramos as curvas de nível para  $k = 0$  para as mesmas regiões ilustradas no caso anterior, exceto que agora no lugar da região C existe somente uma linha reta separando as regiões B e D. O comportamento aqui é análogo ao caso anterior de  $k$  negativo, com o surgimento de um máximo(mínimo) quando passamos da região A para B (E para C).

Na Fig. 3.7(c) nós apresentamos as curvas de nível do Hamiltoniano (3.1) para  $k = 0.5$ , ilustrando o comportamento típico das regiões I, II, III e I (de cima para baixo). Na região I existe um ponto de máximo em  $\theta = 0$  e um mínimo em  $6\theta/N = \pm\pi$ . Dois pontos fixos adicionais, um ponto de sela e um máximo ocorrem, na região II em  $\theta = 0$ , enquanto que dois pontos fixos adicionais, um ponto de sela e um mínimo, ocorrem na região III em  $6\theta/N = \pm\pi$ , comparado com a região I.

Nós observamos que o padrão das curvas de nível é distinto para os casos de  $k$  negativo e zero se comparados ao caso de  $k$  positivo.

No próximo capítulo faremos uma análise quântica do Hamiltoniano (2.1). Vamos deter nossa atenção no caso onde  $\lambda = 0$ , desta forma o modelo possui um único parâmetro efetivo de acoplamento  $\alpha$ . Da Fig. 3.6, pode-se verificar que neste caso não existem bifurcações quando a diferença hetero-atômica normalizada é maior que zero ( $k > 0$ ), com bifurcações ocorrendo em  $\alpha = \pm 0.5$  e  $0$  quando a diferença hetero-atômica normalizada é zero ( $k = 0$ ) e em  $\alpha = \pm 0.86$  quando  $k = -1$ . Em particular mostraremos que o ponto de bifurcação que ocorre em  $(\alpha, \lambda) = (0.5, 0)$ , quando  $k = 0$  e  $(\alpha, \lambda) = (0.86, 0)$ , quando  $k = -1$ , afeta as propriedades do estado fundamental do sistema quântico.



**Fig. 3.7:** *Curvas de nível para o Hamiltoniano (2.1). Aqui nós estamos usando para: (a)  $k = -1$  à esquerda  $(\lambda, \alpha) = (0, -1.0), (5, 2.5), (0, 0)$  e  $(0, 1.5)$ ; (b)  $k = 0$  no meio  $(\lambda, \alpha) = (0, -1), (2.5, 2.5), (0, 0)$  e  $(0, 1.5)$ ; (c)  $k = 0.5$  à direita  $(\lambda, \alpha) = (0, -1.5), (5, 2.5), (-5, -2.5)$  e  $(0, 1.5)$ .*

Capítulo 4

# Análise Quântica

Neste capítulo faremos uma análise quântica do modelo, através de métodos diferentes como a dinâmica quântica e o valor esperado. Nosso principal objetivo é compreender a natureza do estado fundamental. Utilizaremos os resultados obtidos na análise clássica, em particular os pontos de bifurcação do sistema, de forma a nos orientar no estudo do comportamento quântico do modelo e comparar diferentes regimes e suas características no processo dinâmico. Com estas abordagens guiadas pela análise clássica concluiremos um apanhado capaz de gerar um maior entendimento do modelo AABC. Em particular vamos analisar o Hamiltoniano no *limite sem espalhamento* onde  $U_{ij} = 0$  para todo  $i, j = a, b, c$ .

$$H = \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a a). \quad (4.1)$$

Apesar deste limite simplificar substancialmente o Hamiltoniano, este ainda permanece suficientemente interessante e não trivial, permitindo uma boa compreensão do comportamento quântico através da dinâmica quântica, valor esperado do número de moléculas no estado fundamental e, como veremos no próximo capítulo, gap e fidelidade. O *limite sem espalhamento* corresponde a escolher o acoplamento  $\lambda = 0$  na análise clássica do capítulo anterior. Neste caso, podemos verificar nos diagramas de parâmetros das Fig. 3.6 que existem duas bifurcações quando  $k$  é negativo e três bifurcações quando  $k = 0$ . Para o caso de  $k$  negativo, uma ocorre em  $(\alpha, \lambda) = (-g(-k-1), 0)$ , correspondendo a uma bifurcação de um mínimo global do Hamiltoniano, enquanto que a outra ocorre em  $(\alpha, \lambda) = (g(-k-1), 0)$ , correspondendo a uma bifurcação de um máximo global, como pode ser checado nas curvas de nível apresentadas. Para o exemplo específico de  $k = -1$ , estes pontos de bifurcação ocorrem em  $(\alpha, \lambda) = (0.86, 0)$  e  $(\alpha, \lambda) = (-0.86, 0)$ . Para o caso  $k = 0$ , existem três bifurcações que ocorrem em  $(\alpha, \lambda) = (-0.5, 0), (0, 0), (0.5, 0)$ . O caso  $(\alpha, \lambda) = (-0.5, 0)$  corresponde a uma bifurcação de um máximo global,  $(\alpha, \lambda) = (0.5, 0)$  corresponde a uma bifurcação de um mínimo global, enquanto que  $(\alpha, \lambda) = (0, 0)$  corresponde a uma bifurcação de ponto de sela. É importante salientar que não existem bifurcações ao longo da linha  $\lambda = 0$  para o caso de  $k$  positivo. Nós estamos particularmente interessados no acoplamento  $(\alpha, \lambda) = (0.86, 0)$  para  $k = -1$  e  $(\alpha, \lambda) = (0.5, 0)$  para  $k = 0$ , uma vez que nestes casos a bifurcação dos pontos fixos no espaço de fase é associada ao estado fundamental do sistema quântico.

## 4.1 Dinâmica Quântica

Nesta seção examinaremos a dinâmica quântica do Hamiltoniano (4.1), comparando a dinâmica do sistema em diferentes regiões do espaço de parâmetros da Fig. 3.6 e das fronteiras adicionais que surgem quando a diferença hetero-atômica normalizada  $k$  é negativa

ou zero.

Em geral a evolução temporal de qualquer estado é dada por

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\phi\rangle, \quad (4.2)$$

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

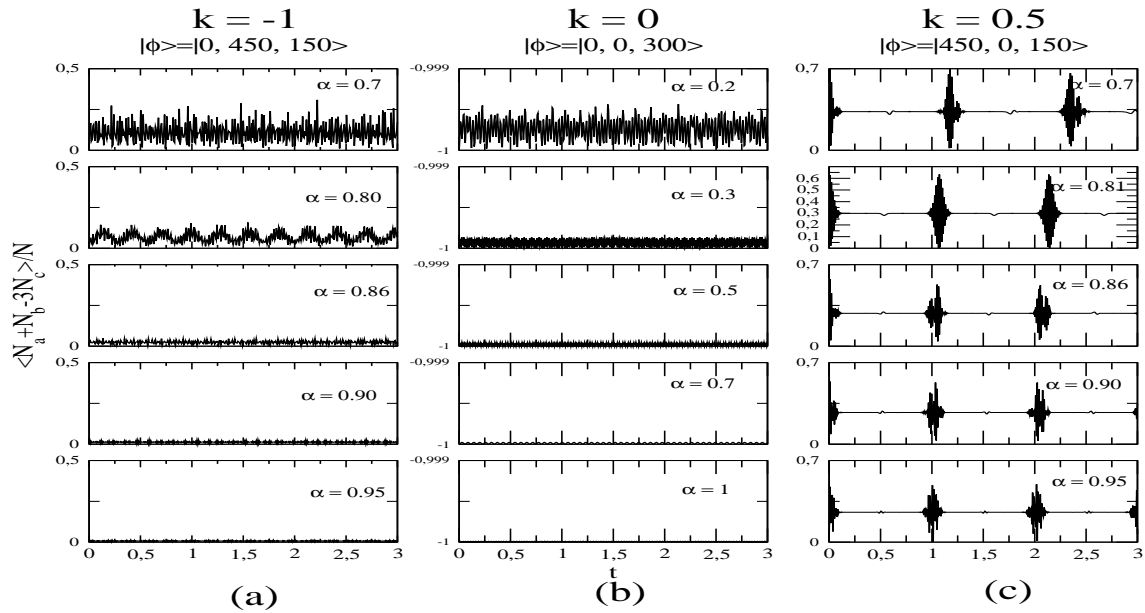
$$U(t) = \sum_{m=0}^M |m\rangle\langle m| \exp(-iE_m t), \quad (4.3)$$

$|m\rangle$  é um auto-estado com energia  $E_m$  e  $|\phi\rangle$  representa o estado inicial com  $N = N_a + N_b + 3N_c$ . Nós adotamos o método de diagonalização direta do Hamiltoniano (4.1) para computar o valor esperado de  $z(t)$  através de

$$\langle z(t) \rangle = \frac{1}{N} \langle \Psi(t) | N_a + N_b - 3N_c | \Psi(t) \rangle. \quad (4.4)$$

Para realizar esse cálculo, precisamos encontrar uma representação matricial do Hamiltoniano (4.1), cujos detalhes técnicos se encontram no Apêndice A.

Em nossa análise, fixamos o número total de átomos  $N$  e a diferença hetero-atômica  $J$ . Nós iremos usar como estado inicial  $|0, -J/2, (2N + J)/6\rangle$  para o caso onde  $k$  é negativo e zero e  $|J, 0, (N - J)/3\rangle$  para o caso onde  $k$  é positivo. Resultados para a dinâmica do valor esperado para  $z$  são mostrados na Fig. 4.1 para os casos de  $k = -1, 0$  e  $0.5$ . Nós estamos usando  $N = 900$  e  $J = -900; 0; 450$  para  $k = -1; 0; 0.5$ , respectivamente. Nós fixamos o parâmetro  $\Omega = 1$  e usamos  $\mu_a$  como o parâmetro de acoplamento variável. Em termos das variáveis clássicas, isto corresponde a variar o parâmetro  $\alpha$  no Hamiltoniano clássico (3.1). Podemos observar diferenças qualitativas. No caso de  $k = -1$ , Fig. 4.1(a), nós encontramos que para  $\alpha < 0.86$  existem oscilações irregulares em  $z$ , similares ao comportamento ocorrido para  $\alpha < 0.5$  para  $k = 0$ , Fig. 4.1(b). Quando aumentamos o parâmetro de acoplamento  $\alpha$  em direção ao valor de transição  $\alpha = 0.86$ , para  $k = -1$  e  $\alpha = 0.5$  para  $k = 0$ , ocorre uma transição para oscilações localizadas, bastante pronunciada nos casos (a) e (b). Por outro lado, a dinâmica para o caso de  $k = 0.5$ , Fig. 4.1(c), é totalmente diferente, exibindo um comportamento do tipo colapso e ressurgimento, sem mudanças abruptas na amplitude de  $z$ .

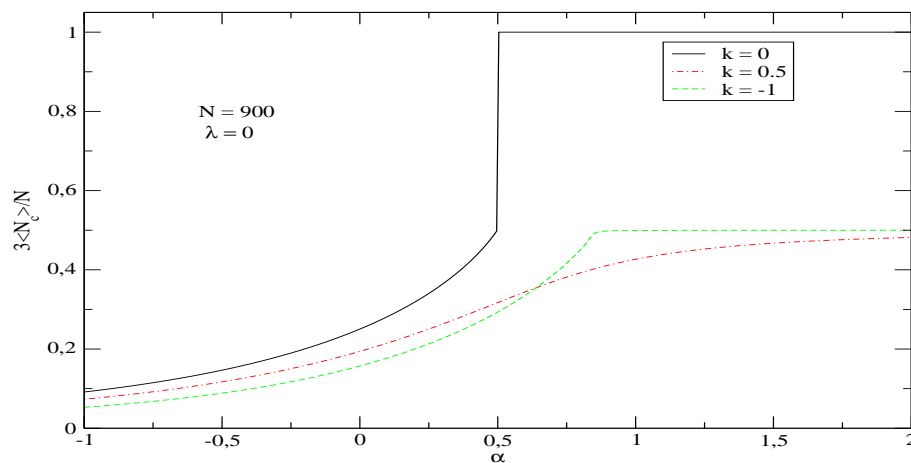


**Fig. 4.1:** Evolução temporal do valor esperado de  $z$  para o Hamiltoniano (4.1) com  $N = 900$ , para (a)  $k = -1$  e estado inicial  $|0, 450, 150\rangle$ . As oscilações são irregulares, apresentando um decréscimo significativo da amplitude ao passar por  $\alpha = 0.86$ . Este ponto corresponde à fronteira  $(\alpha, \lambda) = (0.86, 0)$  entre as regiões C e E, como mostrado na Fig. 3.6(a); (b)  $k = 0$  e estado inicial  $|0, 0, 300\rangle$ . Um comportamento similar ocorre ao cruzarmos o ponto  $\alpha = 0.5$ . Este ponto corresponde a fronteira  $(\alpha, \lambda) = (0.5, 0)$ , como mostrado na Fig 3.6(b); (c)  $k = 0.5$  com estado inicial  $|450, 0, 150\rangle$ . As oscilações apresentam um comportamento do tipo “colapso e ressurgimento”, com diminuição muito lenta da amplitude. Neste caso não se observa um comportamento abrupto, indicativo do fato que não existe fronteira em  $\lambda = 0$ , conforme a Fig. 3.6(c).



## 4.2 Valores esperados

Agora usando a equação (4.4), nós computamos o valor esperado normalizado do operador número de moléculas no estado fundamental  $3\langle N_c \rangle / N$  para o sistema quântico como função do parâmetro  $\alpha$  os resultados são mostrados na Fig. 4.2.



**Fig. 4.2:** Valor esperado do operador número de moléculas  $\langle N_c \rangle$  versus o parâmetro de acoplamento  $\alpha$  para os três casos  $k = -1, 0$  e  $0,5$ . Aqui nós estamos usando  $\Omega = 1$  e  $N = 900$ . Para os casos  $k = -1$  e  $k = 0$  existe uma mudança abrupta no valor esperado  $3\langle N_c \rangle / N$  no limiar do parâmetro  $\alpha = 0.86$  (para  $k = -1$ ) e  $\alpha = 0.5$  (para  $k = 0$ ). Entretanto, para  $k = 0$ , o valor esperado  $3\langle N_c \rangle / N$  aumenta lentamente com  $\alpha$ , não existindo nenhum comportamento abrupto.

Em linhas gerais, estes resultados concordam com os resultados da análise clássica. Quando o acoplamento  $\alpha = 0.86$  (para  $k = -1$ ) e  $\alpha = 0.5$  (para  $k = 0$ ) é cruzado, o número máximo possível de moléculas que pode ser formado para cada caso (100% para  $k = -1$  e 50% para  $k = 0$ ) é alcançado. Em ambos casos, existe uma mudança abrupta no valor esperado  $3\langle N_c \rangle / N$  no limiar do ponto. Contudo, para  $k = 0$ , o valor esperado  $3\langle N_c \rangle / N$  não apresenta nenhuma mudança drástica, indicativo do fato que não existe nenhuma fronteira separando regiões na Fig. 3.6(c) da análise clássica. Assim diferenças qualitativas são observadas entre os casos de  $k$  negativo, zero e o caso de  $k$  positivo.

Capítulo 5

# Transições de Fase Quânticas

Neste capítulo estudaremos o Hamiltoniano (4.1) usando os conceitos de fidelidade e gap de energia, a fim de identificar transições de fase quânticas do sistema. Transições de fase quânticas (TFQ) diferem intrinsecamente das transições de fase clássicas por estarem desvinculadas de mudanças de temperatura. Na verdade, estas transições ocorrem na temperatura de zero absoluto, devido a flutuações quânticas quando variamos um parâmetro externo [44, 45, 46]. Existem diferentes técnicas matemáticas para se identificar as TFQ e, em particular, os valores críticos dos parâmetros para os quais estas transições ocorrem.

Uma forma possível de se identificar uma TFQ é através do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental do sistema. O valor do parâmetro para o qual o gap se anula ou apresenta um mínimo identifica o parâmetro crítico da TFQ [44]. Outro conceito importante que também pode ser empregado na identificação das TFQ é a fidelidade, que recentemente tem sido muito utilizada na teoria da Computação Quântica. Basicamente, o valor do parâmetro para o qual a fidelidade se anula define o valor crítico para a TFQ [47, 48].

No que segue, faremos um estudo das TFQ utilizando os conceitos de fidelidade e gap para o Hamiltoniano (4.1). A utilização destes métodos diferentes visa obter a maior credibilidade possível acerca dos resultados encontrados.

## 5.1 Fidelidade

Um modo de se caracterizar transições de fase quânticas é utilizando uma ferramenta oriunda da teoria da Computação Quântica, chamada *Fidelidade* [49]. A fidelidade  $\mathcal{F}$  é definida como o módulo do produto escalar entre dois estados quânticos, cujo valor informa o quanto estes estados são “distinguíveis” entre si. Se dois estados pertencem a fases diferentes, então estes estados devem ser distinguíveis, assinalando a passagem por um ponto crítico. A fidelidade varia desde 1 para estados completamente indistinguíveis até 0 para estados totalmente distinguíveis. Para sistemas que exibem uma transição de fase quântica no limite termodinâmico, o ponto onde a fidelidade vai a zero define um ponto crítico <sup>1</sup>.

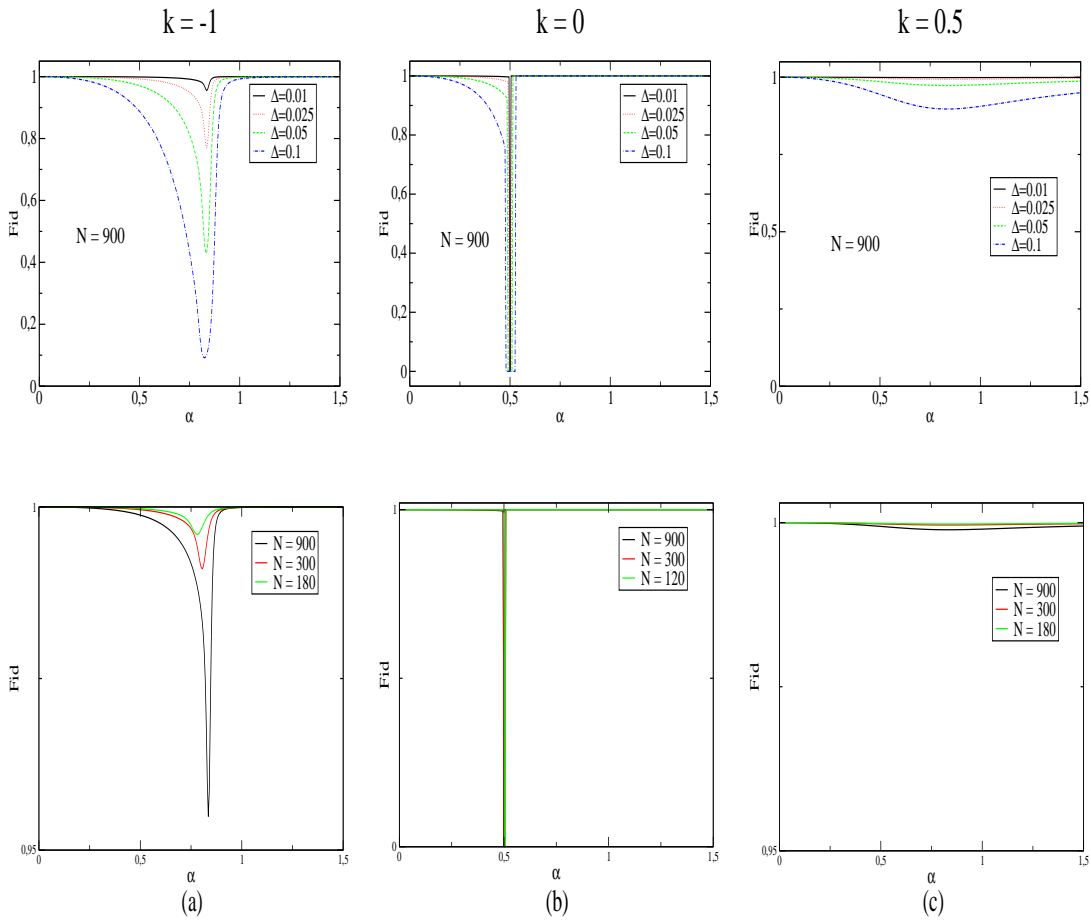
Para fixar idéias, vamos considerar  $H(\delta)$  como sendo um Hamiltoniano genérico dependendo do parâmetro de acoplamento  $\delta$ . Supondo que o estado fundamental do sistema não é degenerado, vamos denotar  $|\psi(\delta)\rangle$  como o estado fundamental normalizado. Para um pequeno valor fixo  $\Delta$ , definimos a fidelidade  $\mathcal{F}_\Delta$  por

$$\mathcal{F}_\Delta(\delta) = |\langle \Psi(\delta(1 - \Delta)) | \Psi(\delta(1 + \Delta)) \rangle|, \quad (5.1)$$

---

<sup>1</sup> Rigorosamente, para sistemas finitos, o ponto onde a fidelidade apresenta um mínimo é identificado como um ponto de “pré-transição de fase quântica” [47, 50]

que é simétrica em  $\Delta$ , limitada entre 0 e 1, e satisfaz  $\mathcal{F}_0(\delta) = 1$ . Genericamente,  $\mathcal{F}_\Delta$  é uma função decrescente de  $\Delta$ . Na Fig. 5.1 (em cima), apresentamos o comportamento da fidelidade para o Hamiltoniano (4.1) usando  $N = 900$ , e diferentes valores de  $\Delta$ . Fica claro a existência de uma queda abrupta no valor da fidelidade quando esta se aproxima do valor crítico  $\alpha \approx 0.86$  para  $k = -1$  e  $\alpha \approx 0.5$  para  $k = 0$ . É interessante observar que diferentes valores de  $\Delta$  alteram a magnitude do mínimo, entretanto o valor de  $\alpha$  onde o mínimo ocorre é totalmente independente de  $\Delta$ , como é mostrado nos gráficos inferiores da Fig. 5.1.



**Fig. 5.1:** Fidelidade versus o parâmetro de acoplamento  $\alpha$  para (a)  $k = -1$ ; (b)  $k = 0$ ; (c)  $k = 0.5$  e  $\Omega = 1$ . Em cima usamos  $N = 900$  e diferentes valores de  $\Delta$ . Em baixo usamos  $\Delta = 0.01$  e diferentes valores de  $N$ . Em todos os casos a fidelidade exibe um mínimo, que é substancialmente mais pronunciado para  $k = -1$  e  $k = 0$ , comparado a  $k = 0.5$ .

Nos casos estudados o mínimo para a fidelidade é muito mais pronunciado quando a

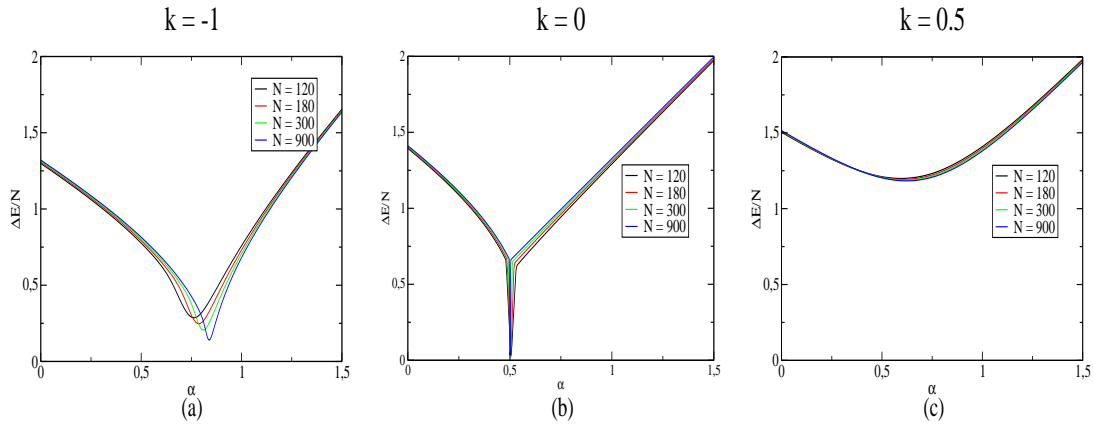
diferença hetero-atômica normalizada  $k$  é negativa e zero comparado a  $k$  positivo.

## 5.2 Gap de Energia

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

$$\Delta E = E^{(1)} - E^{(0)}. \quad (5.2)$$

Uma transição de fase quântica ocorre quando o gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental anula-se no limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$  [44].



**Fig. 5.2:** Gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental em função de  $\alpha$  para (a)  $k = -1$ ; (b)  $k = 0$ ; (c)  $k = 0.5$  e diferentes valores de  $N$ . Foi utilizado  $\Omega = 1$ .

Assim, como fizemos na análise da fidelidade, utilizaremos como parâmetro variável  $\mu_a$  ou  $\alpha$ , em termos das variáveis clássicas. Através da diagonalização do Hamiltoniano (4.1), podemos determinar o gap do sistema em função de  $\alpha$ . O valor deste parâmetro para o qual o gap de energia se anula no limite termodinâmico é o valor crítico. A Fig. 5.2 mostra o gap de energia para diferentes valores de  $N$  em função do parâmetro  $\alpha$ . Podemos observar que o ponto crítico do sistema tende a ocorrer em  $\alpha \approx 0.86$  para  $k = -1$  e  $\alpha \approx 0.5$  para  $k = 0$ , onde há convergência do mínimo para valores crescentes de  $N$ . Em outras palavras, à medida que  $N$  aumenta, este mínimo do gap se aproxima de zero, e o valor de  $\alpha$  em que isso ocorre tende ao ponto crítico, levando desta forma a inferirmos que ocorrerá uma transição de fase quântica quando  $N \rightarrow \infty$ , como previsto e discutido anteriormente.

Assim, podemos concluir que tanto utilizando o conceito de fidelidade quanto o de gap, a distinguibilidade entre duas fases é muito mais pronunciada quando  $k$  é nulo e negativo se comparado a  $k$  positivo. Nas análises anteriores, clássica, da dinâmica quântica e do valor esperado, diferenças qualitativas também surgem quando  $k = -1$  e  $k = 0$  em concordância com os resultados obtidos. Interpretamos estes resultados como o surgimento de fronteiras entre fases quânticas nestes dois casos.

## Capítulo 6

# Conclusões

Neste trabalho foi feito um estudo detalhado da integrabilidade, das dinâmicas clássica, quântica e das transições de fase para um modelo de condensado de Bose-Einstein heterotriatômico molecular. Através destas análises foi possível traçar um panorama bastante completo do comportamento do sistema, apontando uma diferença de cenário existente entre as situações em que a diferença hetero-atômica normalizada  $k$  é negativa, zero ou positiva.

No Cap. 1 apresentamos uma introdução contendo de forma resumida um histórico desde a previsão teórica até a obtenção experimental dos condensados. Também discutimos o conceito básico de condensação e o desenvolvimento da área desde os condensados puramente atômicos até os condensados atômico-moleculares. Completamos com uma discussão sobre a importância e aplicações de modelos exatamente solúveis neste contexto de condensados de Bose-Einstein.

No Cap. 2 discutimos o Hamiltoniano que descreve um condensado de Bose-Einstein heterotriatômico molecular e estudamos a *integrabilidade* deste modelo. Usando o método algébrico do ansatz de Bethe apresentamos a solução exata (equações do ansatz de Bethe e o espectro de energias).

No Cap. 3 fizemos uma *análise clássica* do modelo e encontramos que o espaço de parâmetros pode ser dividido em: cinco regiões para  $k$  negativo; quatro regiões para  $k = 0$  e três regiões para  $k$  positivo. A existência de diferentes regiões origina dinâmicas qualitativamente diferentes, especialmente para os casos de  $k$  negativo e  $k = 0$  se comparados à  $k$  positivo. Estes resultados foram confirmados pelo estudo das curvas de nível do Hamiltoniano no espaço de fase.

No Cap. 4 fizemos um estudo da *dinâmica quântica* e do *valor esperado* do número de moléculas. Nestes dois estudos mostramos que para  $k$  negativo ou zero existem pontos de transição separando regimes diferentes: especialmente, na dinâmica quântica observamos um decréscimo significativo na amplitude de oscilação, enquanto que no valor esperado do número de moléculas ocorre uma mudança abrupta no ponto de transição para os casos de  $k$  negativo e  $k = 0$ . Já no caso de  $k$  positivo não se observam mudanças abruptas na dinâmica e no valor esperado do número de moléculas. Estes resultados concordam com os resultados encontrados na análise clássica.

No Cap. 5 estudamos as *transições de fase quânticas* (TFQ) do modelo, usando os conceitos de gap de energia e fidelidade. Basicamente, verificamos que existe uma relação entre os pontos fixos de bifurcação encontrados na análise clássica e os pontos críticos nas transições de fase quânticas. Fizemos uma análise do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental e encontramos que ocorre uma TFQ para o modelo nos casos onde  $k$  é negativo e  $k = 0$ , cujo valor crítico coincide com os respectivos pontos



fixos de bifurcação encontrados na análise clássica do modelo, diferentemente do caso  $k$  positivo onde não ocorre uma TFQ. O estudo da fidelidade confirmou que ocorre uma TFQ para os mesmos valores críticos encontrados. É importante salientar que os dois métodos empregados para o o modelo, utilizando os gráficos de gap e fidelidade, levam ao mesmo ponto crítico em que ocorre a TFQ, tanto para  $k$  negativo quanto  $k = 0$ , que tende (no limite termodinâmico) ao valor do ponto de bifurcação associado a um mínimo do Hamiltoniano obtido na análise clássica.

Os resultados obtidos nos Caps. 3, 4 e 5 são originais e foram aceitos para publicação em periódico internacional: A.P.Tonel, C.C.N. Kuhn, G. Santos, A. Foerster, I. Roditi e Z.V.T. Santos, Classical and quantum analysis of a hetero-triatomic molecular Bose-Einstein condensate model, aceito para publicação em Physical Review A (2008).

## Apêndice A

# Representação matricial do Hamiltoniano

Para construir a representação matricial do Hamiltoniano (2.1)

$$H = U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{cc}N_c^2 + U_{ab}N_aN_b + U_{ac}N_aN_c + U_{bc}N_bN_c \quad (\text{A.1})$$
$$+ \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger baa)$$

devemos encontrar os elementos de matriz de [H] na base  $\{|N_a, N_b, N_c \rangle\}$ , onde  $N_a$ ,  $N_b$  e ( $N_c$ ) indicam o números de átomos não ligados (moléculas) no condensado.

Como neste modelo o número total de átomos  $N$  e a diferença hetero-atômica  $J$  são quantidades conservadas, além da energia.

$$J = N_a - 2N_b, \quad N = N_a + N_b + 3N_c \quad (\text{A.2})$$

para cada valor fixo de  $N$  e  $J$  teremos uma representação.

O menor valor de  $N$ , para que possa existir uma dinâmica entre estados é  $N = 3$ , sendo assim calculamos os estados possíveis de  $N$ , que nos interessam, até o valor de  $N = 10$  e para  $N = 30$ , o que é suficiente para encontrarmos a regra de criação das bases, e com ela implementar um programa para diagonalização.

$$N = 3$$

$$J = 0 \rightarrow |2, 1, 0 \rangle, |0, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 4$$

$$J = 1 \rightarrow |3, 1, 0 \rangle, |1, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -2 \rightarrow |2, 2, 0 \rangle, |0, 1, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 5$$

$$J = 2 \rightarrow |4, 1, 0 \rangle, |2, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -1 \rightarrow |3, 2, 0 \rangle, |1, 1, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -4 \rightarrow |2, 3, 0 \rangle, |0, 2, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 6$$

$$J = 3 \rightarrow |5, 1, 0 \rangle, |3, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = 0 \rightarrow |4, 2, 0 \rangle, |2, 1, 1 \rangle, |0, 0, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -3 \rightarrow |3, 3, 0 \rangle, |1, 2, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -6 \rightarrow |2, 4, 0 \rangle, |0, 3, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 7$$

$$J = 4 \rightarrow |6, 1, 0 \rangle, |4, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = 1 \rightarrow |5, 2, 0 \rangle, |3, 1, 1 \rangle, |1, 0, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -2 \rightarrow |4, 3, 0 \rangle, |2, 2, 1 \rangle, |0, 1, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -5 \rightarrow |3, 4, 0 \rangle, |1, 3, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -8 \rightarrow |2, 5, 0 \rangle, |0, 4, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 8$$

$$J = 5 \rightarrow |7, 1, 0 \rangle, |5, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = 2 \rightarrow |6, 2, 0 \rangle, |4, 1, 1 \rangle, |2, 0, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -1 \rightarrow |5, 3, 0 \rangle, |3, 2, 1 \rangle, |1, 1, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -4 \rightarrow |4, 4, 0 \rangle, |2, 3, 1 \rangle, |0, 2, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -7 \rightarrow |3, 5, 0 \rangle, |1, 4, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -10 \rightarrow |2, 6, 0 \rangle, |0, 5, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 9$$

$$J = 6 \rightarrow |8, 1, 0 \rangle, |6, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = 3 \rightarrow |7, 2, 0 \rangle, |5, 1, 1 \rangle, |3, 0, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = 0 \rightarrow |6, 3, 0 \rangle, |4, 2, 1 \rangle, |2, 1, 2 \rangle, |0, 0, 3 \rangle \rightarrow \dim 4$$

$$J = -3 \rightarrow |5, 4, 0 \rangle, |3, 3, 1 \rangle, |1, 2, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -6 \rightarrow |4, 5, 0 \rangle, |2, 4, 1 \rangle, |0, 3, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -9 \rightarrow |3, 6, 0 \rangle, |1, 5, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -12 \rightarrow |2, 7, 0 \rangle, |0, 6, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 10$$

$$J = 7 \rightarrow |9, 1, 0 \rangle, |7, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = 4 \rightarrow |8, 2, 0 \rangle, |6, 1, 1 \rangle, |4, 0, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = 1 \rightarrow |7, 3, 0 \rangle, |5, 2, 1 \rangle, |3, 1, 2 \rangle, |1, 0, 3 \rangle \rightarrow \dim 4$$

$$J = -2 \rightarrow |6, 4, 0 \rangle, |4, 3, 1 \rangle, |2, 2, 2 \rangle, |0, 1, 3 \rangle \rightarrow \dim 4$$

$$J = -5 \rightarrow |5, 5, 0 \rangle, |3, 4, 1 \rangle, |1, 3, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -8 \rightarrow |4, 6, 0 \rangle, |2, 5, 1 \rangle, |0, 4, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = -11 \rightarrow |3, 7, 0 \rangle, |1, 6, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = -14 \rightarrow |2, 8, 0 \rangle, |0, 7, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$N = 30$$

$$J = 27 \rightarrow |29, 1, 0 \rangle, |27, 0, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$$

$$J = 24 \rightarrow |28, 2, 0 \rangle, |26, 1, 1 \rangle, |24, 0, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$$

$$J = 21 \rightarrow |27, 3, 0 \rangle, |25, 2, 1 \rangle, |23, 1, 2 \rangle, |21, 0, 3 \rangle \rightarrow \dim 4$$

$$J = 18 \rightarrow |26, 4, 0 \rangle, |24, 3, 1 \rangle, |22, 2, 2 \rangle, |20, 1, 3 \rangle, |18, 0, 4 \rangle \rightarrow \dim 5$$

$$J = 15 \rightarrow |25, 5, 0 \rangle, |23, 4, 1 \rangle, |21, 3, 2 \rangle, |19, 2, 3 \rangle, |17, 1, 4 \rangle, |15, 0, 5 \rangle \rightarrow \dim 6$$

$$J = 12 \rightarrow |24, 6, 0 \rangle, |22, 5, 1 \rangle, |20, 4, 2 \rangle, |18, 3, 3 \rangle, |16, 2, 4 \rangle, |14, 1, 5 \rangle, |12, 0, 6 \rangle \rightarrow \dim 7$$

$$J = 9 \rightarrow |23, 7, 0 \rangle, |21, 6, 1 \rangle, |19, 5, 2 \rangle, |17, 4, 3 \rangle, |15, 3, 4 \rangle, |13, 2, 5 \rangle, |11, 1, 6 \rangle, |9, 0, 7 \rangle \rightarrow \dim 8$$

$$J = 6 \rightarrow |22, 8, 0 \rangle, |20, 7, 1 \rangle, |18, 6, 2 \rangle, |16, 5, 3 \rangle, |14, 4, 4 \rangle, |12, 3, 5 \rangle, |10, 2, 6 \rangle, |8, 1, 7 \rangle, |6, 0, 8 \rangle \rightarrow \dim 9$$

$$J = 3 \rightarrow |21, 9, 0 \rangle, |19, 8, 1 \rangle, |17, 7, 2 \rangle, |15, 6, 3 \rangle, |13, 5, 4 \rangle, |11, 4, 5 \rangle, |9, 3, 6 \rangle, |7, 2, 7 \rangle, |5, 1, 8 \rangle$$

$$|3, 0, 9 \rangle \rightarrow \dim 10$$

$$J = 0 \rightarrow |20, 10, 0 \rangle, |18, 9, 1 \rangle, |16, 8, 2 \rangle, |14, 7, 3 \rangle, |12, 6, 4 \rangle, |10, 5, 5 \rangle, |8, 4, 6 \rangle, |6, 3, 7 \rangle, |4, 2, 8 \rangle$$

$$|2, 1, 9 \rangle, |0, 0, 10 \rangle \rightarrow \dim 11$$

$$J = -3 \rightarrow |19, 11, 0 \rangle, |17, 10, 1 \rangle, |15, 9, 2 \rangle, |13, 8, 3 \rangle, |11, 7, 4 \rangle, |9, 6, 5 \rangle, |7, 5, 6 \rangle, |5, 4, 7 \rangle, |3, 3, 8 \rangle$$

$$|1, 2, 9 \rangle \rightarrow \dim 10$$

$$J = -6 \rightarrow |18, 12, 0 \rangle, |16, 11, 1 \rangle, |14, 10, 2 \rangle, |12, 9, 3 \rangle, |10, 8, 4 \rangle, |8, 7, 5 \rangle, |6, 6, 6 \rangle, |4, 5, 7 \rangle, |2, 4, 8 \rangle$$

$$|0, 3, 9 \rangle \rightarrow \dim 10$$

$$J = -9 \rightarrow |17, 13, 0 \rangle, |15, 12, 1 \rangle, |13, 11, 2 \rangle, |11, 10, 3 \rangle, |9, 9, 4 \rangle, |7, 8, 5 \rangle, |5, 7, 6 \rangle, |3, 6, 7 \rangle, |1, 5, 8 \rangle \rightarrow \dim 9$$

$$J = -12 \rightarrow |16, 14, 0 \rangle, |14, 13, 1 \rangle, |12, 12, 2 \rangle, |10, 11, 3 \rangle, |8, 10, 4 \rangle, |6, 9, 5 \rangle, |4, 8, 6 \rangle, |2, 7, 7 \rangle$$

$$|0, 6, 8 \rangle \rightarrow \dim 9$$

$$J = -15 \rightarrow |15, 15, 0 \rangle, |13, 14, 1 \rangle, |11, 13, 2 \rangle, |9, 12, 3 \rangle, |7, 11, 4 \rangle, |5, 10, 5 \rangle, |3, 9, 6 \rangle, |1, 8, 7 \rangle \rightarrow \dim 8$$

$J = -18 \rightarrow |14, 16, 0 \rangle, |12, 15, 1 \rangle, |10, 14, 2 \rangle, |8, 13, 3 \rangle, |6, 12, 4 \rangle, |4, 11, 5 \rangle, |2, 10, 6 \rangle, |0, 9, 7 \rangle \rightarrow \dim 8$

$J = -21 \rightarrow |13, 17, 0 \rangle, |11, 16, 1 \rangle, |9, 15, 2 \rangle, |7, 14, 3 \rangle, |5, 13, 4 \rangle, |3, 12, 5 \rangle, |1, 11, 6 \rangle \rightarrow \dim 7$

$J = -24 \rightarrow |12, 18, 0 \rangle, |10, 17, 1 \rangle, |8, 16, 2 \rangle, |6, 15, 3 \rangle, |4, 14, 4 \rangle, |2, 13, 5 \rangle, |0, 12, 6 \rangle \rightarrow \dim 7$

$J = -27 \rightarrow |11, 19, 0 \rangle, |9, 18, 1 \rangle, |7, 17, 2 \rangle, |5, 16, 3 \rangle, |3, 15, 4 \rangle, |1, 14, 5 \rangle \rightarrow \dim 6$

$J = -30 \rightarrow |10, 20, 0 \rangle, |8, 19, 1 \rangle, |6, 18, 2 \rangle, |4, 17, 3 \rangle, |2, 16, 4 \rangle, |0, 15, 5 \rangle \rightarrow \dim 6$

$J = -33 \rightarrow |9, 21, 0 \rangle, |7, 22, 1 \rangle, |5, 21, 2 \rangle, |3, 20, 3 \rangle, |1, 19, 4 \rangle \rightarrow \dim 5$

$J = -36 \rightarrow |8, 22, 0 \rangle, |6, 21, 1 \rangle, |4, 20, 2 \rangle, |2, 19, 3 \rangle, |0, 18, 4 \rangle \rightarrow \dim 5$

$J = -39 \rightarrow |7, 23, 0 \rangle, |5, 22, 1 \rangle, |3, 21, 2 \rangle, |1, 20, 3 \rangle \rightarrow \dim 4$

$J = -42 \rightarrow |6, 24, 0 \rangle, |4, 23, 1 \rangle, |2, 22, 2 \rangle, |0, 21, 3 \rangle \rightarrow \dim 4$

$J = -45 \rightarrow |5, 25, 0 \rangle, |3, 24, 1 \rangle, |1, 23, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$

$J = -48 \rightarrow |4, 26, 0 \rangle, |2, 25, 1 \rangle, |0, 24, 2 \rangle \rightarrow \dim 3$

$J = -51 \rightarrow |3, 27, 0 \rangle, |1, 26, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$

$J = -54 \rightarrow |2, 28, 0 \rangle, |0, 27, 1 \rangle \rightarrow \dim 2$

Observa-se que o menor valor em módulo de  $J$  nos fornece sempre o conjunto de estados de maior dimensionalidade, representando os casos mais interessantes.

O que podemos também perceber é que para cada valor  $N$ , teremos um conjunto de  $N - 2$  valores para  $J$  que serão dados por:

$$J = N - 3q \quad (\text{A.3})$$

onde  $q = 1, 2, 3, \dots, N - 2$ .

Assim, tiramos a forma matricial para o Hamiltoniano (2.1):

$$\begin{aligned} \langle N'_a, N'_b, N'_c | H | N_a, N_b, N_c \rangle = & (U_a N_a^2 + U_b N_b^2 + U_c N_c^2 + U_{ab} N_a N_b + U_{ac} N_a N_c \\ & + U_{bc} N_b N_c + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c) \delta_{N'_a, N_a, N'_b, N_b, N'_c, N_c} \\ & + \sqrt{(N_a + 1)(N_a + 2)(N_b + 1)N_c} \Omega \delta_{N'_a, N_a+2, N'_b, N_b+1, N'_c, N_c-1} \\ & + \sqrt{N_a(N_a - 1)N_b(N_c + 1)} \Omega \delta_{N'_a, N_a-2, N'_b, N_b-1, N'_c, N_c+1} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Como estamos interessados nos casos de  $N$  muito grande, temos de fazer um tratamento numérico para encontrar as representações matriciais, desta forma necessitamos encontrar uma regra para a dimensão no espaço de Fock. Teremos a dimensão do nosso espaço sendo:

Para  $J$  assumindo valores positivos:

$$dim = 1 + \frac{(N - J)}{3} \quad (\text{A.5})$$

Para o caso onde  $J = -N$ , que implica em  $k = -1$

$$dim = 1 + \frac{(N)}{6} \quad (\text{A.6})$$

Analicamente fizemos o caso onde  $N = 8$  e  $J = 2$ , onde utilizamos o valor 1 para todos acoplamentos, obtendo a matriz:

$$[H] = \begin{pmatrix} 60 & 2\sqrt{15} & 0 \\ 2\sqrt{15} & 33 & 2\sqrt{6} \\ 0 & 2\sqrt{6} & 16 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

utilizando-se o “Maple” para calcular os autovalores e autovetores encontramos os seguintes resultados, que foram comparados com os calculados via rotina programada em fortran:

$$E_1 = 62,0994552727974991, \quad E_2 = 32,3054151338593059, \quad E_3 = 14,5951295933432200 \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{pmatrix} 0.964803633772 \\ 0.261498939600 \\ 0.027794549518 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -0.528741829517 \\ 0.9250940316333 \\ 0.2779454951858 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0.046974609290 \\ -0.27535311370 \\ 0.960194797349 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Assim, checamos a rotina de diagonalização programada em fortran, que foi posteriormente utilizada para diferentes valores de  $N$  e  $J$ .

As regras para obtenção da representação matricial do Hamiltoniano (2.1) já foram

explicadas, e para ilustrar, apresentamos abaixo o caso de  $N = 30$  e  $J = 3$ :

$$\begin{pmatrix} 741 & 6\sqrt{105} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6\sqrt{105} & 633 & 12\sqrt{38} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12\sqrt{38} & 535 & 4\sqrt{357} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4\sqrt{357} & 447 & 12\sqrt{35} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 12\sqrt{35} & 369 & 10\sqrt{39} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10\sqrt{39} & 301 & 4\sqrt{165} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4\sqrt{165} & 243 & 6\sqrt{42} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6\sqrt{42} & 195 & 4\sqrt{42} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4\sqrt{42} & 157 & 6\sqrt{5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6\sqrt{5} & 129 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

## Apêndice B

# Método algébrico do ansatz de Bethe

Neste apêndice vamos apresentar a derivação das equações do ansatz de Bethe e os autovalores de energia para o Hamiltoniano (2.1). Para isto, devemos resolver o problema de autovalores da matriz de transferência

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

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

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

tal que a álgebra de Yang-Baxter (2.7) para a matriz de monodromia é obedecida

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

Em particular, para o Hamiltoniano (2.1) usamos a seguinte representação explícita para os elementos de  $T(u)$

$$A(u) = (u - \omega - \eta S^z)(u + \omega + \eta K^z) + \eta^2 S^+ K^+, \quad (\text{B.4})$$

$$B(u) = \eta K^- (u - \omega - \eta S^z) - \eta S^+ (u + \omega - \eta K^z), \quad (\text{B.5})$$

$$C(u) = \eta S^- (u + \omega + \eta K^z) + \eta K^+ (u - \omega + \eta S^z), \quad (\text{B.6})$$

$$D(u) = (u + \omega - \eta K^z)(-u + \omega - \eta S^z) + \eta^2 S^- K^-. \quad (\text{B.7})$$

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Escolhemos como pseudovácuo ( $|0\rangle = |k\rangle \otimes |\phi\rangle$ ), com  $|k\rangle$  denotando o estado de peso mínimo da álgebra  $SU(1,1)$  com auto valor  $k$ , ou seja,  $K^-|k\rangle = 0$  e  $K^z|k\rangle = k|k\rangle$  e  $|\phi\rangle$  denotando o estado de peso máximo da álgebra  $SU(2)$  com auto valor  $s_z$ , isto é,  $S^+|\phi\rangle = 0$  e  $S^z|\phi\rangle = s_z|\phi\rangle$ , pois ele é aniquilado pelo operador  $B(u)$

$$B(u)|0\rangle = [\eta K^-(u - \omega - \eta S^z) - \eta S^+(u + \omega - \eta K^z)]|0\rangle \quad (\text{B.16})$$

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

Assim  $a(u)$  e  $d(u)$  podem ser determinados, respectivamente através da ação de  $A(u)$  e de  $D(u)$ , sobre o pseudovácuo  $|0\rangle$ . Obtivemos:

$$a(u) = (u - \omega - \eta s_z)(u + \omega + \eta k), \quad (\text{B.18})$$

$$d(u) = -(u - \omega + \eta s_z)(u + \omega - \eta k). \quad (\text{B.19})$$

Agora, o ansatz de Bethe consiste em escolher os autovetores como

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

uma vez que, por construção, os operadores  $C$ 's atuam como operadores de criação sobre o pseudovácuo  $|0\rangle$ .

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

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

onde

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

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

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

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

sejam satisfeitas. Neste procedimento exigimos o cancelamento dos termos indesejados (segundo e terceiro termos do lado direito da eq. (B.21)), uma vez que estes termos não são capazes de produzir um autovetor da matriz de transferência. Substituindo agora as expressões para  $a$  e  $d$  ((B.18) e (B.19)) em (B.23), as equações do ansatz de Bethe reduzem-se a (2.18)

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

Para cada solução das equações do ansatz de Bethe (2.18), a energia do Hamiltoniano (2.1) é obtida dos autovetores da matriz de transferência (B.22) através da relação (2.17). Encontramos (2.19)

$$\begin{aligned} E &= (\omega - \eta s_z)(\omega - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{v_i + \eta}{v_i} \\ &\quad - (\omega + \eta s_z)(\omega + \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{v_i - \eta}{v_i} \\ &\quad + \frac{1}{2}\omega\eta + \alpha I^2 + \beta J^2 + \gamma IJ. \end{aligned} \tag{B.25}$$

## Apêndice C

# Verificação da Álgebra de Yang-Baxter

Para facilitar a busca da matriz de monodromia para o modelo, descrito pelo Hamiltoniano (2.1), que satisfaz a álgebra de Yang-Baxter (2.7), foi criada uma rotina no software Maple 11 com o intuito de simplificar as operações complexas de comutações entre os operadores  $S^z$ ,  $S^\pm$ ,  $K^z$  e  $K^\pm$ .

```
> restart;
> with(Physics);
> Setup(quantumop = Kz,Km,Kp,Sz,Sp,Sm, algebrarule=%Commutator(Kz, Kp)=Kp,
%Commutator(Kz, Km)=-Km, %Commutator(Kp, Km)=-2*Kz, %Commutator(Sz, Sp)=Sp,
%Commutator(Sz, Sm)=-Sm, %Commutator(Sp, Sm)=2*Sz):
> R := array(1 .. 2, 1 .. 2, 1 .. 2, 1 .. 2):
> f:=(x)->1; f1:=(x)->x/(x+n); f2:=(x)->n/(x+n);
> f3:=(x)->(x-n*Sz)/x; f4:=(x)->-n*Sp/x; f5:=(x)->-n*Sm/x; f6:=(x)->(x+n*Sz)/x;
> f7:=(x)-> x+n*Kz; f8:=(x)->n*Km; f9:=(x)->-n*Kp; f10:=(x)->x-n*Kz
> for i to 2 do
> for j to 2 do
> for k to 2 do
> for l to 2 do
> R[i,j,k,l] :=(x)-> 0
> od
> od
> od
> od;
> R[1,1,1,1] :=(x)-> f(x):
> R[1,1,2,2] :=(x)-> f1(x):
```

```

> R[1,2,2,1] :=(x)-> f2(x):
> R[2,2,1,1] :=(x)-> f1(x):
> R[2,1,1,2] :=(x)-> f2(x):
> R[2,2,2,2] :=(x)-> f(x):
> Ls := array(1 .. 2, 1 .. 2);
> for r to 2 do
> for s to 2 do
> Ls[r,s] :=(x)-> 0
> od
> od;
> Ls[1,1] :=(x)-> f3(x):
> Ls[1,2] :=(x)-> f4(x):
> Ls[2,1] :=(x)-> f5(x):
> Ls[2,2] :=(x)-> f6(x):
> Lk := array(1 .. 2, 1 .. 2);
> for t to 2 do
> for q to 2 do
> Lk[t,q] :=(x)-> 0
> od
> od;
> Lk[1,1] :=(x)-> f7(x):
> Lk[1,2] :=(x)-> f8(x):
> Lk[2,1] :=(x)-> f9(x):
> Lk[2,2] :=(x)-> f10(x):
> u:=5; v:=3;
> lefts := sum(sum(R[a1,a11,b1,b11](u-v)*Ls[a1,a](u)*Ls[b1,b](v),a1=1..2),b1=1..2);
> rights := sum(sum(Ls[b11,b1](v)*Ls[a11,a1](u)*R[a,a1,b,b1](u-v),a1=1..2),b1=1..2);
> K2s := array(1 .. 2, 1 .. 2, 1 .. 2, 1 .. 2):
> for a to 2 do
> for b to 2 do
> for a11 to 2 do
> for b11 to 2 do
> K2s[a,b,a11,b11]:= expand(lefts-rights)
> od
> od
> od

```

```

> od;
> subs(Sz*Sp = Sp+Sz*Sp, Sz*Sm = -Sm+Sz*Sm, Sp*Sm = 2*Sz+Sp*Sm, simplify(K2s));
> leftk := sum(sum(R[ap1,ap11,bp1,bp11](u-v)*Lk[ap1,ap](u)*Lk[bp1,bp](v),ap1=1..2)
,bp1=1..2);
> rightk := sum(sum(Lk[bp11,bp1](v)*Lk[ap11,ap1](u)*R[ap,ap1,bp,bp1](u-v),ap1=1..2)
,bp1=1..2);
> K2k := array(1 .. 2, 1 .. 2, 1 .. 2, 1 .. 2):
> for ap to 2 do
> for bp to 2 do
> for ap11 to 2 do
> for bp11 to 2 do
> K2k[ap,bp,ap11,bp11]:= expand(leftk-rightk)
> od
> od
> od
> od;
> subs(Kz*Kp = Kp+Kz*Kp, Kz*Km = -Km+Kz*Km, Kp*Km = -2*Kz+Kp*Km,
simplify(K2k));

```

Após compilar os comandos acima em um “script” teremos como resultado do comando `> subs` uma matriz 4x4 contendo somente elementos nulos, sendo assim satisfazendo a álgebra de Yang-Baxter.

# Referências Bibliográficas

- [1] A. Einstein, Quantentheorie de einatomigen idealen Gases. **Sitzungsberichte der Preussichen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 22, p. 261-267, (1924);
- [2] A. Einstein, Quantentheorie de einatomigen idealen Gases - Zweite Abhandlung **Sitzungsberichte der Preussichen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 1, p. 3-14, (1925);
- [3] S. N. Bose, Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese **Zeitschrift for Physik**, Berlin, v. 26, p. 178-181, (1924);
- [4] M. H. Anderson, et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. **Science**, Washington, v. 269, n. 7, p. 198-201, July 1995;
- [5] C. C. Bradley, et al. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. **Phys. Rev. Lett.**, Woodbury, v. 75, n. 9, 1687 4p., Aug. 1995;
- [6] K. B. Davies, et al. Bose-Einstein condensation in na gas of sodium atoms. **Phys. Rev. Lett.**, Woodbury, v. 75, n. 22, 3969 5p., Nov. 1995;
- [7] W. Ketterle, Nobel lecture: when atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. **Rev. Mod. Phys.**, Melville, v. 74, n. 4, p. 1131-1151, Oct. 2002;
- [8] D. S. Durfee, W. Ketterle, Experimental studies of Bose-Einstein condensation. **Optics Express**, Washington, v. 2, n. 8, p. 299-313, Apr. 1998;
- [9] E. A. Cornell and C. E. Wieman, **Rev. Mod. Phys.** **74** (2002) 875;
- [10] J. R. Anglin and W. Ketterle, **Nature** **416**, (2002) 211;
- [11] E. Cornell, Very cold indeed: the nanokelvin physics of Bose-Einstein condensation. **Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology**, Washington, v. 101, n. 4, p. 419-434, July/Aug. 1996.

- [12] E. A. Donley, et al. Atom-molecule coherence in a Bose-Einstein condensate. **Nature**, London, v. 417, n. 5, p. 529-533, May (2002);
- [13] S. B. Papp and C. E. Wieman, **Phys. Rev. Lett.** **97**, (2006) 1804049.
- [14] J. Herbig, T. Kraemer, M. Mark, T. Weber, C. Chin, H.-C. Nagerl and R. Grimm, **Science** **301** (2003) 1510;
- [15] S. Dürr, et al. Observation of molecules produced from a Bose-Einstein condensate. **Phys. Rev. Lett.**, Melville, v. 92, n. 2, 020406 4p., Jan. 2004.
- [16] P. Zoller, Making it with molecules. **Nature**, London, v. 417, n. 5, p. 493-494, May 2002;
- [17] B. Damski, L. Santos, E. Tiemann, M. Lewenstein, S. Kotochigova, P. Julienne, and P. Zoller, **Phys. Rev. Lett.** **90** (2003) 110401;
- [18] D. Wang, J. Qi, M. F. Stone, O. Nikolayeva, H. Wang, B. Hattaway, S. D. Gensemer, P. L. Gould, E. E. Eyler, and W. C. Stwalley, **Phys. Rev. Lett.** **93**, (2004) 243005;
- [19] G. Thalhammer, G. Barontini, L.D. Sarlo, J. Catani, F. Minardi and M. Ignuscio, **Phys. Rev. Lett.** **100** (2008) 210402;
- [20] J. Catani, L.D. Sarlo, G. Barontini, F. Minardi and M. Ignuscio, **Phys. Rev.** **A77** (2008) 011603(R);
- [21] H. Wang e W. C. Stwalley, **J. Chem. Phys.** **108**, 5767 (1998)
- [22] D. DeMille, **Phys. Rev. Lett.** **88**, 067901 (2002)
- [23] M. G. Kozlov e L. N. Labzowsky, **J. Phys. B** **28**, 1933 (1995)
- [24] F. Ferlaino, S. Knoop e R. Grimm, **ArXiv:0809:3920**;
- [25] G. Santos, A. Foerster, I. Roditi, Z. V. T. Santos e A. P. Tonel, **J. Phys. A: Math. Theor.** **41** No 29 (25 July 2008) 295003 (9pp);
- [26] A. P. Tonel, Propriedades algébricas de modelos de elétrons correlacionados, Dissertação de mestrado, IF-UFRGS, 1999;
- [27] D. Rubeni, Ansatz de Bethe aplicado a modelos de condensados de Bose-Einstein, Trabalho de Conclusão de Curso, IF-UFRGS, 2008.



- [28] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H.-C. Nagerl, R. Grimm, **Nature** **440**,(2006) 315;
- [29] J. Catani, Private communication related to work in collaboration with G. Barontini, F. Rabati, G. Talhammer, C. Weber, F. Minardi and M. Inguscio;
- [30] H.-Q. Zhou, J. Links, M. Gould and R. McKenzie, **J. Math. Phys.** **44** (2003) 4690;
- [31] J. Links, H.-Q. Zhou, R. H. McKenzie e M. D. Gould, **J. Phys.** **A36** (2003) R63;
- [32] H.-Q. Zhou, J. Links, R. H. McKenzie and X.-W. Guan, **J. Phys.** **A36** (2003) L113;
- [33] A. Foerster, J. Links, H.-Q. Zhou, in Classical and quantum nonlinear integrable systems: theory and applications, edited by A. Kundu (**IOP Publishing, Bristol and Philadelphia, 2003**) pp. 208-233;
- [34] J. Dukelsky, G. Dussel, C. Esebbag and S. Pittel, **Phys. Rev. Lett.** **93** (2004) 050403;
- [35] G. Ortiz, R. Somma, J. Dukelsky and S. Rombouls, **Nuclear Physics B707** (2005) 421;
- [36] A. Kundu, **Theoretical and Mathematical Physics** **151** (2007) 831;
- [37] A. Foerster and E. Ragoucy, **Nuclear Physics B777** (2007) 373;
- [38] J. Li, D.-F. Ye, C. Ma, L.-B. Fu and J. Liu, **arXiv:0807.1691**;
- [39] M. Héritier, **Nature** **414** (2001) 31;
- [40] M. T. Batchelor, **Physics Today** **60** (2007) 36;
- [41] A. P. Tonel, J. Links, e A. Foerster, **J. Phys. A: Math. Gen.** **38**, (2005) 1235;
- [42] G. N. Santos, A. P. Tonel, A. Foerster, e J. Links, **Phys. Rev. A** **73**, (2006) 023609;
- [43] A. P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, **J. Phys. A: Math. Gen.** **38**, (2005) 6879;
- [44] S. Sachdev, **Quantum phase transitions**. New York: Cambridge University Press, (2001);
- [45] A. Osterloh, et al. Scalling of entanglement close to a quantum phase transition. **Nature**, London, v. 416, n. 4, p. 608-610, Apr. (2002);

- 
- [46] S. L. Sondhi, et al. Continuous quantum phase transition. **Rev. Mod. Phys.**, Woodbury, v. 69, n. 1, p. 315-333, Jan. (1997);
- [47] N. Oelkers, J. Links, Ground-state properties of the attractive one-dimensional Bose-Hubbard model. **Phys. Rev. B**, Melville, v. 75, n. 3, 115119 15p., Mar. (2007);
- [48] P. Buonsante, A. Vezzani, Ground-state fidelity e bipartite entanglement in the Bose-Hubbard model. **Phys. Rev. Lett.**, Melville, v. 98, n. 3, 110601 4p., Mar. (2007);
- [49] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, **Quantum computation and quantum information**. Cambridge: Cambridge University Press, (2000);
- [50] H.-Q. Zhou, J. Links, R. H. McKenzie, Exact solution, scaling behaviour and quantum dynamics of a model of an atom-molecule Bose-Einstein condensate. **J. Mod. Phys. B**, Singapore, v. 17, n. 31/32, p. 5819-5828, Dec. (2003.)