

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF

Dissertação de Doutorado

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

Aluno: Zeila Virginia Torres Santos

Orientador: Itzhak Roditi

Co-orientador: Angela Foerster

Novembro - 2009

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Este trabalho é dedicado

C. Bukowski.
W. Allen.

Agradecimentos

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

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

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

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

Gracias totales!

Resumo

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

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

Abstract

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

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

Sumário

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

4.1.5	Diagrama de parâmetros e curvas de nível	42
4.2	Análise Quântica	45
4.2.1	Dinâmica quântica	46
4.3	Transições de Fase Quânticas, <i>TFQ</i>	46
4.3.1	Gap de energia	47
5	Conclusões	51
A	Modelo ABC	54
A.1	Integrabilidade	55
A.2	Análise Clássica e Quântico	56
A.2.1	Pontos Fixos	58
A.2.2	Diagrama de parâmetros	61
A.2.3	Dinâmica Quântica	63
B	Artigo 1	64
C	Artigo 2	74
	Referência	84

Capítulo 1

Introdução

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

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

1. glúons,
2. fótons,

3. átomos de He-4,
4. bóson de Higgs.

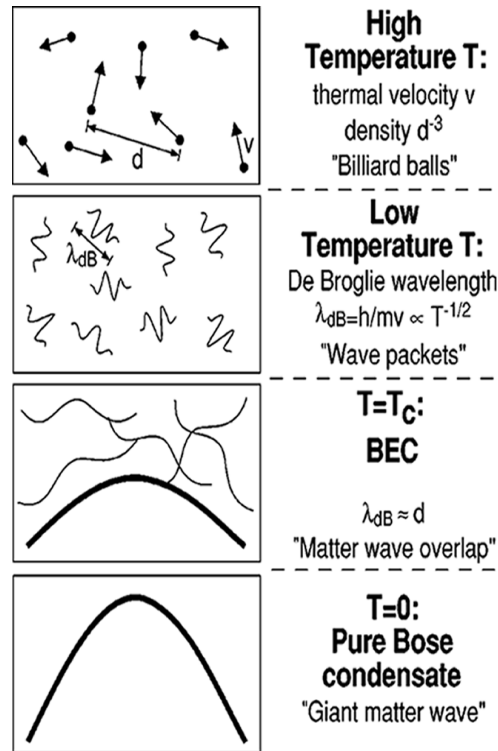


Figura 1.1: Etapas na condensação de Bose-Einstein. Do alto para baixo. 1. Para altas temperaturas, os átomos do vapor com uma interação desprezível entre eles podem ser considerados como um sistema de "bolas de bilhar". 2. Ao abaixarmos a temperatura, numa descrição quântica simplificada, os átomos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

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

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

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

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

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

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

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

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

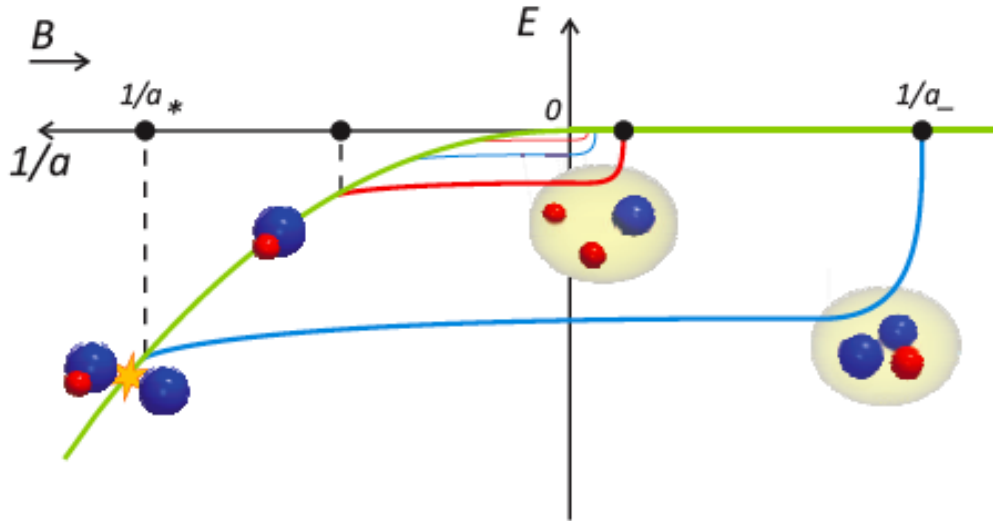


Figura 1.2: Diagrama de energia dos estados de Efimov para uma mistura de K e Rb usando ressonância Feshbach onde a longitude de espalhamento diverge $1/a = 0$. Os estados de Efimov aparecem: (i) no limiar átomo-dímero do sistema para comprimentos de espalhamento positivos a_+ ; (ii) no limiar de três-átomos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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Capítulo 2

Integrabilidade e solução exata

2.1 Método do Espalhamento Inverso Quântico, *MEIQ*

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

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

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

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

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

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

os parâmetros u e v são chamados de parâmetros espectrais.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.2 MEIQ ou ansatz de Bethe algébrico

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

onde

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

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

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

são satisfeitas.

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

2.3 Exemplos de realizações da álgebra de Yang-Baxter

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

2.3.1 Realizações triviais

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

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

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

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

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

2.3.2 Realização dos operadores bosônicos.

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

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

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

O operador de Lax $L^a(u)$ é:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

e as *rr.cc.* de $su(1, 1)$ são:

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

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

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

o que fica claro com as seguintes escolhas:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

O operador de Lax para esta álgebra é dado por:

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

onde $G = \text{diag}(-1, +1)$.

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

Capítulo 3

Modelos tri-atômicos de condensados de Bose-Einstein

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

★1. AABC

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

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

são independentes:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

★2. *ABCD*

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

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

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

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

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

Usando a seguinte reparametrização:

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

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

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

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

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

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

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

★3. AAAB

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

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

O Hamiltoniano (3.6) tem apenas uma quantidade conservada:

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

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

3.1 Modelo para dois átomos a e outro b , AABC

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

que satisfaz a relação de Y-B:

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

Desta forma podemos definir a matriz de transferência como:

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

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

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

o que significa que o modelo é integrável.

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

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

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

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

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

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

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

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

Acima, cada conjunto $\{v_i, i = 1 \dots M\}$ são soluções das EAB e parametrizam um autovetor da matriz de transferência e, assim como, do Hamiltoniano (3.1) com energia dada pela equação (3.21).

3.2 Modelo para três átomos diferentes a , b e c

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

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

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

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

onde lembramos que fazemos a identificação:

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

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

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

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

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

3.3 Realização para o modelo Homonuclear-molecular

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

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

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

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

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

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

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

e,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Analisamos esse conjunto de equações nos limites e obtemos:

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

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

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

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

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

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

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

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

geradores:

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

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

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

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

Faremos as seguintes identificações:

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

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

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

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

Usando as identificações em 3.37, verifica-se que:

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

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

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

e a Energía do Hamiltoniano (3.6):

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

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

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

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

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

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

logo definimos as variáveis:

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

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

$$(3.44)$$

sendo $N = N_a + 3N_b$ onde:

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

z representa a diferença da fração de ocupação atômica e ϕ a diferença de fase.

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

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

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

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

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

Também podemos escrevê-la:

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

onde usamos estes novos parâmetros

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

e

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

Capítulo 4

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

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

O Hamiltoniano deste modelo é descrito pela equação:

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

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

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

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

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

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

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

4.1 Análise Clássica

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

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

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

Fazemos a mudança de variável dos operadores j

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

e após, a seguinte troca de variáveis

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

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

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

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

sendo:

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

onde temos que levar em consideração que:

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

sendo k a diferença hetero-atômica normalizada.

4.1.1 Equações de movimento e pontos fixos

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

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

Usando a condição

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

determinamos os pontos fixos no espaço de parâmetros (λ e α).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$\star\phi = 0$ e z é solução de:

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

que pode admitir uma, duas ou três soluções.

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

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

que pode admitir uma, duas ou três soluções.

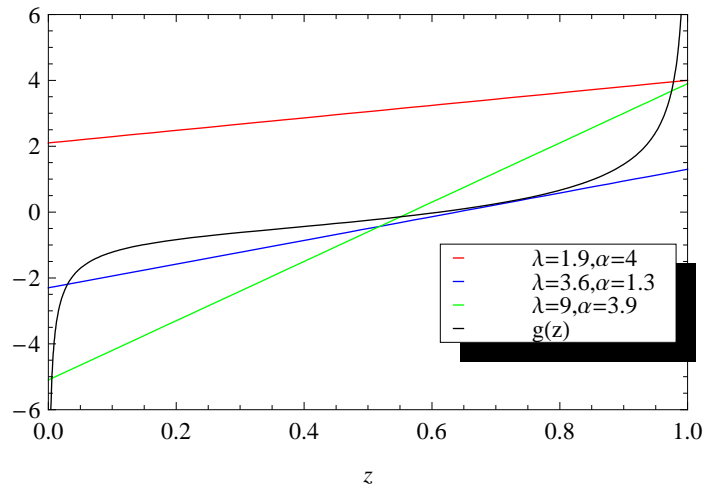


Figura 4.1: Solução gráfica da equação (4.14) para valores distintos de λ e α

4.1.3 Caso Zero: $k = 0$

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

★ $\phi = 0$ z é solução de:

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

que admite nenhuma, uma ou duas soluções.

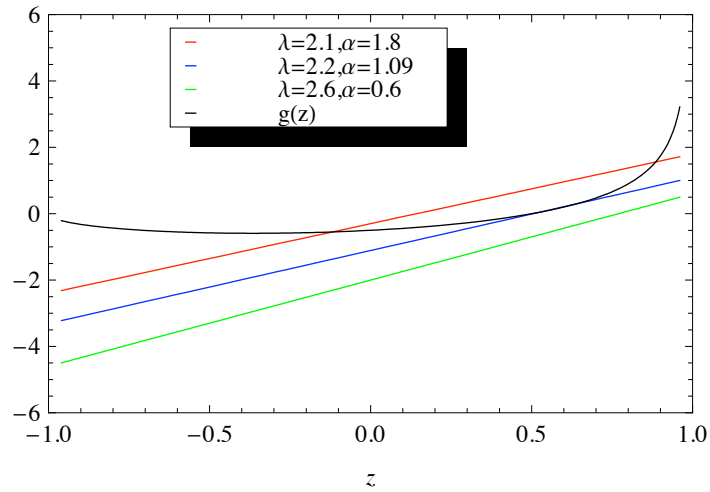


Figura 4.2: Comportamento da equação (4.16) para três valores diferentes de λ e α

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

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

que pode admitir nenhuma, uma ou duas soluções.

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

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

que admite somente uma solução.

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

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

★ $\phi = 0$ e z é solução de:

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

que admite nenhuma, uma ou duas soluções.

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

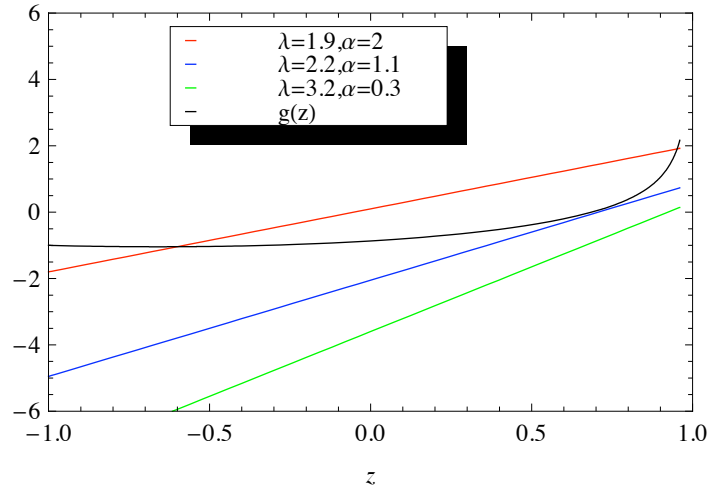


Figura 4.3: Comportamento da equação (4.19) para três valores diferentes de λ e α

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

que pode admitir nenhuma, uma ou duas soluções.

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

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

onde ϕ é a solução de:

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

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

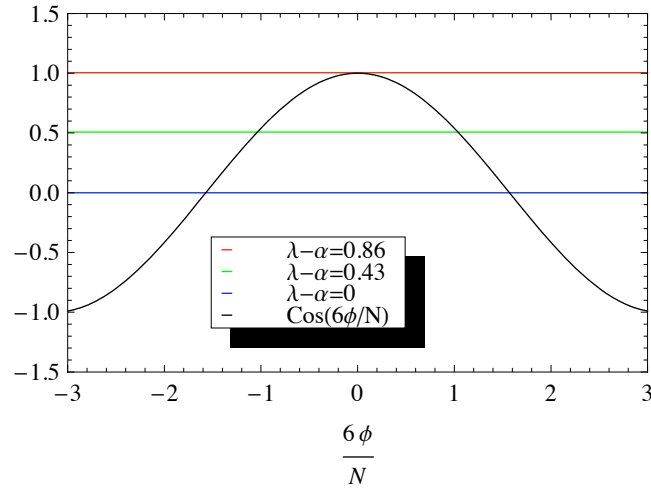


Figura 4.4: Comportamento da função (4.22) para três valores diferentes de λ e α , para $k = -1$

4.1.5 Diagrama de parâmetros e curvas de nível

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

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

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

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

Analogamente, é possível determinar as fronteiras no espaço de parâmetros para os outros dois casos. Das equações dadas por (4.18) e (4.21), nós observamos o aparecimento de novas fronteiras dadas pelas condições $\lambda = (\alpha \mp g(-k-1))/(k+2)$ para k negativo e $\lambda = \alpha/2$ para $k = 0$. As fronteiras no espaço de parâmetros são apresentadas na fig. (4.5(a)) e fig. (4.5(b)) para $k = -1$ e $k = 0$, respectivamente. Observe que as fronteiras adicionais, que delimitam a região C, para $k = -1$ são reduzidas a uma única fronteira para $k = 0$, a qual não está presente para $k = 0.5$. Assim, nós temos um panorama diferente para

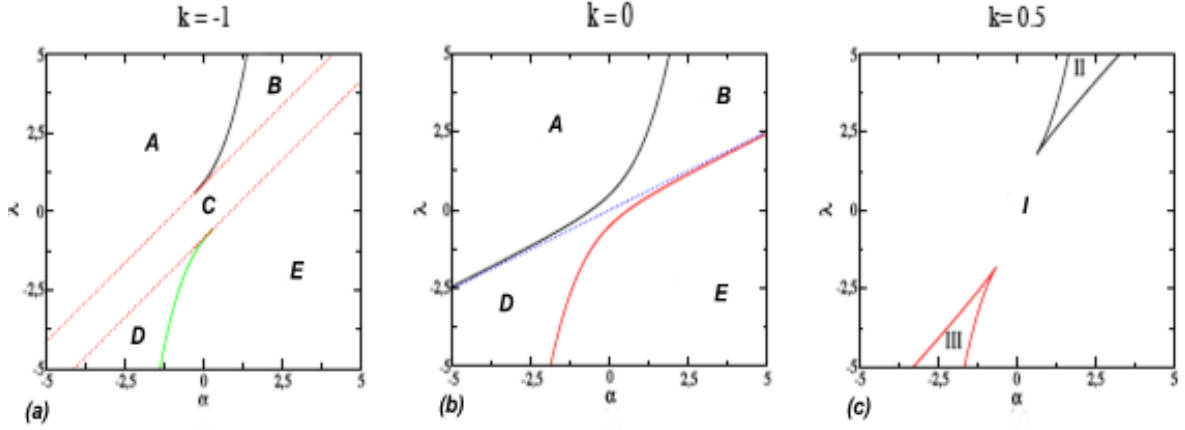


Figura 4.5: Diagrama de parâmetros identificando os tipos diferentes de soluções da equação (4.11) para $k = -1, 0, , 0.5$.

os diagramas de parâmetros, dependendo se a diferença hetero-atômica normalizada k é positiva, zero ou negativa. Podemos resumir o comportamento típico dos diagramas de parâmetros da forma seguinte: quando k é negativo, o diagrama é dividido em 5 regiões: na região A não existe solução para z quando $\phi = 0$ e existe uma solução para z quando $\phi = N\pi/6$.

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

Para auxiliar na compreensão da dinâmica clássica é útil plotarmos as curvas de nível do Hamiltoniano (4.8). As curvas de nível são curvas de energia constante do Hamiltoniano no espaço de fase. As figuras (4.6) são mostradas para os três casos $k = -1, k = 0$ e $k = 0.5$, ilustrando o comportamento nas diferentes regiões. Observamos que o padrão

das curvas de nível é diferente para os casos de k negativo e zero se comparados ao caso de k positivo. É importante salientar que este estudo também nos permite identificar, de forma simples, se os pontos fixos obtidos estão associados a máximos, mínimos ou pontos de sela.

4.2 Análise Quântica

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

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

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

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

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

4.2.1 Dinâmica quântica

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

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

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

Nesta análise fixamos N e J .

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

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

4.3 Transições de Fase Quânticas, *TFQ*

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

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

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

4.3.1 Gap de energia

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

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

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

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

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

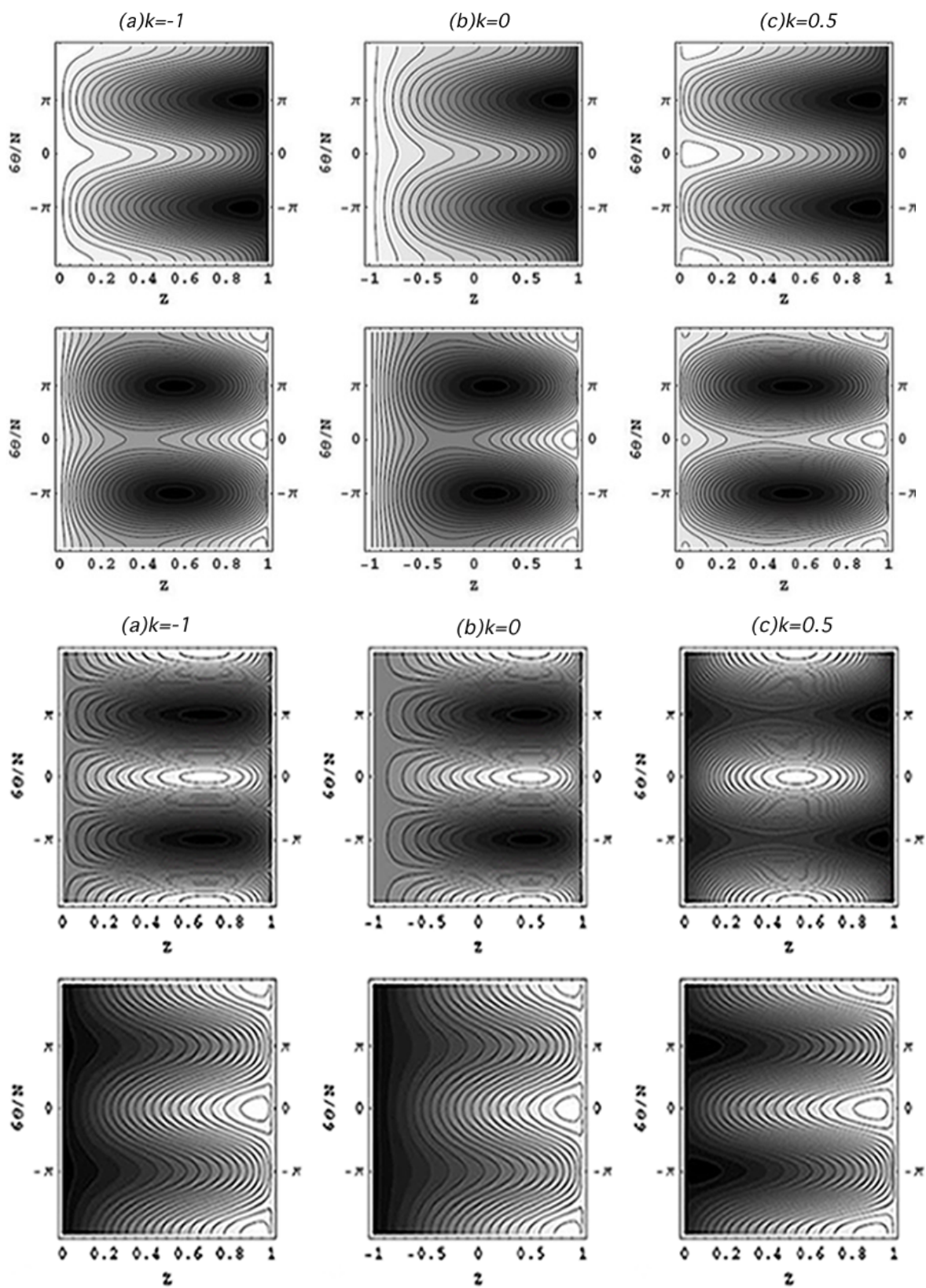


Figura 4.6: Curvas de nível para o Hamiltoniano (4.1). Aqui temos usado para: (a) $k = -1$ à esquerda $(\lambda, \alpha) = (0, -1.0), (5, 2.5), (0, 0)$ e $(0, 1.5)$; (b) $k = 0$ no meio $(\lambda, \alpha) = (0, -1), (2.5, 2.5), (0, 0)$ e $(0, 1.5)$; (c) $k = 0.5$ à direita $(\lambda, \alpha) = (0, -1.5),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

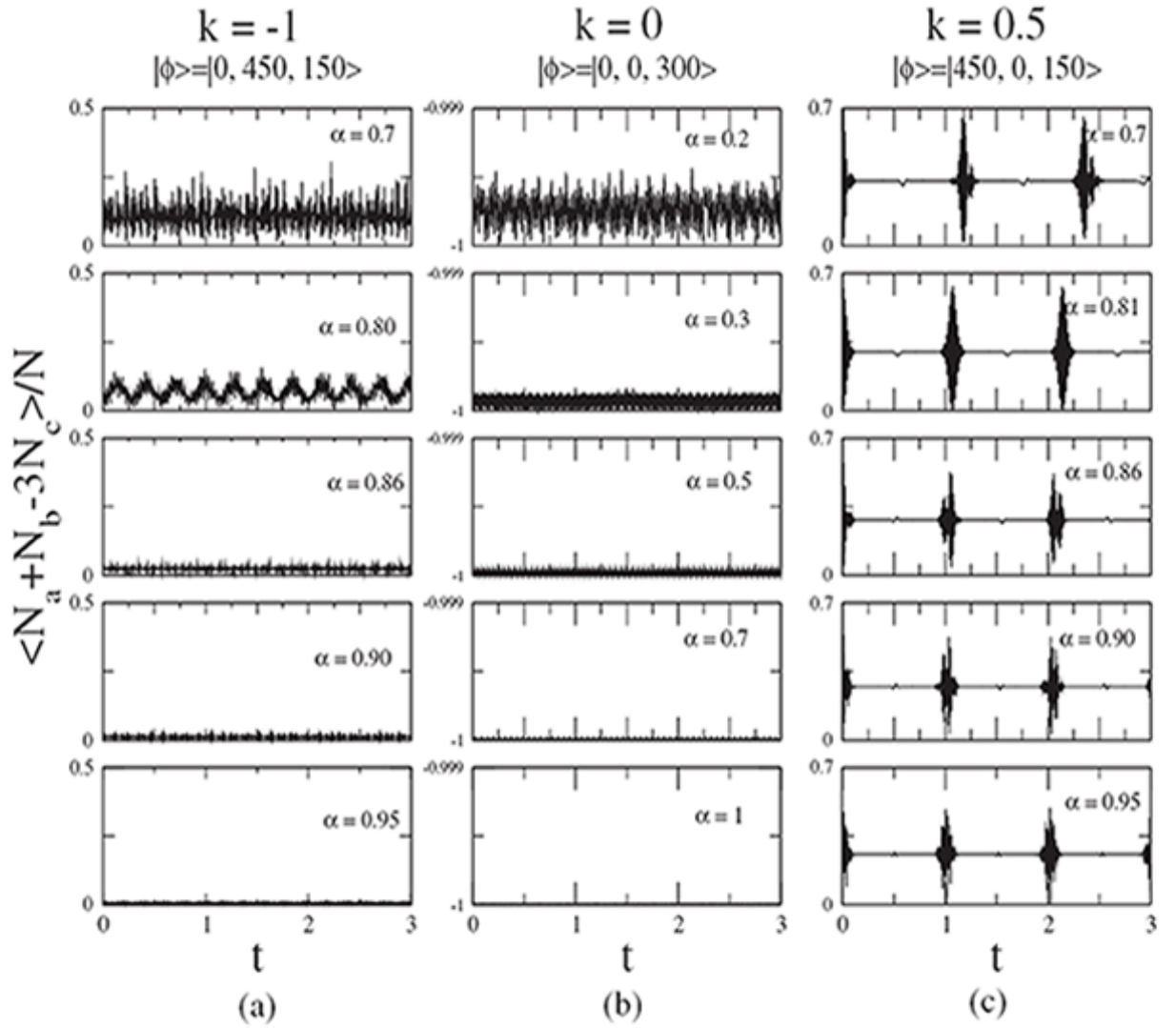


Figura 4.7: Evolução temporal do valor esperado de z para o Hamiltoniano (4.23) com $N = 900$, para (a) $k = -1$ o estado inicial $|0, 450, 150\rangle$; para (b) $k = 0$ e estado inicial $|0, 0, 300\rangle$; para (c) $k = 0.5$ com estado inicial $|450, 0, 150\rangle$.

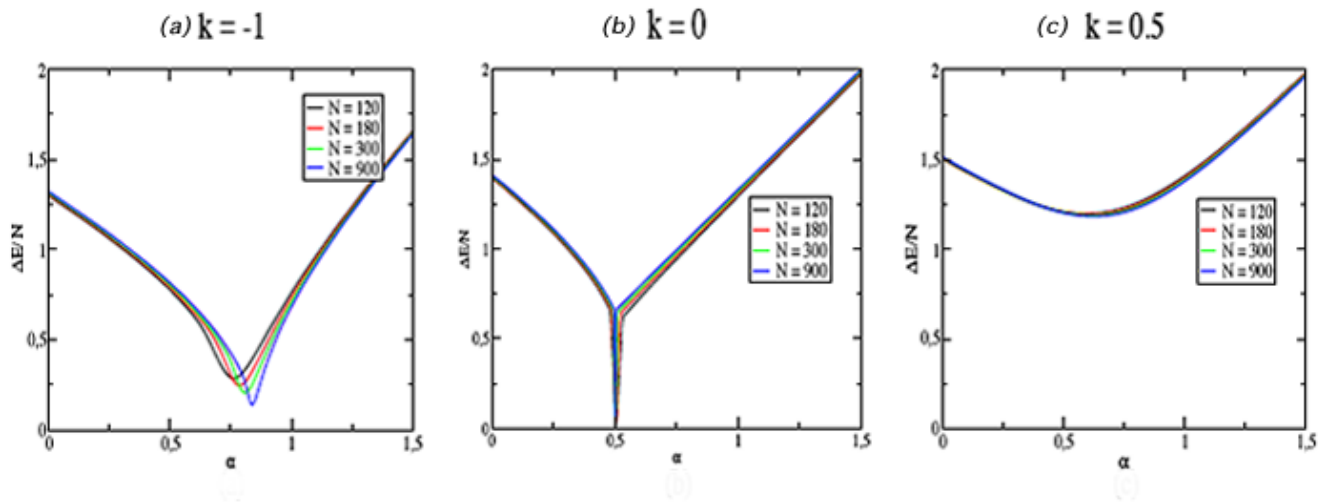


Figura 4.8: Gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental em função de α para (a) $k = -1$; (b) $k = 0$; (c) $k = 0.5$, para diferentes valores de N ; usamos $\Omega = 1$

Capítulo 5

Conclusões

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Apêndice

Apêndice A

Modelo ABC

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

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

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

A.1 Integrabilidade

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

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

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

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

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

temos que:

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

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

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

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

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

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

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

A.2 Análise Clássica e Quântico

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

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

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

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

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

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

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

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

agora escrevemos o argumento do *cos* como:

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

e as relações seguintes:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

onde

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

A.2.1 Pontos Fixos

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

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

e os pontos fixos estão determinados pela condição:

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

logo usando (A.14) encontramos a igualdade

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

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

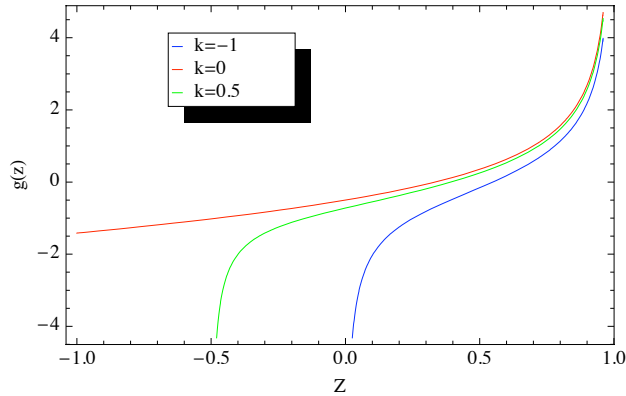


Figura A.1: Comportamento da função $g(z)$ da equação A.18 para três valores diferentes de k

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

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

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

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

★ para $\phi = \frac{N\pi}{4}$, esta:

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

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

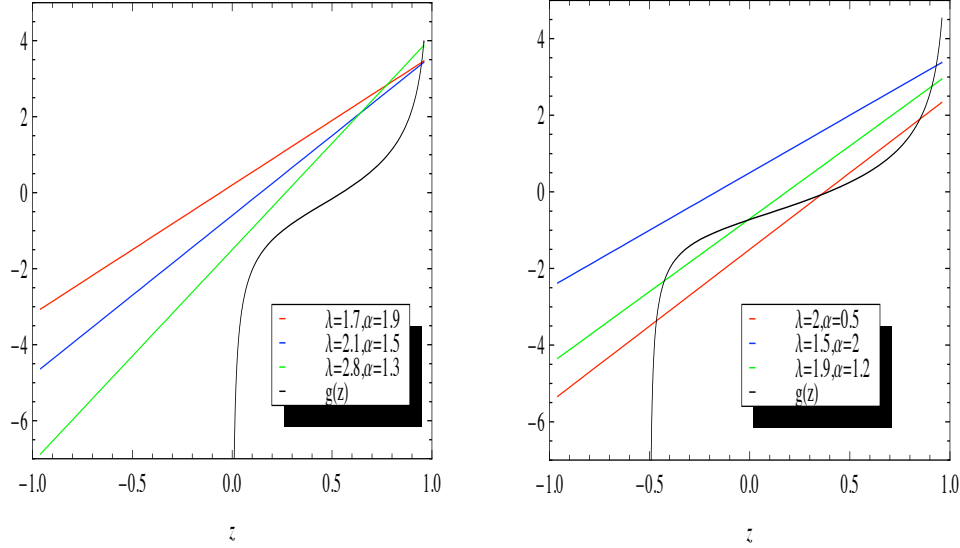


Figura A.2: Solução gráfica da equação (A.18). A intersecção entre a reta $f(z)$ e a curva $g(z)$ para diferentes valores de λ e α . Para este caso podemos tomar dois valores de k , um sendo $k = -1$ (a) e outro $k = 0.5$ (b).

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

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

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

e para a equação (A.19) temos:

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

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

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

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

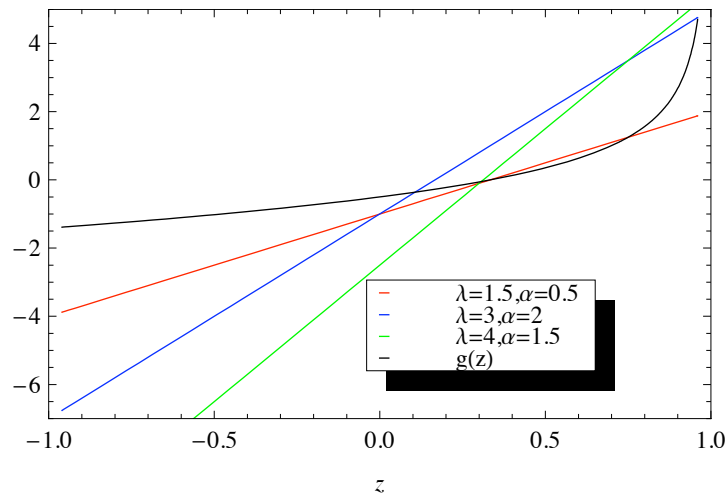


Figura A.3: Solução gráfica da equação (A.20) para $k = 0$. A intersecção entre a reta $f(z)$ e a curva $g(z)$ para diferentes valores de λ e α

A.2.2 Diagrama de parâmetros

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

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

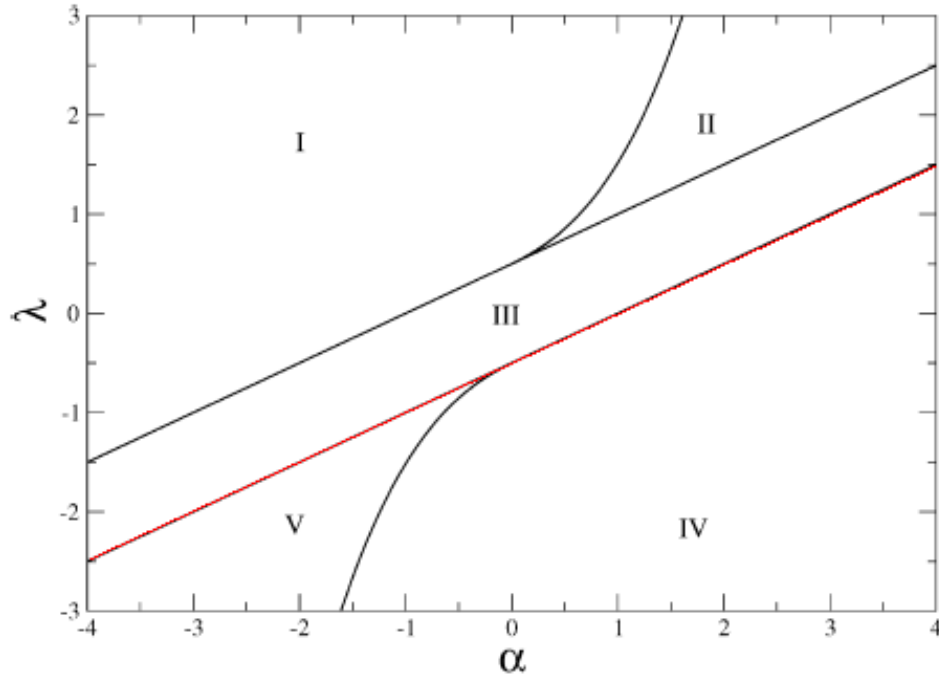


Figura A.4: Diagrama de parâmetros identificando diferentes tipos de soluções da equação A.16 onde $k=0$. Na região I não tem solução para z quando $\phi = 0$, e uma solução para z quando $\phi = N\pi/4$. Na região II tem duas soluções para z quando $\phi = 0$, e uma solução para z quando $\phi = N\pi/4$.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

A.2.3 Dinâmica Quântica

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Apêndice B

Artigo 1

Exactly solvable models for tri-atomic molecular Bose–Einstein condensates

G Santos¹, A Foerster², I Roditi¹, Z V T Santos¹ and A P Tonel³

¹ CBPF—Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro RJ, Brazil

² Instituto de Física da UFRGS, Porto Alegre, RS, Brazil

³ CCET da Universidade Federal do Pampa/Unipampa, Bagé, RS, Brazil

E-mail: gilho@cbpf.br

Received 2 May 2008, in final form 30 May 2008

Published 26 June 2008

Online at stacks.iop.org/JPhysA/41/295003

Abstract

We construct a family of tri-atomic models for heteronuclear and homonuclear molecular Bose–Einstein condensates. We show that these new generalized models are exactly solvable through the algebraic Bethe ansatz method and derive their corresponding Bethe ansatz equations and energies.

PACS numbers: 02.30.Ik, 03.65.Fd, 03.65.–w, 05.30.Jp, 03.75.Nt

1. Introduction

Since the pivotal experimental achievement that led to realizations of Bose–Einstein condensates (BECs), using ultracold dilute alkali gases [1, 2], a great effort has been devoted to the understanding of new properties of BEC. The creation of a molecular BEC compound, which has been obtained by different techniques [3], leads one also to the compelling chemistry of BECs, where the atomic constituents may form molecules, for instance, by Feshbach resonances [4] or photoassociation [5]. These results turned the search for integrable models that could be candidates for describing BEC properties into a very active field of research [6–12]. In fact, exactly solvable models are expected to provide a significant impact in this area, a view that has been promoted in [13, 14].

Moreover, the recent experimental evidence for Efimov states in an ultracold cesium gas [15] provided a physical ground for the search of tri-atomic homonuclear molecular BECs. Due to the rapid technological developments in the field of ultracold systems, this experiment is just the beginning of the study of tri-atomic molecules [16, 17].

We introduce, in the present paper, a complete family of new solvable models for both heteronuclear and homonuclear tri-atomic molecular BECs obtained through a combination of two Lax operators constructed using special realizations of the $su(2)$ and $su(1, 1)$ algebras, as well as a multibosonic representation of $sl(2)$, discussed recently in [18].

Until now, integrability was shown for those Hamiltonians describing heteronuclear and homonuclear di-atomic molecular BECs [7]. In the heteronuclear case, two different atoms, labeled a and b , can be combined to produce a molecule labeled by c . The different degrees of freedom in such models are represented by canonical creation and annihilation operators $\{a, b, c, \dots, a^\dagger, b^\dagger, c^\dagger, \dots\}$ satisfying the usual commutation relations $[a, a^\dagger] = I$, etc, and commuting among different species. The Hamiltonian for the di-atomic heteronuclear model reads [7, 19]

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

The parameters U_{ij} describe S -wave scattering, μ_i are external potentials and Ω is the amplitude for interconversion of atoms and molecules. In the homonuclear case, two identical atoms labeled a are combined to produce a molecule c [7]. The generalization to the tri-atomic case is not immediate and in particular, for the homonuclear case, a one-mode multibosonic realization of $sl(2)$ is essential.

In what follows, we will show that it is possible to find other integrable generalized molecular BEC models, more specifically, heteronuclear and homonuclear tri-atomic models. We first introduce two models, one with two identical species of atoms and a different one and another model where there are three different species of atoms. In both cases the three atoms can be combined to form a molecule. We then introduce a model consisting of three identical species of atoms, which uses a recently defined multibosonic realization of the $sl(2)$ algebra [18]. We present how these generalized models can be derived from a transfer matrix, thus allowing us to show their integrability by the algebraic Bethe ansatz method. We also obtain their corresponding energies and Bethe ansatz equations.

2. Tri-atomic molecular models

We are going to introduce in this section three different Hamiltonians describing tri-atomic molecular BECs, two for the hetero-atomic case and one for the homo-atomic case. We are considering the coupling parameters real, such that the Hamiltonians are Hermitian. The U parameters describe the S -wave scattering, the μ parameters are the external potentials and Ω is the amplitude for interconversion of atoms and molecules. The operators N_j , $j = a, b, c, d$, are the number operators acting in the Fock space.

2.1. Heteronuclear molecular models

We can construct two models for hetero-atomic molecular BECs, one with two identical species of atoms and a different one and another model where there are three different species of atoms.

2.1.1. Model for two atoms a and one atom b . The Hamiltonian that describes the interconversion of a heterogeneous tri-atomic molecule labeled by c with two atoms of type a and one atom of type b is given by

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

Hamiltonian (2) has two independent conserved quantities,

$$I_1 = N_a + 2N_c, \quad I_2 = N_a - 2N_b, \quad (3)$$

where I_2 is the imbalance between the number of atoms of types a and b . The total number of particles $N = N_a + N_b + 3N_c$ can be written using these conserved quantities,

$$N = \frac{3I_1 - I_2}{2},$$

and it is also conserved.

Writing the S -wave diagonal part of (2) as a combination of the conserved quantities (3) we find

$$\alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \gamma I_1 I_2,$$

where we have used the following identification for the coupling constants:

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

Therefore Hamiltonian (2) can also be written as

$$H = \alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \gamma I_1 I_2 + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \Omega(a^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a a). \quad (4)$$

This form will be used later when we show how Hamiltonian (2) can be derived from a transfer matrix to establish integrability in the general context of the Yang–Baxter algebra.

2.1.2. Model for three different atoms: a , b and c . The Hamiltonian for a model of heterogeneous tri-atomic molecule labeled by d with one atom of type a , one atom of type b and one atom of type c is given by

$$\begin{aligned} H &= U_{aa} N_a^2 + U_{bb} N_b^2 + U_{cc} N_c^2 + U_{dd} N_d^2 \\ &\quad + U_{ab} N_a N_b + U_{ac} N_a N_c + U_{ad} N_a N_d + U_{bc} N_b N_c + U_{bd} N_b N_d + U_{cd} N_c N_d \\ &\quad + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \mu_d N_d + \Omega(a^\dagger b^\dagger c^\dagger d + d^\dagger c b a). \end{aligned} \quad (5)$$

Hamiltonian (5) has three independent conserved quantities,

$$I_1 = N_a + N_d, \quad I_2 = N_b + N_d, \quad I_3 = N_c + N_d. \quad (6)$$

The physical quantities representing the different imbalances between the number of atoms of different species (J_{ab} , J_{ac} , J_{bc}) and the total number of atoms N can be expressed as a combination of these quantities, for example,

$$\begin{aligned} J_{ab} &= N_a - N_b = I_1 - I_2, \\ J_{ac} &= N_a - N_c = I_1 - I_3, \\ J_{bc} &= N_b - N_c = I_2 - I_3, \\ N &= N_a + N_b + N_c + 3N_d = I_1 + I_2 + I_3 \end{aligned}$$

and are conserved as well.

We can write the S -wave diagonal part of the Hamiltonian (5) in terms of a combination of the independent conserved quantities (6) as

$$\alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \delta I_3^2 + \gamma I_1 I_2 + \rho I_1 I_3 + \theta I_2 I_3, \quad (7)$$

where the following identification has been made for the coupling constants

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

Then Hamiltonian (5) can also be written as

$$\begin{aligned} H &= \alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \delta I_3^2 + \gamma I_1 I_2 + \rho I_1 I_3 + \theta I_2 I_3 \\ &\quad + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \mu_d N_d + \Omega(a^\dagger b^\dagger c^\dagger d + d^\dagger c b a). \end{aligned} \quad (8)$$

2.2. Homonuclear-molecular model

In the homogeneous case, we can construct a model describing a tri-atomic molecular BEC, where all atoms are identical.

2.2.1. Model for three atoms a . The Hamiltonian that describes the interconversion of a homogeneous tri-atomic molecule labeled by b with three atoms of type a is given by

$$H = U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{ab}N_aN_b + \rho_a N_a + \rho_b N_b + \Omega(a^\dagger a^\dagger a^\dagger b \alpha_-(N_a) + \alpha_-(N_a) b^\dagger a a a), \quad (9)$$

where $\alpha_-(N_a)$ is a function of N_a (see the next section for more details) that controls the amplitude of interconversion Ω . This indicates that the density of atoms N_a has some influence in the generation of a bound state composed by three identical atoms.

Hamiltonian (9) has one conserved quantity,

$$I = N_a + 3N_b, \quad (10)$$

the total number of particles $N = N_a + 3N_b$.

3. Integrability and the exact Bethe ansatz solution

In this section we will discuss the derivation, the integrability and the Bethe ansatz solution of these models. We begin with the $su(2)$ -invariant R -matrix, depending on the spectral parameter u :

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

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

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

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

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

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

subject to the constraint

$$R_{12}(u - v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u - v). \quad (11)$$

In what follows, we will choose different realizations for the monodromy matrix $\pi(T(u)) = L(u)$ to obtain tri-atomic models for heteronuclear and homonuclear molecular BECs. In this construction, the Lax operators $L(u)$ have to satisfy the relation

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

Then, defining the transfer matrix, as usual, through

$$t(u) = \text{tr} \pi(T(u)) = \pi(A(u) + D(u)), \quad (13)$$

it follows from (11) that the transfer matrix commutes for different values of the spectral parameters; i.e., $[t(u), t(v)] = 0$. Consequently, the models derived from this transfer matrix will be integrable. Let us now particularize this construction for the hetero and homo-atomic molecular cases.

3.1. Heteronuclear-molecular models

We may choose the following realization for the two models of heterostomic molecular BECs,

$$\pi(T(u)) = L(u) = u^- G L^S(u^-) L^K(u^+), \quad (14)$$

with $u^\pm = u \pm \omega$, $G = \text{diag}(+, -)$, the Lax operator $L^S(u)$,

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

in terms of the $su(2)$ Lie algebra with generators S^z and S^\pm subject to the commutation relations

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

and the Lax operator L^K ,

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

in terms of the $su(1, 1)$ Lie algebra with generators K^z and K^\pm subject to the commutation relations

$$[K^z, K^\pm] = \pm K^\pm, \quad [K^+, K^-] = -2K^z. \quad (15)$$

Now, using two different realizations for the $su(2)$ and $su(1, 1)$ algebras, that allow different species in the same Lax operator, we will show how to construct the hetero-atomic Hamiltonians (2) and (5) from the transfer matrix (13) and present their exact Bethe ansatz solution.

3.1.1. Model for two atoms a and one atom b . Using the following realizations for the $su(2)$ and $su(1, 1)$ algebras,

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

it is straightforward to check that the Hamiltonian (4) is related to the transfer matrix $t(u)$ (13) through

$$H = t(u) - \frac{1}{2}u^- \eta + \alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \delta I_1 I_2,$$

where the following identification has been made for the parameters,

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

We can apply the algebraic Bethe ansatz method, using as the pseudovacuum the product state $|0\rangle = |k\rangle \otimes |\phi\rangle$, with $|k\rangle$ denoting the lowest weight state of the $su(1, 1)$ algebra with weight k , i.e., $K^z|k\rangle = k|k\rangle$ and $|\phi\rangle$ denoting the highest weight state of the $su(2)$ algebra with weight m_z , to find the Bethe ansatz equations (BAE)

$$-\frac{(v_i - \omega - \eta m_z)(v_i + \omega + \eta k)}{(v_i - \omega + \eta m_z)(v_i + \omega - \eta k)} = \prod_{i \neq j}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad i, j = 1, \dots, M, \quad (16)$$

and the energies of the Hamiltonian (2) (see, for example, [7, 8])

$$\begin{aligned}
 E &= (u^- - \eta m_z)(u^+ + \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} \\
 &\quad - (u^- + \eta m_z)(u^+ - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i} \\
 &\quad - \frac{1}{2} u^- \eta + \alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \gamma I_1 I_2.
 \end{aligned} \tag{17}$$

3.1.2. *Model for three different atoms: a, b and c.* Using the following realizations for the $su(2)$ and $su(1, 1)$ algebras,

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

it is straightforward to check that the Hamiltonian (8) is related to the transfer matrix $t(u)$ (13) through

$$H(u) = t(u) - u^- \eta + \alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \delta I_3^2 + \gamma I_1 I_2 + \rho I_1 I_3 + \theta I_2 I_3,$$

with the following identification for the parameters,

$$\mu_a = \mu_b = u^- \eta, \quad \mu_c = -\mu_d = -u^+ \eta, \quad \Omega = \eta^2.$$

Applying the algebraic Bethe ansatz method we find the Bethe ansatz equations (BAE)

$$\frac{(v_i - \omega - \eta m_z)(v_i + \omega + \eta k)}{(v_i - \omega + \eta m_z)(v_i + \omega - \eta k)} = \prod_{i \neq j}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad i, j = 1, \dots, M, \tag{18}$$

and the energies of the Hamiltonian (5)

$$\begin{aligned}
 E &= (u^- - \eta m_z)(u^+ + \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} \\
 &\quad - (u^- + \eta m_z)(u^+ - \eta k) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i} \\
 &\quad - u^- \eta + \alpha I_1^2 + \beta I_2^2 + \delta I_3^2 + \gamma I_1 I_2 + \rho I_1 I_3 + \theta I_2 I_3.
 \end{aligned} \tag{19}$$

3.2. Homonuclear-molecular model

In this case we may choose the following realization for the Yang–Baxter algebra

$$\pi(T(u)) = L(u) = \eta^{-1} G L^b(u - \delta - \eta^{-1}) L^a(u + \omega), \tag{20}$$

with $G = \text{diag}(-, +)$ the Lax operator $L^b(u)$,

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

in terms of the canonical boson operators b and b^\dagger with $N_b = b^\dagger b$, subject to the commutation relations

$$[b, \hat{b}] = [b^\dagger, \hat{b}^\dagger] = 0, \quad [b, b^\dagger] = I,$$

and the Lax operator L^A ,

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

in terms of the $sl(2)$ Lie algebra with generators A_0 and A_{\pm} , subject to the commutation relations

$$[A_-, A_+] = A_0, \quad [A_0, A_{\pm}] = \pm 2A_{\pm}. \quad (21)$$

We find from the L operator (20) the following transfer matrix,

$$\begin{aligned} t(u) = & -\eta^{-1} \left(u + \omega + \frac{\eta}{2}A_0 \right) (u - \delta - \eta^{-1} + \eta N_b) \\ & + \eta^{-2} \left(u + \omega - \frac{\eta}{2}A_0 \right) + bA_+ + b^\dagger A_-. \end{aligned} \quad (22)$$

with

$$t(0) = \eta^{-1} \omega (\delta + 2\eta^{-1}) - \omega N_b + \frac{1}{2} (\delta - \eta N_b) A_0 + bA_+ + b^\dagger A_-. \quad (23)$$

There is a one-mode realization of the $sl(2)$ algebra [18]

$$A_0 = \alpha_0(N), \quad A_- = \alpha_-(N)a^\dagger, \quad A_+ = (a^\dagger)^l \alpha_-(N)$$

with

$$\alpha_0(N) = \frac{2}{l}(N - R) + \alpha_0(R) \quad (24)$$

$$\alpha_-(N) = \sqrt{\frac{N!}{(N+l)!} \left(\frac{1}{l}(N - R) + \alpha_0(R) \right) \left(\frac{1}{l}(N - R) + 1 \right)} \quad (25)$$

where $N = a^\dagger a$ and $l \in \mathbb{N}$. The operator R is

$$R = \begin{cases} 0, & \text{if } l = 1 \\ \frac{l-1}{2} + \sum_{m=1}^{l-1} \frac{e^{-2\pi m/l} N}{e^{2\pi m/l} - 1}, & \text{if } l > 1 \end{cases}$$

and acts on the states $\{|n\rangle\}$ as $R|n\rangle = n \bmod l |n\rangle$. The function $\alpha_0(R)$ is a function of the spectrum of R . For $n = r < l$, we have

$$\frac{1}{l}(N - R)|r\rangle = 0|r\rangle \quad (26)$$

with $A_0 = \alpha_0(R)$ such that $\alpha_0(R)|r\rangle = \alpha_0(r)|r\rangle$ and $R|r\rangle = r|r\rangle$. The operator R commutes with a^\dagger and $(a^\dagger)^l$ and so is a conserved quantity for all models presented in this paper.

Now we will apply this realization to show how to construct Hamiltonian (9) from the transfer matrix (22) and present their exact Bethe ansatz solution. Note that direct combinations of $sl(2)$ and $su(1, 1)$ as in the heteronuclear cases do not lead to suitable Lax operators. However, through the present realization we are able to build a viable Lax operator for the homonuclear-molecular model.

For $l = 3$, which is the case of interest here, it is straightforward to check that Hamiltonian (9) is related to the transfer matrix $t(0)$ (23) through

$$H = t(0) \quad (27)$$

where we have the following identification,

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

with $\rho = \rho(R) = 3\alpha_0(R) - 2R$. Let $|0\rangle_b$ denote the Fock vacuum state and let $|r\rangle_A$ denote the lowest weight state of the $sl(2)$ algebra where $r = 0, 1, 2, \dots$ are the eigenvalues of R for $l = 3$ and $N = nl + r$, with $n \in \mathbb{N}$. On the product state $|\Psi\rangle = |r\rangle_A \otimes |0\rangle_b$ we can apply the algebraic Bethe ansatz method for finding the Bethe ansatz equations (BAE)

$$\frac{(1 - \eta v_j + \eta\delta)(v_j + \omega + \frac{\eta}{2}\alpha_0(r))}{v_j + \omega - \frac{\eta}{2}\alpha_0(r)} = \prod_{i \neq j}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad i, j = 1, \dots, M, \quad (28)$$

and the energies of the Hamiltonian (9)

$$E = \eta^{-1}(\delta + \eta^{-1})\left(\omega + \frac{\eta}{2}\alpha_0(r)\right) \prod_{i=1}^M \frac{v_i - \eta}{v_i} + \eta^{-2}\left(\omega - \frac{\eta}{2}\alpha_0(r)\right) \prod_{i=1}^M \frac{v_i + \eta}{v_i}. \quad (29)$$

4. Summary

We have introduced three new integrable models for both homogeneous and heterogeneous tri-atomic molecular BECs obtained through a combination of Lax operators constructed using special realizations of the $su(2)$ and $su(1, 1)$ algebras and a particular one-mode multibosonic representation of $sl(2)$, possibilities that were overlooked in previous studies. The models were solved by means of the algebraic Bethe ansatz method and their corresponding energies and Bethe ansatz equations were derived. We hope that our models may be of physical relevance as long as new experiments are performed in the field, which is just in its initial stage.

Acknowledgments

A F thanks J Links for useful discussions. I R acknowledges FAPERJ (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro). The authors also acknowledge support from CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico).

References

- [1] Cornell E A and Wieman C E 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 875
- [2] Argyll J R and Ketterle W 2002 *Nature* **416** 211
- [3] Zoller P 2002 *Nature* **417** 493
- [4] Papp S B and Wieman C E 2006 *Preprint cond-mat/0607667*
- [5] Damski B, Santos L, Tiemann E, Lewenstein M, Kotochigova S, Julienne P and Zoller P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 110401
- [6] Zhou H-Q, Links J, Gould M and McKenzie R 2003 *J. Math. Phys.* **44** 4690
- [7] Links J, Zhou H-Q, McKenzie R H and Gould M D 2003 *J. Phys. A: Math. Gen.* **36** B63
- [8] Zhou H-Q, Links J, McKenzie R H and Guan X-W 2003 *J. Phys. A: Math. Gen.* **36** L113
- [9] Foerster A, Links J and Zhou H-Q 2003 *Classical and Quantum Nonlinear Integrable Systems: Theory and Applications* ed A Kundu (Bristol: Institute of Physics Publishing) pp 208–233
- [10] Dukelsky J, Dussel G, Esehbag C and Pitel S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 050403
- [11] Ortiz G, Sorriani R, Dukelsky J and Rombouts S 2005 *Nucl. Phys. B* **707** 421

- [11] Kundu A 2007 *Theor. Math. Phys.* **151** 831
- [12] Foerster A and Ragoucy E 2007 *Nucl. Phys. B* **777** 373
- [13] Héritier M 2001 *Nature* **414** 31
- [14] Batchelor M T 2007 *Phys. Today* **60** 36
- [15] Kraemer T *et al* 2006 *Nature* **440** 315
- [16] Braaten E and Hammer H-W 2007 *Astr. Phys., NY* **322** 120
- [17] Eary B D and Greene C 2006 *Nature* **440** 289
- [18] Goliński T, Horowski M, Odziejewicz A and Sławska A 2007 *J. Math. Phys.* **48** 023508
- [19] Durcan M, Foerster A, Links J, Mattel E, Oelkers N and Tonel A 2007 *Nucl. Phys. B* **767** 227

Apêndice C

Artigo 2

Classical and quantum analysis of a heterotriatomic molecular Bose-Einstein-condensate modelA. P. Tonel,¹ C. C. N. Kuhn,² G. Santos,³ A. Foerster,² I. Roditi,⁴ and Z. V. T. Santos⁴¹*CCET da Unipampa, Bagé, RS, Brazil*²*Instituto de Física-UFRGS, Porto Alegre, RS, Brazil*³*Departamento de Física-UFS, São Cristóvão, SE, Brazil*⁴*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF, Rio de Janeiro, Brazil*

(Received 5 November 2008; published 26 January 2009)

We investigate an integrable Hamiltonian modeling a heterotriatomic 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 exhibit 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 behavior of the quantum dynamics, the energy gap, and the ground-state fidelity.

DOI: 10.1103/PhysRevA.79.013624

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

I. INTRODUCTION

The experimental achievement that led to the Bose-Einstein condensates (BECs), using dilute alkali gases at ultracold temperatures [1,2], induced a substantial effort dedicated to the understanding of new properties of BECs. In particular, the development of the techniques used in the production and manipulation of ultracold atoms and molecules [3] has opened the way to another field, the “chemistry” of ultracold systems, i.e., where the atomic constituents of the dilute gas may recombine forming molecules. Such molecular BEC compounds have been obtained by different techniques [4], for instance, by Feshbach resonances [5–7] or photoassociation [8]. There can also occur atom-molecule interactions that must be at least three body in nature [9], bringing up a stimulus and challenges to our physical understanding. Experimental evidence for three-body recombinations [10] as well as for Efimov states [11] provides a physical ground and stimulus for the search of triatomic molecular BECs and for the investigation of their theoretical aspects, which is our main interest.

From the theoretical point of view, ultracold atomic and molecular systems are characterized by their large quantum fluctuations. In this sense, the search for exactly solvable models describing atomic and molecular BEC becomes relevant. Indeed this has become a very active field of research [12–20], and the experimental relevance of these models is currently a very active research subject [21]. Those solvable models are expected to provide a significant impact in this area, a view that has been promoted in [22,23]. Increasing evidence and recent results show that multistomic systems may be interesting and relevant for ultracold atomic-molecular Bose-Einstein condensates. A significant question in this context is whether more complex ultracold molecules could be created than simple dimers [24]. Also, due to the more sophisticated nature of the control of the interatomic interactions, in the case of triatomic molecules, one expects a rich quantum phase structure. Indeed, very recent experimental results confirm the existence of heterotriatomic bosonic tri-

mers in ultracold mixtures [25], which provide us with additional motivation to pursue the present investigation.

In this paper we analyze an integrable model describing a heterotriatomic molecular Bose-Einstein condensate where atomic BECs can combine (in different proportions) to produce a compound with two atoms of the same kind and a third one of a different species. Our model, which has been shown to be solvable in [26], includes besides the interconversion of atoms to molecules and vice versa, a linear interaction corresponding to the external potential and a bilinear interaction corresponding to the scattering between atoms-atoms, atoms-molecules, and molecules-molecules. We start our analysis of this model by a classical treatment where we obtain its phase space determining, in particular, the fixed points. We find that for certain coupling parameters bifurcation of the fixed points occurs, and we can determine a parameter space diagram, which classifies the found fixed points. This diagram is determined for the imbalance of the number of atoms, which allows us to classify it in three distinct cases. Specifically, when the imbalance is equal to zero or is negative there is a spontaneous appearance of additional boundaries in the parameter space (one for the zero case and two for the negative case), some of which can be identified with bifurcations of the minimum of the classical Hamiltonian. We also perform a quantum analysis, where we study the quantum dynamics and make a comparison with the classical results. Here we are interested in studying the ground state of the model, because as actual systems are in ultracold temperature, some insight can be obtained from the ground state. Furthermore, as pointed out before, the presence of large quantum fluctuations makes it interesting to look for the phase structure at zero temperature, the quantum phase transitions. In our case we are able to look for signatures of quantum phase transition. Here we use two definitions: energy gap and ground-state fidelity in order to find a quantum phase pretransition, a term that will be explained later. We observe that the critical points are pinned down in complete agreement with the classical analysis.

The paper is organized as follows. In Sec. II we present our integrable model. Section III is devoted to the classical

analysis where the parameter diagram is obtained. Section IV is devoted to the quantum analysis where we show the quantum dynamics and a study about quantum phase pretransition. Section V is devoted to our conclusions.

II. MODEL

Let us consider the following Hamiltonian describing a heterotriatomic molecular Bose-Einstein condensate with two identical species of atoms, denoted by a , which can be combined with a different type of atom, denoted by b , to produce a molecule labeled by c . In terms of canonical creation and annihilation operators $\{a, b, c, a^\dagger, b^\dagger, c^\dagger\}$ satisfying the usual commutation relations $[a, a^\dagger]=I$, etc., the Hamiltonian reads

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

The parameters U_{ij} describe S -wave scattering, μ_i are external potentials, and Ω is the amplitude for interconversion of atoms and molecules. N_i are the number operators, i.e., $N_a = a^\dagger a$ is the number of atoms type a , $N_b = b^\dagger b$ is the number of atoms type b , and $N_c = c^\dagger c$ is the number of molecules.

The Hamiltonian acts on the Fock space spanned by the (unnormalized) vectors

$$|N_a; N_b; N_c\rangle = (a^\dagger)^{N_a}(b^\dagger)^{N_b}(c^\dagger)^{N_c}|0\rangle, \quad (2)$$

where $|0\rangle$ is the Fock vacuum.

The Hamiltonian above has two independent conserved quantities

$$N = N_a + N_b + 3N_c, \quad J = N_a - 2N_b,$$

where N is the total number of atoms and J is the atomic imbalance. It is convenient to introduce $k=J/N$ as the fractional atomic imbalance. Since there are three degrees of freedom and three conserved quantities, the model is integrable. More details about the integrability of this model, using the Bethe ansatz method, can be found in [26]. In what follows we will investigate this model in detail. Below we begin with a classical analysis of the model and determine the fixed points of the system.

III. CLASSICAL ANALYSIS

Let N_j, θ_j , $j=a, b, c$, be quantum variables satisfying the canonical relations

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

We make a change of variables from the operators j, j^\dagger , $j=a, b, c$, to a number-phase representation through

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

such that the canonical commutation relations are preserved. We perform an additional change of variables,

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

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

such that z and θ are canonically conjugate variables, i.e.,

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

In the limit of large N we can approximate the (rescaled) Hamiltonian by

$$H = \frac{4\Omega N^2}{36} \left[\lambda z^2 + 2(\alpha - \lambda)z + \beta + (z + c_+) \sqrt{(z + c_-)(1 - z)} \cos\left(\frac{6\theta}{N}\right) \right], \quad (3)$$

where we have defined

$$\lambda = \Delta(4U_a + U_b + U_c + 2U_{ab} - 2U_{ac} - U_{bc}),$$

$$\alpha = \Delta \left[4(c_+ + 1)U_a + (c_- + 1)U_b + (c_+ + c_- + 2)U_{ab} - (1 + c_+)U_{ac} - (1 + c_-) \frac{U_{bc}}{2} + \frac{3}{N}(2\mu_a + \mu_b - \mu_c) \right],$$

$$\beta = \Delta \left[4U_a c_+^2 + U_b c_-^2 + U_c + 2U_{ac} c_+ c_- + 2U_{ac} c_+ + U_{bc} c_- + \frac{6}{N}(2\mu_a c_+ + \mu_b c_- + \mu_c) \right],$$

with

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

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

We now regard Eq. (3) as a classical Hamiltonian and investigate the fixed points of the system. The first step is to find Hamilton's equations of motion, which yield

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \theta} = -\frac{4\Omega N}{6} (z + c_+) \sqrt{(z + c_-)(1 - z)} \sin\left(\frac{6\theta}{N}\right),$$

$$\frac{d\theta}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial z} = \frac{4\Omega N^2}{36} \left[2\lambda z + 2(\alpha - \lambda) + \frac{2(z + c_-)(1 - z) + (z + c_+)(1 - z) - (z + c_+)(z + c_-)}{2\sqrt{(z + c_-)(1 - z)}} \right] \times \cos\left(\frac{6\theta}{N}\right). \quad (4)$$

The fixed points of the system are determined by the condition

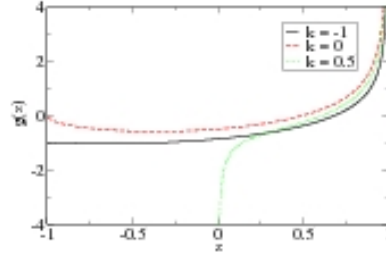


FIG. 1. (Color online) The behavior of the function $g(z)$ for three different values of k .

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

Due to periodicity of the solutions, below we restrict ourselves to $\theta \in [0, N\pi/3]$. It is convenient to define the functions as follows:

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

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

Note that the domain of $g(z)$ is $z \in [-1, 1)$ if $k \in [-2, 0]$ and $z \in (2k-1, 1)$ if $k \in (0, 1)$.

We observe that the fractional atomic imbalance k plays an important role in the behavior of the $g(z)$ function. For $k \leq 0$, $g(z)$ is divergent only at $z=1$, while for the case of $k > 0$, $g(z)$ is divergent at $z=2k-1$ and $z=1$. Since k affects the domain and the shape of the function $g(z)$, this property will affect the type of solutions of Eq. (5). In Fig. 1 we illustrate the behavior of the function $g(z)$ for different values of k . It is, in fact, necessary to treat the cases of $k < 0$, $k=0$, and $k > 0$ separately.

A. Negative case: $-2 \leq k < 0$

Here the domain of $g(z)$ is $z \in [-1, 1)$ and $g(z)$ is divergent at $z=1$, but finite at $z=-1$. This leads to the following classification for the solutions of Eq. (5):

- (1) $\theta=0$ and z is a solution of

$$f(z) = g(z), \quad (6)$$

which can admit zero, one, or two solutions.

- (2) $\theta=N\pi/6$ and z is a solution of

$$f(z) = -g(z), \quad (7)$$

which can admit zero, one, or two solutions.

(3) $z=-c_+$, which vanishes the first equation of Eqs. (4) and reduces the second equation of Eqs. (4) to the expression

$$\lambda = \frac{\alpha}{k+2} + \frac{\sqrt{-3k(k+2)}}{2(k+2)} \cos\left(\frac{6\theta}{N}\right), \quad (8)$$

such that θ is a solution of

$$\cos\left(\frac{6\theta}{N}\right) = -\frac{2\sqrt{-3k(k+2)}}{3k} \left(\lambda - \frac{\alpha}{k+2} \right), \quad (9)$$

for which there are two solutions for $|\frac{2\sqrt{-3k(k+2)}}{3k}(\lambda - \frac{\alpha}{k+2})| < 1$.

B. Zero case: $k=0$

Now we consider the case $k=0$, where the domain of $g(z)$ is $z \in (-1, 1)$ and $g(z)$ is divergent at $z=1$, but finite at $z=-1$, similar to the previous case. This leads to the following classification for the general problem:

- (1) $\theta=0$ and z is a solution of

$$f(z) = g(z), \quad (10)$$

which can admit zero, one, or two solutions.

- (2) $\theta=N\pi/6$ and z is a solution of

$$f(z) = -g(z), \quad (11)$$

which can admit zero, one, or two solutions.

(3) $z=-1$, which vanishes the first equation of Eqs. (4) and reduces the second equation of Eqs. (4) to the following linear equation between the coupling parameters:

$$\lambda = \frac{\alpha}{2}, \quad (12)$$

which can admit just one solution. This result is compatible with that obtained in the previous case by taking the limit $k \rightarrow 0$ in Eq. (8).

C. Positive case: $0 < k \leq 1$

In this case the domain of $g(z)$ is $z \in (2k-1, 1)$ and $g(z)$ is divergent at both extremes of the interval, $z=2k-1$ and $z=1$. Now, a different scenario emerges, compared to the previous two cases. This leads to the following classification for the general problem:

- (1) $\theta=0$ and z is a solution of

$$f(z) = g(z), \quad (13)$$

which can admit one, two, or three solutions.

- (2) $\theta=N\pi/6$ and z is a solution of

$$f(z) = -g(z), \quad (14)$$

which can admit one, two, or three solutions.

We can collect all different types of solutions of Eq. (5) in a parameter diagram, dividing the parameter space into different regions, for each case of k discussed above. For example, for the case of k positive, to construct this diagram, we observe that the boundaries between each region occur when f is the tangent line to $\pm g$; i.e., for values of λ and α such that

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

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

for some z_0 . This requirement determines the boundaries in the parameter space, which are depicted in Fig. 2(c) for $k=0.5$.

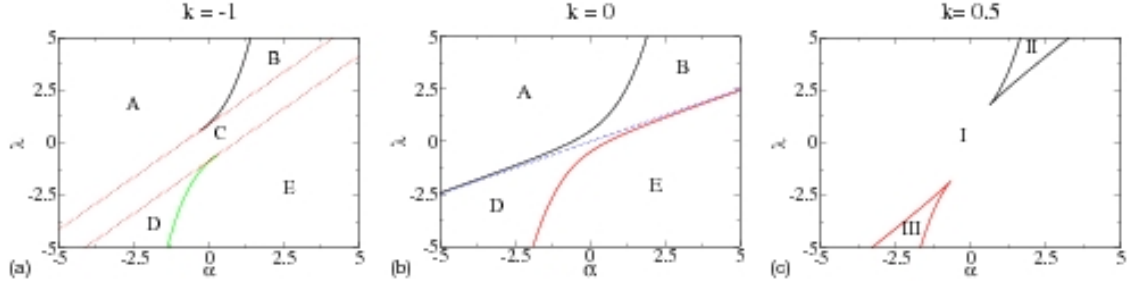


FIG. 2. (Color online) Parameter space diagram identifying the different types of solution for Eq. (5) for different values of $k=-1;0;0.5$. We observe (a) five distinct regions for the negative case; (b) four distinct regions for $k=0$; and (c) three distinct regions for the positive case. In (a) the boundaries are given by $\lambda=[\alpha \mp g(-k-1)]/(k+2)$ while in (b) it is given by $\lambda=\alpha/2$.

As in the case of k positive, we can determine the region boundaries in the parameter space for the other two cases. However, because of the existence of solutions of the form given by Eq. (8), which do not have an analog for positive k , we see the appearance of new boundaries given by the conditions $\lambda=[\alpha \mp g(-k-1)]/(k+2)$ for negative k and $\lambda=\alpha/2$ for $k=0$. The boundaries in parameter space are illustrated in Figs. 2(a) and 2(b) for $k=-1$ and $k=0$, respectively. Notice that the two additional boundaries, which delimit region C, for $k=-1$ are reduced to a unique boundary for $k=0$, which is not present for $k=0.5$. Therefore, we have a different scenario for the parameter space diagram, depending on if the fractional atomic imbalance k is negative, zero, or positive, as illustrated in Fig. 2. Basically, we can summarize the typical behavior of the parameter space diagram as follows: when k is negative, the parameter diagram is divided into five regions: in region A there is no solution for z when $\theta=0$ and one solution for z when $\theta=N\pi/6$. In region B there are two solutions for z when $\theta=0$ and one solution for z when $\theta=N\pi/6$. In region C there is one solution for z when $\theta=0$, one solution for z when $\theta=N\pi/6$, and two solutions for θ when $z=-k-1$. In region D there is one solution for z when $\theta=0$ and two solutions for z when $\theta=N\pi/6$. In region E there is one solution for z when $\theta=0$ and no solution for z when $\theta=N\pi/6$. For the case $k=0$, region C disappears and the phase diagram is left with the four regions A, B, D, and E discussed before. When k is positive the diagram is divided into three regions: in region I there is one solution for z when $\theta=0$ and one solution for z when $\theta=N\pi/6$. In region II there are three solutions for z when $\theta=0$ and one solution for z when $\theta=N\pi/6$. In region III there is one solution for z when $\theta=0$ and three solutions for z when $\theta=N\pi/6$. It is interesting to mention that the fractional atomic imbalance also plays an important role in heterodistomic molecular Bose-Einstein condensates [27–29].

To help visualize the classical dynamics, it is useful to plot the level curves of the Hamiltonian (3). Since the fixed points change the topology of the level curves, qualitative differences can be observed between the different regions. The results are depicted in Fig. 3 for $k=-1$ (on the left), $k=0$ (in the middle), and $k=0.5$ (on the right). For clarity, we use convenient intervals for θ and z .

In Fig. 3(a) we show the level curves of the Hamiltonian (3) for $k=-1$, illustrating the typical behavior for regions A,

B, C, and E (from the top to the bottom). In region A there are local minima at $6\theta/N=\pm\pi$. Besides the minima at $6\theta/N=\pm\pi$, two additional fixed points (a maximum and a saddle point) are apparent in region B occurring at $\theta=0$. In region C there are minima at $6\theta/N=\pm\pi$ and for $\theta=0$ just one fixed point, a maximum. There are also saddle points when $z=0$. In region E just one fixed point, a maximum, occurs for $\theta=0$.

In Fig. 3(b) we show the level curves for $k=0$ for the same regions illustrated in the previous case, except that now instead of region C there is just one straight line separating regions B and D. The behavior here is analogous to the previous case of negative k , with the emergence of a maximum (minimum) when passing from region A to B (E to C).

In Fig. 3(c) we present the level curves of the Hamiltonian (3) for $k=0.5$, illustrating the behavior of regions I, II, III and I (from the top to the bottom). In region I there is a maximal point at $\theta=0$ and a minima at $6\theta/N=\pm\pi$. Two additional fixed points, a saddle and a maximum, occur in region II at $\theta=0$, while two additional fixed points, a saddle and a minimum, occur in region III at $6\theta/N=\pm\pi$ compared to region I.

We observe that the pattern of the level curves is distinct for the cases of k negative and zero compared to the positive case.

In the following sections we will conduct an analysis of the quantum Hamiltonian. We will focus our attention on the case $\lambda=0$; in this way the model has one effective parameter, α . In particular, we will establish that the bifurcation occurring at $(\alpha,\lambda)=(-g(-k-1),0)$ for the negative case and $(\alpha,\lambda)=(0.5,0)$ for $k=0$ can be seen to influence the ground-state properties of the quantum system.

IV. QUANTUM ANALYSIS

We now turn our attention to a quantum treatment of the model, to investigate the nature of the additional threshold couplings for the cases where the fractional atomic imbalance k is negative and zero. In particular, we analyze the Hamiltonian in the *no scattering limit* where $U_{ij}=0$ for all $i,j=a,b,c$,

$$H = \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c + \Omega(\alpha^\dagger a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a a). \quad (15)$$

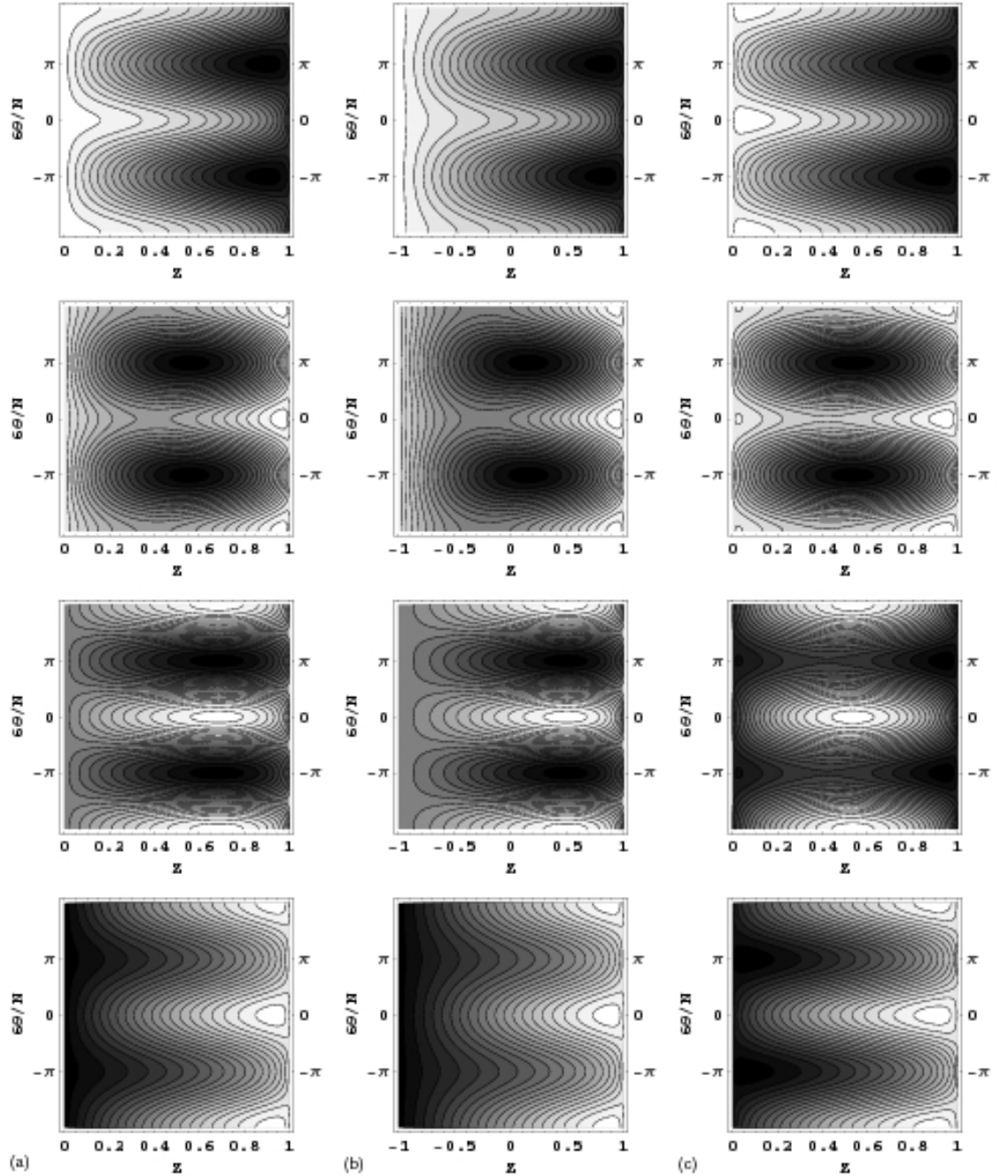


FIG. 3. Level curves for the Hamiltonian (3), where the dark regions indicate lower values than the light regions. Here we use for (a) $k=-1$ on the left, $(\lambda, \alpha)=(0; -1.0), (5; 2.5), (0; 0),$ and $(0; 1.5)$; (b) $k=0$ in the middle, $(\lambda, \alpha)=(0, -1), (2.5, 2.5), (0; 0),$ and $(0, 1.5)$; (c) $k=0.5$ on the right, $(\lambda, \alpha)=(0; -1.5), (5, 2.5), (-5, -2.5),$ and $(0, 1.5)$.

This simplifies substantially the Hamiltonian, however, it remains sufficiently nontrivial to enable us to gain an understanding of the quantum behavior through the quantum dynamics, ground-state expectation value, gap, and fidelity. The

no scattering limit corresponds to the coupling $\lambda=0$ in the classical analysis of Sec. III. With reference to Fig. 2 there are two threshold couplings when k is negative and three threshold couplings for $k=0$. For the case of k negative, one

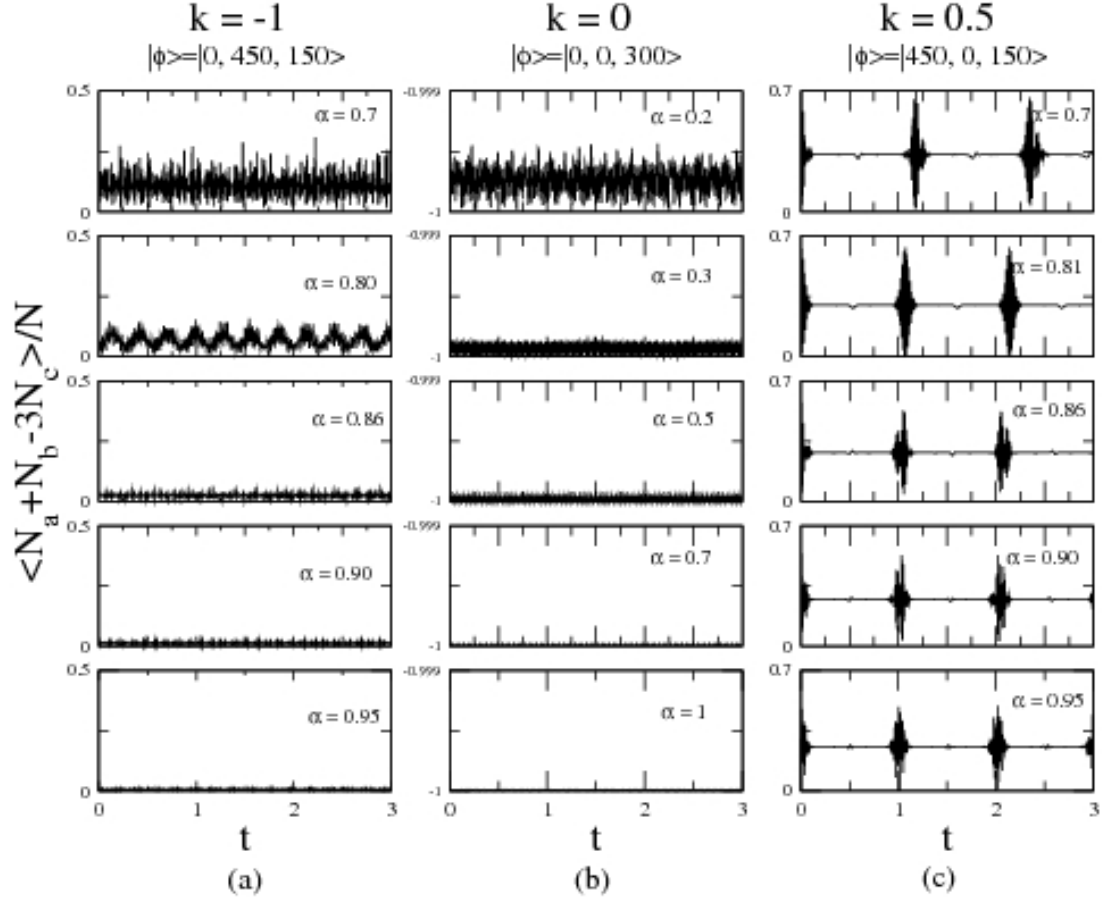


FIG. 4. Time evolution of the expectation value of z for the Hamiltonian (15) with $N=900$, for (a) $k=-1$ and initial state $|0, 450, 150\rangle$. We are using natural units. The oscillations are largely irregular with significantly decreasing amplitude as the point at $\alpha=0.866$ is crossed. This point corresponds to the boundary at $(\alpha, \lambda)=(0.866, 0)$ between regions C and E as shown in Fig. 2(a); (b) $k=0$ and initial state $|0, 0, 300\rangle$. A similar behavior occurs as the point at $\alpha=0.5$ is crossed. This point corresponds to the boundary at $(\alpha, \lambda)=(0.5, 0)$ as shown in Fig. 2(b); (c) $k=0.5$ with initial state $|450, 0, 150\rangle$. The oscillations display collapse and revival behavior with smoothly decreasing amplitude. Here there is no abrupt behavior, indicative of the fact there is no boundary at $\lambda=0$ in Fig. 2(c).

occurs at $(\alpha, \lambda)=(-g(-k-1), 0)$, signifying the bifurcation of the global minimum of the Hamiltonian, while the other occurs at $(\alpha, \lambda)=(g(-k-1), 0)$, signifying the bifurcation of the global maximum. For the specific example of $k=-1$, these thresholds are $(\alpha, \lambda)=(0.866, 0)$ and $(\alpha, \lambda)=(-0.866, 0)$, respectively. For the case $k=0$, there are three bifurcations at $(\alpha, \lambda)=(-0.5, 0), (0, 0), (0.5, 0)$. The case $(\alpha, \lambda)=(-0.5, 0)$ signifies the bifurcation of the global maximum, $(\alpha, \lambda)=(0.5, 0)$ signifies the bifurcation of the global minimum, while $(\alpha, \lambda)=(0, 0)$ signifies the bifurcation of the saddle point. In contrast, there are no bifurcations along the line $\lambda=0$ for the positive case. We focus our attention on the coupling $(\alpha, \lambda)=(0.866, 0)$ for $k=-1$ and $(\alpha, \lambda)=(0.5, 0)$ for $k=0$, as in these cases the bifurcation of the fixed point in phase space is associated with the ground state of the quantum system.

A. Quantum dynamics

In general, the time evolution of any state is given by $|\Psi(t)\rangle=U(t)|\phi\rangle$, where $U(t)$ is the temporal operator, $U(t)=\sum_{m=0}^M|m\rangle\langle m|\exp(-iE_m t)$, $|m\rangle$ is an eigenstate with energy E_m , and $|\phi\rangle$ represents the initial state with $N=N_a+N_b+3N_c$. We adopt the method of directly diagonalizing the Hamiltonian (15) as done in [31,32] and compute the expectation value of $z(t)$ through

$$\langle z(t) \rangle = \frac{1}{N} \langle \Psi(t) | N_a + N_b - 3N_c | \Psi(t) \rangle. \quad (16)$$

In our analysis, for fixed total number of atoms N and fixed atomic imbalance J , we will use the initial state configuration $|0, -J/2, (2N+J)/6\rangle$ for the cases where k is negative and zero and $|J, 0, (N-J)/3\rangle$ for the case where k is

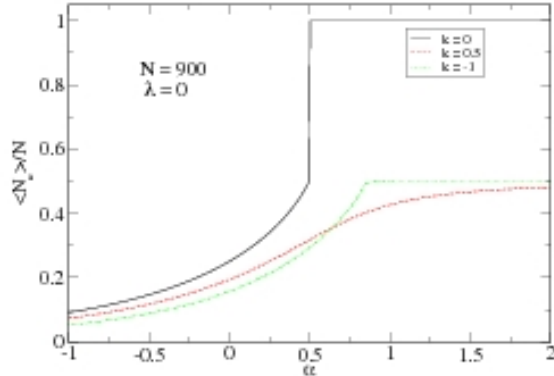


FIG. 5. (Color online) Normalized ground-state expectation value of the molecular number operator $\langle N_c \rangle$ versus the coupling parameter α for the three different cases $k=-1$, 0 , and 0.5 . Here we are using $\Omega=1$ and $N=900$. For the cases $k=-1$ and $k=0$ there is an abrupt change in the expectation value $3\langle N_c \rangle/N$ as the threshold coupling $\alpha=0.866$ (for $k=-1$) and $\alpha=0.5$ (for $k=0$) is reached. In contrast, for $k=0.5$, the expectation value $3\langle N_c \rangle/N$ increases smoothly with α , not exhibiting any abrupt behavior.

positive. We therefore compare the three cases of the quantum dynamics with fractional atomic imbalance negative, zero, and positive.

Results of the expectation value for z are shown in Fig. 4 for the cases of $k=-1$, 0 , and 0.5 . We are using $N=900$ and $J=-900; 0; 450$ for $k=-1; 0; 0.5$, respectively. We fix the parameter $\Omega=1$ and use μ_c as the variable coupling parameter. In terms of the classical variables, this corresponds to varying the parameter α . The qualitative differences are quite apparent. In the case of $k=-1$, Fig. 4(a), we find that for $\alpha < 0.866$ there are irregular oscillations in z . Similar behavior occurs for $\alpha < 0.5$ for $k=0$, Fig. 4(b). As the coupling parameter α is increased across the threshold value at $\alpha=0.866$, for $k=-1$ and $\alpha=0.5$ for $k=0$, the transition to localized oscillations is significant in cases (a) and (b). By comparison the dynamics in Fig. 4(c) for $k=0.5$ shows a collapse and revival of oscillations.

B. Ground-state expectation values

Now using Eq. (16), we compute the normalized ground-state expectation value $3\langle N_c \rangle/N$ for the quantum system as

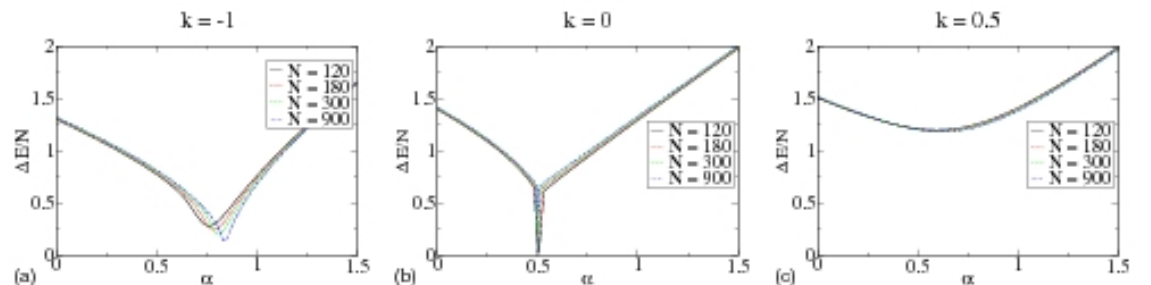


FIG. 6. (Color online) Energy gap between the first excited state and the ground state as a function of α for (a) $k=-1$, (b) $k=0$, and (c) $k=0.5$ and different values of N . We are using $\Omega=1$ and natural units.

the coupling is varied. Results are shown in Fig. 5.

In general, agreement with the classical result is found: As the threshold coupling $\alpha=0.866$ (for $k=-1$) and $\alpha=0.5$ (for $k=0$) is crossed, the maximal possible number of molecules that can be formed for each case (100% for $k=-1$ and 50% for $k=0$) is reached. In both cases, there is an abrupt change in the expectation value $3\langle N_c \rangle/N$ at the threshold point. However, for $k=0$, the expectation value $3\langle N_c \rangle/N$ does not exhibit any sudden change, indicative of the fact that there is no boundary in Fig. 2(c). Therefore, qualitative changes are observed between the cases of k negative and zero and the case of k positive.

C. Quantum phase transitions

In order to gain better insight into the effect of the threshold couplings for the quantum system, in our final analysis we investigate the existence of quantum phase transitions in our model (15).

A quantum phase transition (QPT) is usually defined as a phase transition in the ground state of the system under the variation of some parameter. Basically, there is a sudden change in the structure of the ground state at the QPT, and the properties such as entanglement, correlations, etc. reflect this sudden change [30]. There are different methods to determine a QPT. In particular, we will study the behavior of the energy gap and fidelity of the system to identify a QPT. Here we mention that a QPT is rigorously defined in the thermodynamical limit $N \rightarrow \infty$. For large but finite N the system does display an increasingly sharp distinction between ground-state regions, called quantum prephase transitions (QPPT). The occurrence of a QPPT in a finite system is a precursor for a QPT in the thermodynamic limit. Let us now study the QPPT of the Hamiltonian (15).

1. Energy gap

One possibility to identify a QPPT is through the energy gap, which is defined as the difference between the first excited state and the ground state of the system.

$$\Delta E = E_1 - E_0.$$

In Fig. 6 we plot the gap against the coupling parameter α for the cases of $k=-1$, 0 , and 0.5 using $\Omega=1$ and different values of N . In all cases the energy gap exhibits a minimum,

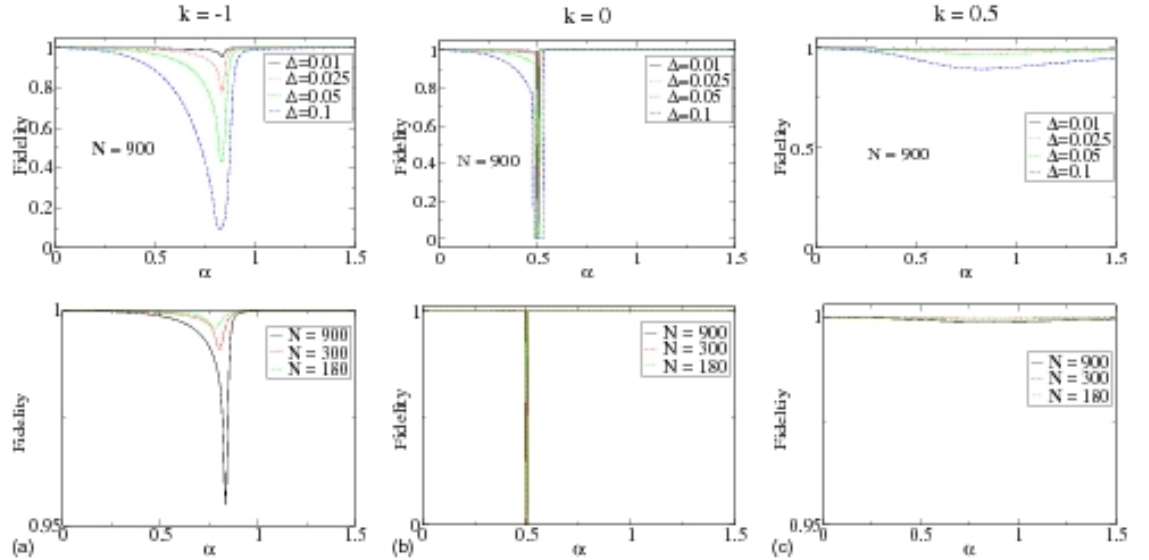


FIG. 7. (Color online) Ground-state wave-function overlaps as a function of the coupling parameter α for (a) $k=-1$, (b) $k=0$, and (c) $k=0.5$ and $\Omega=1$. On the top we are using $N=900$ and different values of Δ . In the bottom we are using $\Delta=0.01$ and different values of N . In all cases the fidelity exhibits a minimum, which is substantially more pronounced for $k=-1$ and $k=0$, compared to $k=0.5$.

which is much more pronounced in the cases of k negative and zero compared to the case where k is positive. We observe that as long as N increases, the point where the gap tends to vanish corresponds to $\alpha=0.866$ for $k=-1$ [Fig. 6(a)] and $\alpha=0.5$ for $k=0$ [Fig. 6(b)], in agreement with the classical analysis. In contrast, when k is positive there is no abrupt variation of the energy gap as shown in Fig. 6(c) and QPPT are not expected.

2. Fidelity

Another possibility to investigate the QPPT is through the behavior of the fidelity, which is a concept widely used in the quantum information theory [33–35]. The fidelity is basically defined as the modulus of the wave-function overlap between two quantum states. Assuming the ground state of the system is nondegenerate, let $\Psi(\alpha)$ denote the unique normalized ground state. For fixed small Δ we define the function fidelity or ground-state wave-function overlap $\mathcal{F}_\Delta(\alpha)$ by

$$\mathcal{F}_\Delta(\alpha) = |\langle \Psi[\alpha(1-\Delta)] | \Psi[\alpha(1+\Delta)] \rangle|,$$

which is symmetric in Δ , bounded between 0 and 1, and satisfies $\mathcal{F}_0(\alpha)=1$. For systems that exhibit a quantum phase transition in the thermodynamic limit, the wave-function overlaps between states in different phases go to zero in this limit. The occurrence of a minimum in the ground-state wave-function overlap in a finite system is then a precursor for a quantum phase transition in the thermodynamic limit. Thus for finite systems we identify quantum phase *pretransitions* at a coupling α for which the fidelity is (locally)

minimal. Figure 7 shows the behavior of the fidelity for (a) $k=-1$, (b) $k=0$, and (c) $k=0.5$ for fixed $N(\Delta)$ and different values of $\Delta(N)$ on the top (bottom). It is clear that the minimum value of $\mathcal{F}_\Delta(\alpha)$, which determines the quantum phase pretransition, tends to occur at $\alpha \approx 0.86$ for $k=-1$ and $\alpha \approx 0.5$ for $k=0$. The distinction between the predicted threshold coupling and the observed pretransition coupling is that the pretransition coupling also occurs for k positive, although for fixed N the minimum of $\mathcal{F}_\Delta(\alpha)$ is substantially more pronounced for k negative and zero compared to k positive. In all instances the value of the minimum decreases with increasing N . We remark that the value of α at which the minimum occurs is independent of Δ , as shown in Fig. 7 (on the top). In our previous classical analysis qualitative differences are only found precisely when k is negative or zero. Here it is clear that the distinguishability of two phases is more reliable also for k negative or zero. We then interpret these results as the emergence of quantum phase boundaries for k negative or zero.

V. CONCLUSION

We have considered a model describing a mixture of two species of atoms in different proportions, which can combine to form a bound molecular state at zero temperature. This heterotristomic molecular Bose-Einstein condensate model has been investigated in detail through a classical and a quantum analysis.

We have found that the fractional atomic population imbalance k , an extra control “knob” characteristic to hetero-

nuclear models, plays an important role in the determination of the phase boundaries in the diagram of parameters in the classical analysis. This property also holds at a quantum level by inspecting the ground-state expectation values and the character of the quantum dynamics of the model. We have also looked for the quantum phase pretransitions in our system and shown that the quantities energy gap and ground-state fidelity are suited for revealing QPPT and pinning down the critical (bifurcation) points.

ACKNOWLEDGMENTS

C.C.N.K. and A.F. thank J. Links and E. Mattei for discussions. A.P.T., A.F., I.R., and Z.V.S.T. would like to thank CNPq-Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico for financial support. I.R. also thanks FAPERJ-Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro for financial support. G.S. would like to thank CAPES-Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior for financial support.

-
- [1] E. A. Cornell and C. E. Wieman, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 875 (2002).
- [2] J. R. Anglin and W. Ketterle, *Nature (London)* **416**, 211 (2002).
- [3] D. J. Heinzen, R. Wynar, P. D. Drummond, and K. V. Kheruntsyan, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5029 (2000).
- [4] P. Zoller, *Nature (London)* **417**, 493 (2002).
- [5] S. B. Papp and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 180404 (2006).
- [6] G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 210402 (2008).
- [7] J. Catani, L. De Sarlo, G. Barontini, F. Minardi, and M. Inguscio, *Phys. Rev. A* **77**, 011603(R) (2008).
- [8] B. Damski, L. Santos, E. Tiemann, M. Lewenstein, S. Kotochigova, P. Julienne, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 110401 (2003).
- [9] J. Herbig, T. Kraemer, M. Mark, T. Weber, C. Chin, H.-C. Nagerl, and R. Grimm, *Science* **301**, 1510 (2003).
- [10] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H.-C. Nagerl, and R. Grimm, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 123201 (2003).
- [11] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H.-C. Nagerl, and R. Grimm, *Nature (London)* **440**, 315 (2006).
- [12] H.-Q. Zhou, J. Links, M. Gould, and R. McKenzie, *J. Math. Phys.* **44**, 4690 (2003).
- [13] J. Links, H.-Q. Zhou, R. H. McKenzie, and M. D. Gould, *J. Phys. A* **36**, R63 (2003).
- [14] H.-Q. Zhou, J. Links, R. H. McKenzie, and X.-W. Guan, *J. Phys. A* **36**, L113 (2003).
- [15] A. Foerster, J. Links, and 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.
- [16] J. Dukelsky, G. G. Dussel, C. Echebag, and S. Pittel, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 050403 (2004).
- [17] G. Ortiz, R. Somma, J. Dukelsky, and S. Rombouls, *Nucl. Phys. B* **707**, 421 (2005).
- [18] A. Kundu, *Theor. Math. Phys.* **151**, 831 (2007).
- [19] A. Foerster and E. Ragoucy, *Nucl. Phys. B* **777**, 373 (2007).
- [20] J. Li, D.-F. Ye, C. Ma, L.-B. Fu, and J. Liu, e-print arXiv:0807.1691.
- [21] X.-J. Liu, H. Hu, and P. D. Drummond, *Phys. Rev. A* **77**, 013622 (2008).
- [22] M. Héliotier, *Nature (London)* **414**, 31 (2001).
- [23] M. T. Batchelor, *Phys. Today* **60** (1), 36 (2007).
- [24] F. Ferlino, S. Knoop, and R. Grimm, e-print arXiv:0809.3920.
- [25] J. Catani (private communication).
- [26] G. Santos, A. Foerster, I. Roditi, Z. Santos, and A. Tonel, *J. Phys. A: Math. Theor.* **41**, 295003 (2008).
- [27] M. Duncan, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, N. Oelkers, and A. Tonel, *Nucl. Phys. B* **767**, 227 (2007).
- [28] L. Zhou, J. Qian, H. Pu, W. Zhang, and H. Y. Ling, *Phys. Rev. A* **78**, 053612 (2008).
- [29] L. Zhou, W. Zhang, H. Y. Ling, L. Jiang, and H. Pu, *Phys. Rev. A* **75**, 043603 (2007).
- [30] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2001).
- [31] A. P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, *J. Phys. A* **38**, 1235 (2005).
- [32] A. P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, *J. Phys. A* **38**, 6879 (2005).
- [33] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000).
- [34] H.-Q. Zhou and J. P. Barjaktarevic, *J. Phys. A* **41**, 412001 (2008).
- [35] P. Buonsante and A. Vezzani, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 110601 (2007).

Referências Bibliográficas

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

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

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

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)