

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Programa de Pós-Graduação em Física - PPG/UFRGS

TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS E EQUAÇÕES DO ANSATZ DE
BETHE PARA O MODELO DE BOSE-HUBBARD DE DOIS SÍTIOS

Diefferson Rubeni da Rosa de Lima

Porto Alegre
Julho de 2010

TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS E EQUAÇÕES DO ANSATZ DE BETHE PARA O MODELO DE BOSE-HUBBARD DE DOIS SÍTIOS¹

Diefferson Rubeni da Rosa de Lima

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

Porto Alegre
Julho de 2010

¹Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Resumo

Neste trabalho nós investigamos o modelo de Bose-Hubbard de dois sítios atrativo sob o ponto de vista do ansatz de Bethe. Este modelo descreve o tunelamento Josephson entre dois condensados de Bose-Einstein. Nós iniciamos estabelecendo a integrabilidade do modelo através da álgebra de Yang-Baxter. Usando uma análise clássica nós obtemos o diagrama de parâmetros do sistema. Nós estudamos então as transições de fase quânticas do modelo usando os conceitos de gap de energia, emaranhamento e fidelidade. Nós encontramos que o ponto crítico obtido utilizando estes conceitos coincide com o ponto fixo de bifurcação obtido na análise clássica. Além disso, nós mostramos que este ponto crítico também pode ser identificado através de uma mudança no comportamento das soluções das equações do ansatz de Bethe do modelo para o estado fundamental.

Abstract

In this work we investigate the attractive two-site Bose Hubbard model from a Bethe ansatz perspective. This model describes Josephson tunneling between two Bose-Einstein condensates. We begin by establishing the integrability of the model through the Yang-Baxter algebra. Using a classical analysis we obtain the phase space fixed points of the system. Then we study the quantum phase transitions of the model using the concepts of energy gap, entanglement entropy and the fidelity. We find that the critical point obtained using these concepts coincides with the bifurcation point obtained in the classical analysis. Moreover, we also show that this critical point can be also identified through a different behaviour of the ground-state solutions of the Bethe ansatz equations.

Sumário

1	Introdução	7
2	Hamiltoniano, integrabilidade e análise clássica	11
2.1	Apresentação do modelo	12
2.1.1	Integrabilidade	13
2.1.2	Particularização do Hamiltoniano: modelo de Bose-Hubbard de dois sítios	16
2.2	Análise clássica	17
2.2.1	Hamiltoniano clássico e equações de movimento	17
2.2.2	Pontos fixos do hamiltoniano	19
2.3	Conclusões	22
3	Transições de Fase Quânticas	23
3.1	Introdução	24
3.2	Gap de Energia	25
3.3	Emaranhamento Quântico	26
3.3.1	Revisão	26
3.3.2	Entropia de emaranhamento do modelo	28
3.4	Fidelidade	30
3.5	Valor Esperado	31
3.6	Conclusões	32
4	Soluções das equações do ansatz de Bethe	33
4.1	Introdução	34
4.2	Solução exata para o hamiltoniano do modelo	34
4.3	Mapeamento do modelo e as equações do ansatz de Bethe (<i>EAB</i>)	35
4.4	Solução numérica para as equações do ansatz de Bethe	36
4.5	Soluções das EAB e TFQ	43
5	Conclusões	46
5.1	Conclusões	47
5.2	Trabalhos em preparação	48

A	Duas versões do ansatz de Bethe	49
A.1	Ansatz de Bethe na forma de produtório	49
A.2	Ansatz de Bethe na forma de somatório	50
A.3	Discussão	52
A.4	Soluções Exatas para o modelo	52
A.4.1	EAB e energias na forma de produtório	53
A.4.2	EAB e energias na forma de somatório	55
B	Análise das soluções exatas e comparação numérica	57
B.1	Ansatz de Bethe na forma de produtório	57
B.2	Ansatz de Bethe na forma de somatório	58

Capítulo 1

Introdução

O ansatz de Bethe foi formulado em 1931 por Hans Bethe para resolver o problema de autovalores para o modelo de Heisenberg isotrópico [1]. A partir do trabalho pioneiro de Bethe, o método foi sucessivamente aprimorado e aplicado com sucesso em diversas áreas no contexto dos sistemas integráveis: Lieb e Lininger [2] resolveram o problema do gás de bósons unidimensional com potencial δ usando o ansatz de Bethe. O modelo de seis vértices foi resolvido por Lieb [3] com a mesma técnica. Devido a Yang [4] e Baxter [5] temos a equação de Yang-Baxter, cuja solução fornece a condição suficiente para a construção de um modelo integrável. A área das soluções exatas e, particularmente, o desenvolvimento matemático da técnica do ansatz de Bethe, recebeu grandes contribuições de Faddeev, Takhtajan e Sklyanin [6], que introduziram o ansatz de Bethe algébrico. Atualmente, a aplicação da técnica do ansatz de Bethe abrange as mais diversas áreas da física teórica, como teoria de campos [7], mecânica estatística [5], física nuclear [8], física da matéria condensada [9], teoria de cordas [10, 11], física atômica e molecular [12], entre outros.

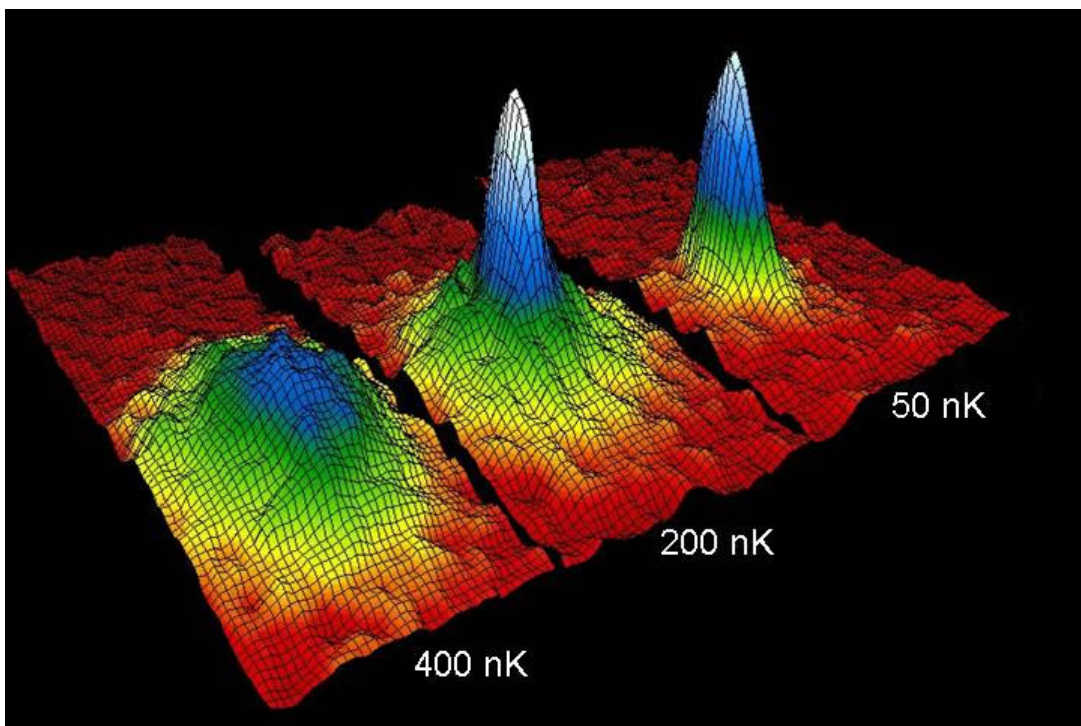


Figura 1.1: Observação da formação de um condensado de Bose-Einstein por técnicas de imagem. A figura mostra uma sequência de imagens da nuvem de ^{87}Rb se expandindo após o desligamento da armadilha magnética. À esquerda temos o gás a uma temperatura de aproximadamente 400 nK acima da temperatura de transição. No centro gás à $T \approx 200\text{ nK}$ imediatamente após o condensado ter se formado (identificado por um pico na densidade de átomos). À direita, temos um condensado quase puro a uma temperatura de $T \approx 50\text{ nK}$. Figura extraída do artigo [14].

Um dos campos de pesquisa mais recentes e ativos é o estudo dos modelos integráveis de condensados de Bose-Einstein (CBE) de gases atômicos e moleculares ultra-resfriados [13].

A condensação de Bose-Einstein foi prevista em 1925 como uma transição de fase quântica em um gás de bósons na qual todos os bósons passam a ocupar o estado fundamental. Desde a predição teórica até a realização experimental, em 1995, foram necessários mais de 70 anos de estudo e aprimoramento das técnicas experimentais. Muitos dos primeiros experimentos utilizaram átomos alcalinos diluídos ultrafrios e atingiram a condensação em temperaturas entre 500 nK e $2\text{ }\mu\text{K}$ à densidades entre 10^{14} e 10^{15} átomos por centímetro cúbico. A Figura 1.1 ilustra a formação de um condensado de Bose-Einstein através do aumento súbito da densidade de átomos de ^{87}Rb . Os eixos no plano xy da figura estão ligados às dimensões espaciais e o eixo z está relacionado com a densidade de átomos. O esquema de cores remete à temperatura dos átomos, indo dos mais quentes (região vermelha) aos mais frios (região branca). Assim, próximo à temperatura de transição (200 nK), a densidade de átomos aumenta bruscamente, evidenciando a formação do condensado.

O estado de um CBE é de natureza puramente quântica; portanto, uma análise de campo médio torna-se inadequada devido às grandes flutuações quânticas inerentes aos sistemas em escala atômica e o desenvolvimento de métodos exatos para tratar o problema é ainda mais fundamental.

O principal objetivo desta dissertação é demonstrar como o método do ansatz de Bethe pode ser empregado no estudo de um modelo exatamente solúvel, de forma rica e elegante, com variadas aplicações. Em particular, nos concentraremos no modelo que descreve qualitativamente os fenômenos de tunelamento e auto-aprisionamento de átomos entre dois condensados previamente formados. O fenômeno de tunelamento (efeito Josephson) foi previsto por B. D. Josephson [15] em 1962 e descreve o tunelamento de elétrons entre dois supercondutores separados por uma fina camada isolante. No caso dos condensados de Bose-Einstein, as técnicas experimentais possibilitam a divisão de um condensado para se obter um duplo poço separado por uma barreira de potencial.

Muitas propriedades físicas podem ser exploradas no estudo dos modelos de CBE, mas nos concentraremos em um ponto especial: o fenômeno da transição de fase quântica (*TFQ*) no limite termodinâmico. Transições de fase quânticas são transições de fase contínuas que ocorrem a temperatura zero como resultado de flutuações quânticas requeridas pelo princípio de incerteza de Heisenberg ao se variar parâmetros externos ao sistema [16]. Uma transição de fase quântica pode se manifestar no do sistema de diversas formas. Nesta dissertação, em particular, vamos analisar com atenção como essas transições afetam o comportamento das soluções das equações do ansatz de Bethe para o modelo descrito. Para isso, resolveremos exatamente o modelo - ou seja, encontraremos o espectro de energias do Hamiltoniano - por uma variação do método do ansatz de Bethe, obtida pelo mapeamento dos geradores da álgebra do sistema em operadores diferenciais, gerando equações diferenciais de segunda ordem para o cálculo dos autovalores, com soluções polinomiais. Então resolveremos as equações do ansatz de Bethe numericamente

para o estado fundamental e, com essas informações, avaliaremos como uma transição de fase quântica influencia a distribuição das soluções numéricas. Isso nos levará a propor que um comportamento abrupto na distribuição das raízes das equações do ansatz de Bethe pode ser usado como um indicativo de uma *TFQ*.

O formato desta dissertação é o seguinte: começaremos no capítulo 2 com a descrição do modelo a ser estudado, e estabeleceremos sua integrabilidade. Faremos uma análise clássica e encontraremos os pontos fixos do hamiltoniano, a partir dos quais construiremos o diagrama de parâmetros. O capítulo 3 fará uma breve revisão sobre os diversos métodos para a determinação dos pontos de transição de fase quântica. A seguir, aplicaremos estes métodos no estudo do modelo para obter os pontos de transição de fase quântica do sistema. Finalizaremos o capítulo estabelecendo a conexão entre a transição de fase quântica e o valor esperado do número de partículas nos condensados, com o objetivo de interpretar fisicamente a transição. No capítulo 4 resolveremos as equações do ansatz de Bethe para o estado fundamental do modelo e analisaremos a conexão entre estas soluções e o comportamento macroscópico do sistema, em particular as *TFQ*. A maior parte dos resultados apresentados neste capítulo é original e constitui a contribuição do autor para a área. As conclusões são apresentadas no capítulo 5.

Capítulo 2

Hamiltoniano, integrabilidade e análise clássica

2.1 Apresentação do modelo

Recentemente, modelos de condensados de Bose-Einstein (CBE) têm sido amplamente estudado [17, 18, 19]. Estes modelos ganharam popularidade devido às realizações experimentais, incluindo experimentos envolvendo tunelamento e auto-aprisionamento de átomos entre condensados, a interconversão de átomos em moléculas e vice-versa em condensados atômico-moleculares, o efeito transistor envolvendo três condensados, entre outros. Em particular, o modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson é de especial interesse para o nosso estudo. O Hamiltoniano mais geral que descreve este modelo é dado por [20]:

$$H = U_{11}N_1^2 + U_{12}N_1N_2 + U_{22}N_2^2 + \mu_1N_1 + \mu_2N_2 - \frac{\epsilon}{2} \left(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 \right), \quad (2.1)$$

onde a_i, a_i^\dagger são os operadores de destruição e criação de átomos no condensado i , ($i = 1, 2$), respectivamente, associados às álgebras de Heisenberg com relações de comutação dadas por

$$\left[a_i, a_j^\dagger \right] = \delta_{ij}, \quad \left[a_i, a_j \right] = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger \right] = 0, \quad \left[N_i, a_j \right] = -\delta_{ij}a_i, \quad \left[N_i, a_j^\dagger \right] = \delta_{ij}a_i^\dagger,$$

onde $N_i = a_i^\dagger a_i$, $i = 1, 2$, são os operadores número de átomos em cada condensado. O espaço de Hilbert dos estados quânticos é gerado pelos vetores

$$|N_1, N_2\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{N_1} (a_2^\dagger)^{N_2}}{\sqrt{N_1! N_2!}} |0, 0\rangle,$$

onde $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$ e $|0, 0\rangle$ é o vácuo do espaço de Fock. Como o Hamiltoniano (2.1) não depende explicitamente do tempo e comuta com o número total de átomos $N = N_1 + N_2$, temos que N é conservado. Os parâmetros U_{ij} denotam os termos de interação do tipo átomo-átomo nos condensados. Os μ_i 's são os potenciais externos e ϵ é a amplitude de tunelamento dos átomos entre um condensado e outro.

Na próxima seção vamos mostrar que este modelo é integrável, seguindo o trabalho de *J. Links et al* [20].

2.1.1 Integrabilidade

Um dos grandes atrativos deste modelo é o fato de se tratar de um modelo integrável. Na mecânica clássica, é bem conhecido o conceito de integrabilidade devido a Liouville: o Hamiltoniano clássico de um sistema de dimensão finita é dito integrável se possui um conjunto de integrais de movimento independentes e comutativas com respeito aos parênteses de Poisson

$$\{I_j, I_k\} = 0.$$

O número total de integrais de movimento (incluindo o Hamiltoniano) deve ser igual a metade da dimensão do espaço de fase [21]. Vamos estender essa definição para o domínio quântico: nós desejamos construir um operador $t(u)$, onde $u \in \mathbb{C}$ é chamado *parâmetro espectral*, que age sobre algum espaço vetorial que representa o espaço de Hilbert dos estados físicos. Além do mais, nós esperamos que

$$[t(u), t(v)] = 0, \quad \forall u, v \in \mathbb{C}. \quad (2.2)$$

Existem duas consequências importantes da equação (2.2): a primeira é que $t(u)$ pode ser diagonalizado independentemente de u , tal que os autovetores de $t(u)$ não dependam de u . Esta é a característica que torna o método algébrico do ansatz de Bethe viável. Segundo, $t(u)$ comuta com todas as suas derivadas, ou seja, tomando a expansão em série,

$$t(u) = \sum_{i=0}^{\infty} \zeta_i u^i,$$

segue que

$$[\zeta_i, \zeta_j] = 0, \quad \forall i, j.$$

Então, para todo Hamiltoniano expresso como uma função dos operadores ζ_i , cada ζ_i representará uma constante de movimento, uma vez que ele comutará com o Hamiltoniano. Quando o número de quantidades independentes conservadas é igual ao número de graus de liberdade do sistema, o modelo é dito integrável.

A teoria dos sistemas quânticos exatamente solúveis começa com a definição de uma álgebra τ_R , chamada *álgebra de Yang-Baxter*, descrita em termos dos geradores $T_i^j(u)$, $i, j \in \{1, \dots, d\}$, que podem ser considerados os elementos de uma matriz quadrada $d \times d$, $T(u)$, chamada *matriz de monodromia*. A álgebra τ_R é gerada pelas relações quadráticas

$$\sum_{j,l=1}^d R_{jl}^{ik}(u-v) T_p^j(u) T_q^l(v) = \sum_{j,l=1}^d T_j^k(v) T_l^i(u) R_{pq}^{lj}(u-v),$$

onde R_{jl}^{ik} dá as constantes de estrutura da álgebra que podem ser consideradas como os elementos de uma matriz quadrada $d^2 \times d^2$, chamada *matriz-R*. Usando notação matricial,

$$R_{12}(u-v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u-v). \quad (2.3)$$

Impondo que τ_R seja uma álgebra associativa, as constantes de estrutura devem satisfazer a relação de consistência

$$R_{12}(u-v)R_{13}(u-\omega)R_{23}(v-\omega) = R_{23}(v-\omega)R_{13}(u-\omega)R_{12}(u-v), \quad (2.4)$$

conhecida como *equação de Yang-Baxter*. Portanto, a equação de Yang-Baxter surge naturalmente ao impormos a associatividade da álgebra τ_R . Esta equação também aparece em diversos contextos, como na mecânica estatística clássica bi-dimensional [5] e teoria do espalhamento [22].

Pode-se demonstrar que o traço $t(u)$ da matriz $T(u)$,

$$t(u) = \sum_{i=1}^d T_i^i(u), \quad (2.5)$$

cria uma família comutativa de operadores, considerada como as integrais de movimento de algum sistema quântico integrável.

Para fixar idéias e posteriormente provar a integrabilidade do hamiltoniano (2.1), vamos trabalhar com uma matriz- R invariante sob $gl(2)$ na forma

$$R(u) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(u) & c(u) & 0 \\ 0 & c(u) & b(u) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

onde os elementos $b(u)$ e $c(u)$ são funções de um parâmetro espectral “ u ” e dados por $b(u) = \frac{u}{u+\eta}$, $c(u) = \frac{\eta}{u+\eta}$ e η é um parâmetro complexo arbitrário. A matriz é invariante sob $gl(2)$ no sentido que

$$[R(u), g \otimes g] = 0,$$

onde g é qualquer matriz 2×2 . Pode-se mostrar que esta matriz satisfaz a álgebra de Yang-Baxter (2.4). Nesse caso, a matriz de monodromia é uma matriz 2×2 dada por

$$T(u) = \begin{pmatrix} T_1^1(u) & T_2^1(u) \\ T_1^2(u) & T_2^2(u) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

e o operador $t(u)$ pode ser escrito como

$$t(u) = A(u) + D(u). \quad (2.8)$$

Esta matriz deve ser escolhida de forma tal que a álgebra de Yang-Baxter para a matriz de monodromia (2.3) seja satisfeita. A conexão entre o modelo para um sistema quântico e o método algébrico do ansatz de Bethe é feita por meio da escolha de uma representação para os geradores da álgebra τ_R . No método algébrico do ansatz de Bethe, as representações da álgebra τ_R atuam sobre um espaço vetorial V , o espaço dos estados físicos, são denotadas por π e chamadas *operadores-L* ou *operadores-Lax*:

$$L(u) = \pi(T(u)) = \begin{pmatrix} \pi(A(u)) & \pi(B(u)) \\ \pi(C(u)) & \pi(D(u)) \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Portanto, podemos representar o operador $t(u)$ como

$$t(u) = \pi(\text{tr}T(u)) = \pi(A(u) + D(u)) = \text{tr}L(u). \quad (2.10)$$

Chamaremos a representação do operador $t(u)$ como *matriz de transferência*.

Para construir um modelo específico, devemos determinar as representações da álgebra τ_R . No caso específico do modelo (2.1) a ser estudado, vamos utilizar a seguinte realização escrita em termos dos operadores bosônicos (a, a^\dagger) sujeitos à álgebra de Heisenberg:

$$L_i^a(u) = \begin{pmatrix} (1 + \eta u)I + \eta^2 N_i & \eta a_i \\ \eta a_i^\dagger & I \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

onde $N = a^\dagger a$. Em termos dessa representação temos

$$L(u) = \eta^{-2} L_1^a(u - \eta^{-1} + \omega) L_2^a(u - \eta^{-1} - \omega). \quad (2.12)$$

Uma vez que $L(u)$ satisfaz a relação

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

é fácil verificar que as relações da álgebra de Yang-Baxter (2.3) são obedecidas. A partir da definição (2.10) para a matriz de transferência temos, explicitamente,

$$t(u) = u^2 + \eta u N + \eta^2 N_1 N_2 - \eta(N_1 - N_2)\omega(N + I) - \omega^2(N + I) + a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2 + \eta^{-2}. \quad (2.13)$$

Agora, é direto mostrar que o Hamiltoniano (2.1) para dois CBE acoplados pode ser expresso a partir da matriz de transferência $t(u)$ e sua derivada como

$$H = -\frac{\epsilon}{2} \left(t(u) - \eta^2 + \left(\alpha \frac{1}{\eta} t'(0) + \beta \right)^2 - \sigma t'(0) - \delta \frac{1}{\eta} (t'(0))^2 \right), \quad (2.14)$$

onde usamos

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

e

$$\eta^2 = \frac{2(U_{11} + U_{22} - U_{12})}{\epsilon}, \quad \alpha = \frac{U_{11} - U_{22}}{\eta\epsilon}, \quad \beta = \frac{\mu_1 - \mu_2}{\eta\epsilon}, \quad \sigma = \frac{\mu_1 + \mu_2}{\eta\epsilon}, \quad \delta = \frac{U_{11} + U_{22}}{\eta\epsilon}.$$

Portanto, conseguimos expressar o Hamiltoniano em termos do operador matriz de transferência e suas derivadas e, uma vez que é fácil verificar que $[t(u), t(v)] = 0$, concluímos que o modelo é integrável.

2.1.2 Particularização do Hamiltoniano: modelo de Bose-Hubbard de dois sítios

Para uma escolha particular dos parâmetros U 's e μ 's

$$U_{11} = U_{22} = -\frac{U_{12}}{2} = \frac{k}{8},$$

$$\mu_1 = -\mu_2 = -\frac{\mu}{2},$$

podemos escrever o hamiltoniano (2.1) como

$$H = \frac{k}{8} (N_1 - N_2)^2 - \frac{\mu}{2} (N_1 - N_2) - \frac{\epsilon}{2} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1). \quad (2.15)$$

Este hamiltoniano é conhecido como *modelo para dois condensados de Bose-Einstein acoplados* ou *modelo de Bose-Hubbard de dois sítios*. Apesar de sua aparente simplicidade, o modelo captura aspectos físicos importantes, descrevendo, por exemplo, o efeito de tunelamento e auto-aprisionamento entre dois condensados, em acordo qualitativo com os experimentos. Ele foi proposto inicialmente por A. Legget [17] e estudado em [23, 24, 25]. Acima, a constante de acoplamento k controla o termo de interação entre átomos, que pode ser atrativa ($k < 0$) ou repulsiva ($k > 0$). μ é o potencial externo e que corresponde a uma assimetria entre os condensados e ϵ é o acoplamento para o tunelamento. A mudança $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ corresponde à transformação unitária

$$a_1 \rightarrow a_1, \quad a_2 \rightarrow -a_2,$$

enquanto que a mudança $\mu \rightarrow -\mu$ corresponde a

$$a_1 \rightarrow a_2.$$

Para dois sistemas com valores fixos de μ e ϵ e diferindo apenas pelo sinal de k , o espectro de energia é totalmente equivalente a menos de um sinal. Nosso objeto de estudo será a energia do estado fundamental para o caso atrativo através da análise da solução exata para o modelo.

2.2 Análise clássica

Nesta seção vamos fazer uma análise clássica do hamiltoniano (2.15), seguindo os trabalhos com o objetivo de determinar algumas propriedades físicas do modelo. Posteriormente faremos uma conexão entre os resultados clássicos obtidos, os pontos fixos de bifurcação do modelo e os pontos críticos numa análise quântica.

2.2.1 Hamiltoniano clássico e equações de movimento

Vamos construir o análogo clássico ao hamiltoniano (2.15), seguindo os trabalhos [23, 26]. Sejam N_j , ϕ_j , ($j = 1, 2$) operadores quânticos satisfazendo as relações de comutação canônicas

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

Uma vez que

$$[e^{i\phi_j}, N_k] = \delta_{jk}e^{i\phi_j} \implies e^{i\phi_j} N_j = (N_j + 1) e^{i\phi_j},$$

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

$$a_j = e^{i\phi_j} \sqrt{N_j}, \quad (2.16)$$

$$a_j^\dagger = \sqrt{N_j} e^{-i\phi_j}, \quad (2.17)$$

de forma que as relações canônicas de Heisenberg sejam preservadas. Utilizando as transformações (2.16) e (2.17) e tomando o limite clássico com N grande, porém finito, podemos escrever o hamiltoniano como

$$H(z, \phi) = \frac{\epsilon N}{2} \left(\frac{\lambda}{2} z^2 - \beta z - \sqrt{1 - z^2} \cos \left(\frac{2\phi}{N} \right) \right), \quad (2.18)$$

onde

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

representa a diferença do número relativo de átomos nos condensados e

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

representa uma diferença de fase entre os dois condensados. Note que estas variáveis são canonicamente conjugadas, ou seja,

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

Também definimos

$$\lambda = \frac{kN}{2\epsilon}, \quad \beta = \frac{\mu}{\epsilon}. \quad (2.19)$$

Note que o hamiltoniano (2.18) obedece as simetrias

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = -H\left(z, \phi + \pi \frac{N}{2}\right)\Big|_{-\lambda, -\beta}, \quad (2.20)$$

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = -H\left(z, \phi + \pi \frac{N}{2}\right)\Big|_{-\lambda, \beta}, \quad (2.21)$$

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = H(-z, \phi)|_{\lambda, -\beta}, \quad (2.22)$$

$$H(z, \phi)|_{\lambda, \beta} = H(z, -\phi)|_{\lambda, \beta}. \quad (2.23)$$

A partir das simetrias (2.22) e (2.23) observamos que, para o caso particular $\beta = 0$, o hamiltoniano (2.18) é simétrico em relação à origem do espaço de fase. Além disso, devido à simetria (2.21), podemos considerar apenas $\lambda \leq 0$ ou $\lambda \geq 0$. Como estamos interessados em discutir as transições de fase quânticas, que ocorrem para o caso atrativo ($k < 0$), vamos nos restringir a escolha $\lambda \leq 0$.

2.2.2 Pontos fixos do hamiltoniano

A partir do hamiltoniano (2.18) nós podemos derivar as equações de movimento da forma usual. Nós encontramos

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\epsilon N}{2} \left(\lambda z - \beta + \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \left(\frac{2\phi}{N} \right) \right), \quad (2.24)$$

$$\dot{z} = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = -\epsilon \left(\sqrt{1-z^2} \sin \left(\frac{2\phi}{N} \right) \right). \quad (2.25)$$

Os pontos fixos do hamiltoniano (2.18) são dados pela condição

$$\dot{z} = 0 \text{ e } \dot{\phi} = 0.$$

Para que tenhamos $\dot{z} = 0$ é necessário que

$$z = \pm 1 \text{ ou } \phi = \frac{N\pi}{2}n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Por outro lado, para que tenhamos $\dot{\phi} = 0$, a relação abaixo deve ser satisfeita

$$\lambda z - \beta = -\frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \left(\frac{2\phi}{N} \right).$$

Assim, a segunda condição exige que $z \neq \pm 1$. Portanto, teremos pontos fixos em $\phi = \frac{N\pi}{2}n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Uma vez que as soluções são periódicas, é suficiente analisar os casos $n = 0$ e $n = 1$. Dessa forma, somos levados à seguinte classificação:

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

$$\lambda z - \beta = -\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}, \quad (2.26)$$

que pode apresentar uma, duas ou três soluções reais para $\lambda < 0$ - veja a Figura 2.1.

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

$$\lambda z - \beta = \frac{z}{\sqrt{1-z^2}}, \quad (2.27)$$

que apresenta apenas uma solução real para $\lambda < 0$ - veja a Figura 2.2.

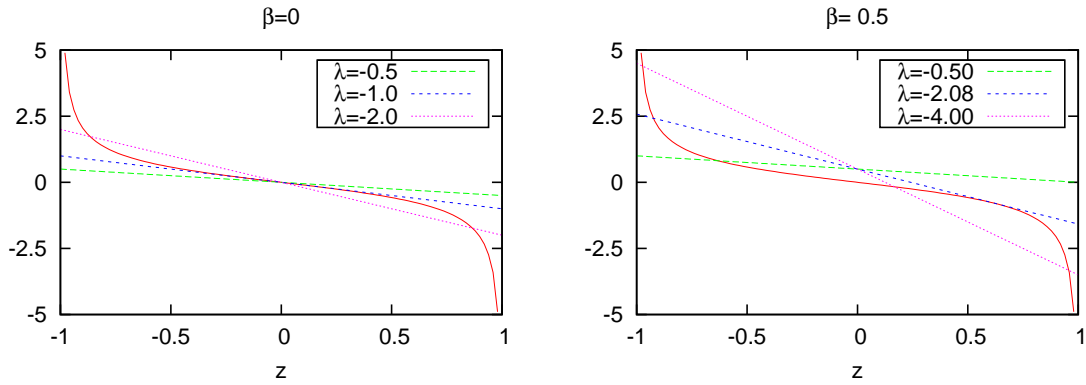


Figura 2.1: Solução gráfica da equação transcendental (2.26) para $\lambda < 0$. As intersecções das retas (lado esquerdo da eq. (2.26)) com a curva (lado direito da eq. (2.26)) para diferentes valores de λ representam as soluções para cada caso. Para $\beta = 0$ temos uma solução para $0 \geq \lambda \geq -1$ e três soluções para $\lambda < -1$. Para $\beta = 0.5$ temos uma solução para $\lambda > -2.08$, duas soluções para $\lambda = -2.08$ e três soluções para $\lambda < -2.08$.

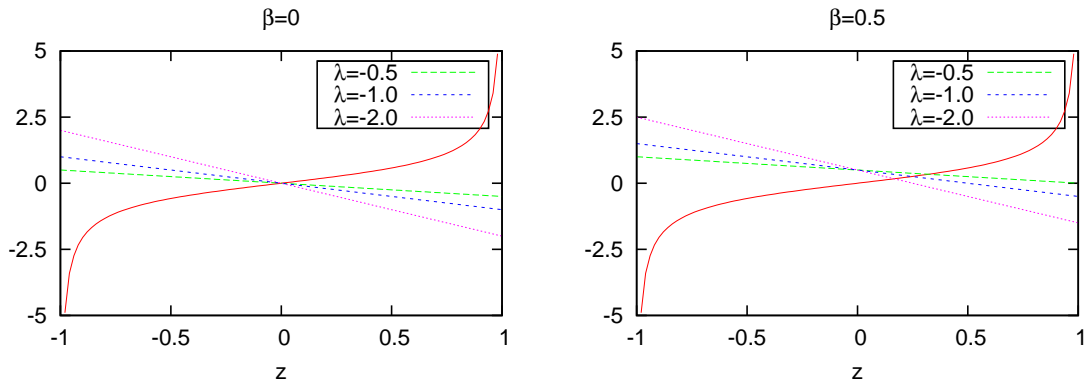


Figura 2.2: Solução gráfica da equação transcendental (2.27) para $\lambda < 0$. As intersecções das retas (lado esquerdo da eq. (2.27)) com a curva (lado direito da eq. (2.27)) para diferentes valores de λ representam as soluções para cada caso. Tanto para $\beta = 0$ quanto para $\beta \neq 0$ temos apenas uma solução real para qualquer λ .

A variação do número de soluções da equação (2.26) em função das variáveis λ e β , permite-nos dividir o espaço de parâmetros em duas regiões. Considerando $f(z) = \lambda z - \beta$ e $g(z) = z(1 - z^2)^{-\frac{1}{2}}$, a fronteira entre as regiões ocorre quando $f(z)$ é a linha tangente a $g(z)$ em algum valor z_0 . Uma análise um pouco mais criteriosa mostra que isso ocorre quando $\lambda = g'(z_0) = (1 - z_0^2)^{-\frac{3}{2}}$. Exigindo que $f(z_0) = g(z_0)$, encontramos a relação

$$\lambda = - \left(1 + |\beta|^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.28)$$

que determina a fronteira. Representamos este resultado na Figura 2.3 a seguir:

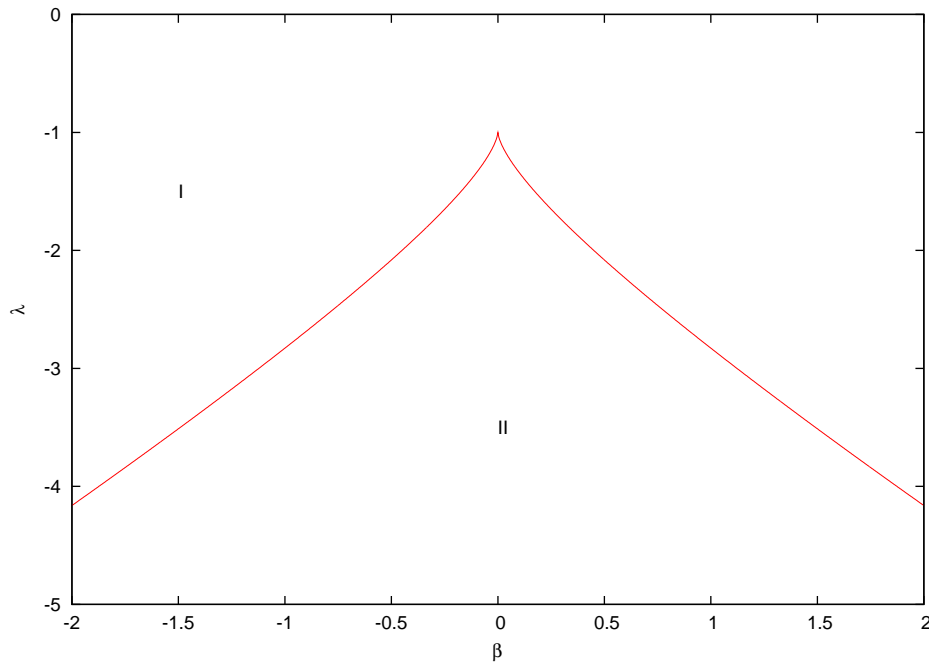


Figura 2.3: Diagrama no espaço de parâmetros identificando os tipos diferentes de soluções para a equação transcendental (2.26).

Para cada região, temos:

- Região I: Temos apenas uma solução real para a qual o hamiltoniano atinge um mínimo local;
- Região II: Temos três soluções reais. Devido à simetria (2.21), para $\beta = 0$, vemos que duas soluções sempre são simétricas em relação a $z = 0$. Estas duas soluções são mínimos locais do hamiltoniano. A outra solução é um ponto de sela localizado em $z = 0$. Quando o potencial externo é ligado, $\beta \neq 0$, a simetria das soluções em relação a $z = 0$ é quebrada. Sobre a fronteira (2.28) temos duas soluções para $\lambda \neq -1$ e uma solução para $\lambda = -1$ e $\beta = 0$.

É importante salientar que na ausência de potencial externo ($\mu = \beta = 0$) temos um ponto de bifurcação dado por $\lambda_0 = -1$. Este caso será discutido em detalhes nos próximos capítulos.

2.3 Conclusões

Neste capítulo apresentamos o hamiltoniano que descreve o tunelamento de átomos entre dois condensados de Bose-Einstein e verificamos sua integrabilidade. A análise clássica do modelo permitiu obter os pontos fixos do Hamiltoniano e, dessa análise, construímos o diagrama de parâmetros. Na ausência de potencial externo, a linha de bifurcação no espaço de parâmetros se reduz a um ponto de bifurcação em $\lambda_0 = -1$.

Capítulo 3

Transições de Fase Quânticas

3.1 Introdução

Foi conjecturado por *Milburn et al* em 2005 [27] que quando se encontra uma bifurcação do tipo forquilha na análise clássica dos pontos fixos do hamiltoniano, a entropia de emaranhamento do estado fundamental tem um máximo próximo a este ponto de bifurcação. Posteriormente, foi discutido em [27, 28] que pontos fixos da análise clássica podem ser usados para identificar transições de fase quânticas em um nível geral, independente da natureza da bifurcação. Vimos no capítulo anterior que o modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson exhibe um ponto de bifurcação, sendo, portanto, um candidato natural para o estudo do emaranhamento e transições de fase quânticas. O emaranhamento quântico, que possui aplicações na teoria quântica da informação e em tecnologias emergentes de computação quântica e tele-transporte quântico [29], pode ser empregado na identificação de *Transições de Fase Quânticas (TFQ)*. *TFQ* são transições de fase contínuas que ocorrem a temperatura zero como resultado de flutuações quânticas requeridas pelo princípio de incerteza de Heisenberg ao se variar parâmetros externos ao sistema [16]. De forma simples, o valor do parâmetro para o qual o emaranhamento apresenta um máximo ou uma mudança abrupta de comportamento identifica o parâmetro crítico de uma TFQ [30]. Entre os diversos modelos estudados através do conceito de emaranhamento podemos citar: modelos de spin [31], modelos de férmions fortemente correlacionados [30], modelo de Bose-Hubbard [32] e modelos de spin-bósons [33].

Outros conceitos, como *Fidelidade Quântica* e *Gap de Energia*, também podem ser empregados na identificação de TFQ. A forma tradicional de se identificar uma TFQ é através do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental. O valor do parâmetro para o qual o gap se anula ou apresenta um mínimo identifica o parâmetro crítico da TFQ [16]. A fidelidade, ou ainda, função quântica de fidelidade, é uma medida do “fechamento” (em inglês, *closeness*) de/entre dois estados quânticos no contexto da teoria de informação quântica. Uma TFQ fica claramente definida através da mudança brusca de comportamento da função fidelidade. O ponto onde a fidelidade exhibe um mínimo define o parâmetro crítico de uma TFQ [32]. Usando o conceito de fidelidade foram estudados, por exemplo, o modelo de Bose-Hubbard [32], o modelo de Dike e cadeia de spin XY [34], e um modelo que descreve um condensado de Bose-Einstein atômico-molecular com átomos iguais [35] e distintos [36].

A seguir faremos um estudo das TFQ utilizando os conceitos de gap, emaranhamento e fidelidade para o Hamiltoniano de um sistema de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson estudado no capítulo anterior.

3.2 Gap de Energia

A maneira tradicional de se caracterizar transições de fase quânticas é pelo estudo do gap de energia ΔE , definido como a diferença de energia entre o primeiro estado excitado $E^{(1)}$ e o estado fundamental $E^{(0)}$ do hamiltoniano, isto é,

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

Uma transição de fase quântica ocorre quando o gap de energia se anula no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$ [16].

Os níveis de energia do hamiltoniano variam à medida que variamos os parâmetros k , μ e ϵ . Assim, fixando dois parâmetros e variando o terceiro, o valor deste parâmetro para o qual o gap de energia se anula no limite termodinâmico é o valor crítico. Continuando a análise do caso atrativo ($k < 0$), consideraremos o comportamento do gap de energia em função da razão entre os parâmetros $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$ na ausência do potencial externo ($\mu = 0$).

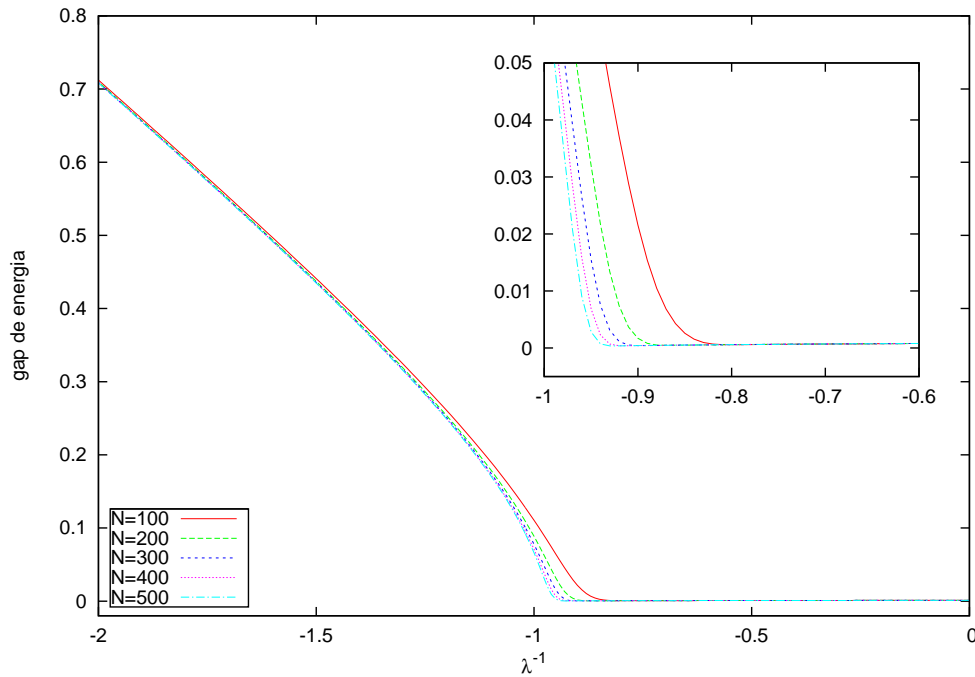


Figura 3.1: *Gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental em função de $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$ para $\epsilon = 1$, $\mu = 0$ e diferentes valores do número total de átomos N . À medida que N aumenta o ponto onde gap se anula desloca-se para o ponto crítico $\lambda_c^{-1} = -1$.*

Na figura Figura 3.1 mostramos o gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental (cujos valores foram encontrados via diagonalização numérica) para $\mu = 0$ e diferentes valores do número total de átomos N . Podemos observar que, à medida que N aumenta, o ponto em que o gap começa a fechar se aproxima do valor crítico $\lambda_c^{-1} = -1$. Como os níveis de energia se aproximam à medida que aumentamos o

número total de átomos, inferimos que ocorrerá uma transição de fase quântica quando $N \rightarrow \infty$, com valor crítico $\lambda_c^{-1} = -1$, separando uma região sem gap de outra com gap. Este resultado está de acordo com [37], onde o gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental, obtido por diagonalização exata, apresenta um mínimo que se aproxima de um ponto crítico onde ocorre uma transição de fase quântica à medida que o número total de átomos no condensado aumenta. Portanto, para sistemas finitos, o aparecimento de um mínimo no gap de energia que tende a fechar à medida que aumentamos o número total de átomos é um indicador de uma transição de fase quântica e o ponto onde isto ocorre é chamado de ponto crítico, aqui $\lambda_c^{-1} = -1$. Rigorosamente falando, é um ponto de “pré-transição de fase quântica”.

3.3 Emaranhamento Quântico

3.3.1 Revisão

Vamos iniciar fazendo uma breve revisão do emaranhamento, também chamado *conexão quântica não local*. Seguindo o trabalho de *Milburn et al* [27], emaranhamento é uma propriedade de um estado quântico de um sistema formado por dois ou mais subsistemas nos quais os estados quânticos dos subsistemas constituintes estão tão ligados entre si de modo que um subsistema não pode ser descrito adequadamente sem que haja menção de sua contraparte, mesmo que os subsistemas estejam separados espacialmente. Considere dois sistemas não interagentes A e B , com respectivos espaços de Hilbert H_A e H_B . O espaço de Hilbert do sistema composto é o produto tensorial

$$H_A \otimes H_B.$$

Se o primeiro sistema está no estado $|\phi\rangle_A$ e o segundo no estado $|\phi\rangle_B$ o estado do sistema composto é

$$|\psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B.$$

Estados do sistema composto que podem ser representados desta forma são chamados *estados separados* ou *estados produto*. Nem todos os sistemas compostos podem ser representados através de estados produto. Fixando uma base $\{|i\rangle_A\}$ para H_A e uma base $\{|j\rangle_B\}$ para H_B podemos escrever um estado mais geral em $H_A \otimes H_B$ como

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i,j} c_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B.$$

Este estado é um estado produto se $c_{ij} = c_i^A c_j^B$. Caso $c_{ij} \neq c_i^A c_j^B$ este estado é indissociável. Se um estado é indissociável, ele é chamado de *estado emaranhado* do sistema. Em outras palavras, um estado emaranhado de um sistema não pode ser decomposto em estados puros dos subsistemas.

O estado de um *ensemble* é descrito por uma *matriz de densidade* ρ . Considere dois sistemas A e B , com respectivos espaços de Hilbert H_A e H_B . Seja um estado do sistema composto dado por

$$|\Psi\rangle \in H_A \otimes H_B.$$

Como dissemos anteriormente, em geral, não conseguimos associar um estado puro ao subsistema A . Entretanto, ainda é possível associar uma matriz de densidade a este subsistema. Considere

$$\rho_T = |\Psi\rangle \langle \Psi|,$$

que é o operador de projeção sobre o estado $|\Psi\rangle$. O estado de A é o *traço parcial* de ρ_T sobre a base do sistema B :

$$\rho_A \stackrel{\text{def}}{=} \sum_j \langle j|_B (|\Psi\rangle \langle \Psi|) |j\rangle_B = \text{Tr}_B(\rho_T).$$

ρ_A é chamada *matriz de densidade reduzida* de ρ sobre o subsistema A .

Uma vez que a matriz de densidade que representa um estado misto é uma distribuição de probabilidade sobre um ensemble, somos naturalmente levados à definição da *entropia de von Neumann*:

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho),$$

onde o logaritmo é tomado na base 2. Se ρ atua sobre um espaço de Hilbert de dimensão finita d e possui autovalores $\{\lambda_1, \dots, \lambda_d\}$ podemos escrever

$$S(\rho) = -\sum_{k=1}^d \lambda_k \log \lambda_k.$$

O valor de $S(\rho)$ varia desde 0 , para estados completamente separáveis, até $\log d$, para estados maximamente emaranhados, correspondendo a um operador densidade completamente misturado.

3.3.2 Entropia de emaranhamento do modelo

Nesta seção vamos analisar o emaranhamento do modelo estudado no capítulo anterior desta dissertação. Basicamente, podemos decompor o sistema em dois subsistemas distinguíveis não isolados, tal que a interação entre estes subsistemas seja responsável pelo emaranhamento entre eles. Sendo N_1 o número de átomos no condensado 1 e N_2 o número de átomos no condensado 2, podemos escrever um estado geral do sistema como

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{N_1=0 \\ (N_2 = N - N_1)}}^N c_{N_1, N_2} |N_1\rangle \otimes |N_2\rangle,$$

onde os $\{c_{N_1, N_2}\}$ são números complexos. O vínculo segue do fato de que o número total de átomos $N = N_1 + N_2$ é conservado. O operador densidade para este estado é escrito como

$$\rho_T = |\Psi\rangle \langle\Psi| = \sum_{\substack{N_1, N'_1=0 \\ (N_2 = N - N_1) \\ (N'_2 = N - N'_1)}}^N c_{N_1, N_2} c_{N'_1, N'_2}^* |N_2\rangle |N_1\rangle \langle N'_1| \langle N'_2|.$$

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

$$\rho_1 = \text{Tr}_2(\rho_T) = \sum_{N_1=0}^N |c_{N_1}|^2 |N_1\rangle \langle N_1|.$$

Podemos ver que nesse caso ρ_1 é diagonal na base do espaço de Fock com autovalores $\lambda_{N_1} = |c_{N_1}|^2$. A entropia de emaranhamento, também conhecida como *entropia de Von Neumann*, é dada por

$$S(\rho_1) = - \sum_{N_1=0}^N |c_{N_1}|^2 \log(|c_{N_1}|^2). \quad (3.1)$$

Utilizando a expressão acima (3.1) junto com os autovetores obtidos por diagonalização exata do hamiltoniano, podemos encontrar a entropia de emaranhamento do modelo.

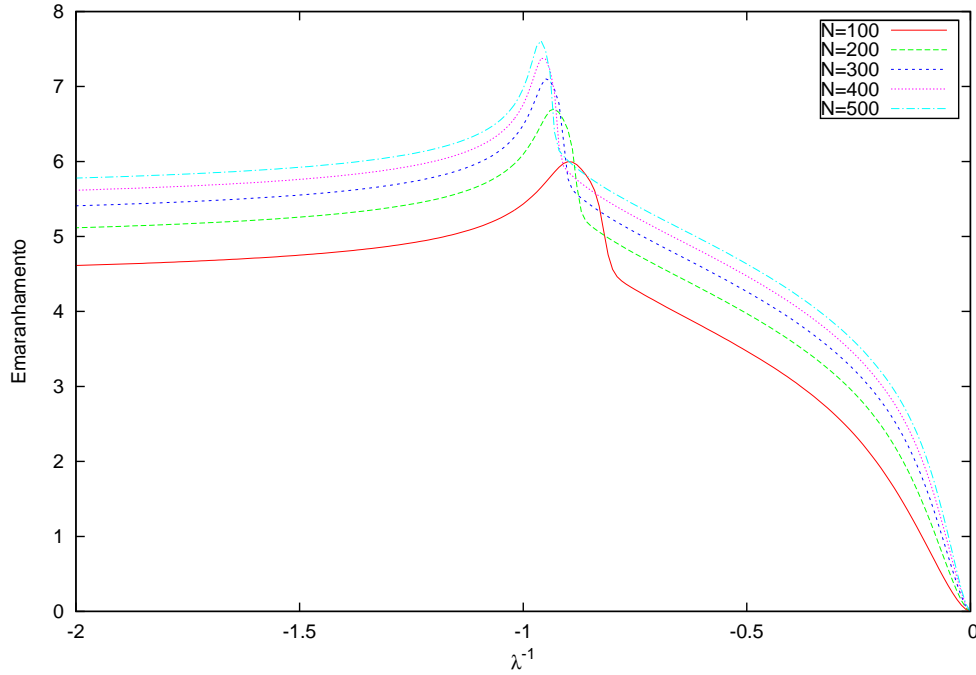


Figura 3.2: Entropia de emaranhamento do estado fundamental em função de $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$ para $\epsilon = 1$, $\mu \approx 0$ e diferentes valores do número total de átomos N . À medida que N aumenta o máximo da entropia desloca-se para o ponto crítico $\lambda_c^{-1} = -1$.

Na Figura 3.2 mostramos a entropia de emaranhamento do estado fundamental *versus* a razão dos parâmetros $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$ para o caso atrativo com potencial externo $\mu = 0^1$ e diferentes valores de N . Podemos verificar que a entropia de emaranhamento apresenta um máximo que tende a $\lambda_c^{-1} = -1$ à medida que o número total de átomos N aumenta. Na análise clássica do hamiltoniano do modelo de Bose-Hubbard de dois sítios feita no segundo capítulo encontramos um ponto de bifurcação em $\lambda_c^{-1} = -1$. Este resultado confirma a conjectura de *Milburn et al* [27], que sugere o aparecimento de um máximo na entropia de emaranhamento do estado fundamental sempre que na análise clássica do hamiltoniano existir um ponto fixo de bifurcação. Gráficos semelhantes a este também foram obtidos por *Pan e Draayer* em [38] utilizando outros métodos.

É um fato bem estabelecido que sistemas infinitos sofrem uma transição de fase quântica quando o emaranhamento do estado fundamental apresenta um extremo próximo a um valor crítico de um parâmetro do sistema. Assim, para sistemas finitos, o surgimento de um pico no emaranhamento do estado fundamental do modelo é um forte indicativo que o valor do parâmetro para o qual tende a ocorrer este pico é um ponto de TFQ do sistema. Rigorosamente, este ponto é chamado de “*ponto de pré-transição de fase quântica*” [39].

¹Usamos um valor de μ bastante pequeno para evitar oscilações numéricas.

3.4 Fidelidade

Uma maneira alternativa de se caracterizar transições de fase quânticas é a utilização de uma ferramenta oriunda da teoria da computação quântica, chamada de *Fidelidade* [40]. A fidelidade \mathcal{F} é definida como o módulo² do produto escalar entre dois estados quânticos, cujo valor informa o quanto estes estados são “distinguíveis” entre si,

$$\mathcal{F}(\psi_1, \psi_2) = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|.$$

A fidelidade varia desde um, para estados completamente indistinguíveis, até zero, para estados totalmente distinguíveis. Para sistemas que exibem uma transição de fase quântica no limite termodinâmico, o ponto onde a fidelidade vai a zero define o ponto crítico. Consideraremos a partir de agora a fidelidade do estado fundamental usando o potencial externo μ como parâmetro de ordem para estudar as transições de fase quânticas do sistema.

Utilizando valores de $|\mu| = \gamma$ simétricos em relação a $\mu = 0$ para dois estados, isto é, $\mathcal{F} = |\langle \mu = -\gamma | \mu = +\gamma \rangle|$, podemos observar uma mudança abrupta no comportamento da fidelidade próxima ao ponto crítico $\lambda_c^{-1} = -1$ a partir dos auto-estados calculados numericamente.

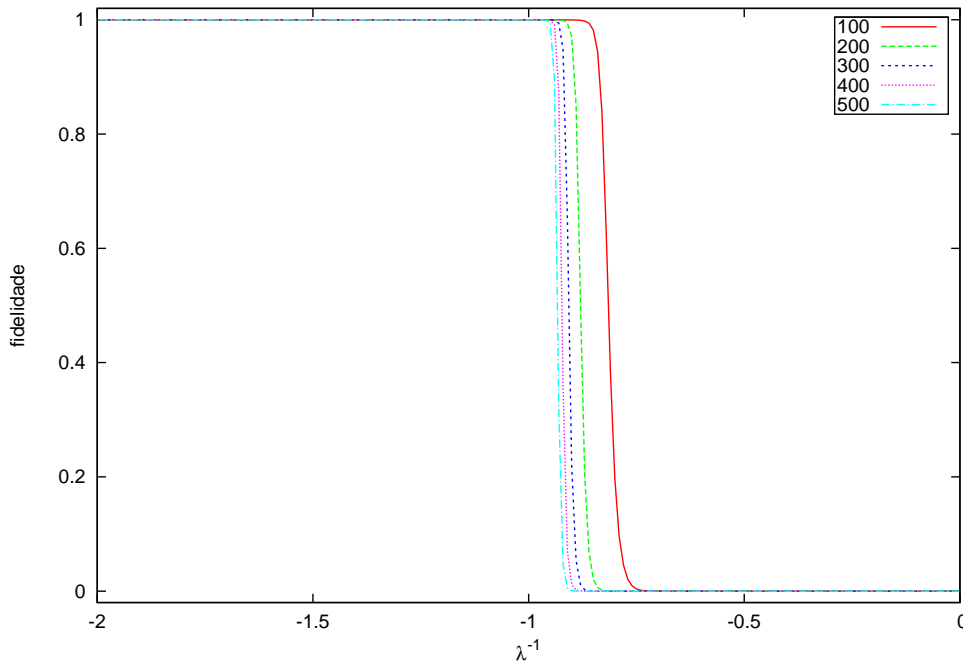


Figura 3.3: *Fidelidade do estado fundamental em função da razão $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$ para $\epsilon = 1$, $\gamma \approx \pm 0.001$ e diferentes valores do número total de átomos N . À medida que N aumenta o ponto onde ocorre a mudança abrupta da fidelidade do estado fundamental desloca-se para o ponto crítico $\lambda_c^{-1} = -1$.*

²Existem alguns autores que definem a fidelidade como o módulo ao quadrado do produto escalar entre dois estados quânticos (veja, por exemplo, [41]).

Na Figura 3.3, observamos que quanto maior o número total de átomos N , mais próximo do ponto crítico o mínimo da fidelidade ocorre. A fidelidade tem uma taxa de variação muito alta, ou seja, a derivada da fidelidade para este caso deve apresentar um máximo próximo ao ponto de transição de fase quântica [32], com o mesmo parâmetro crítico encontrado na análise do emaranhamento do estado fundamental e do gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental.

Portanto, nós identificamos uma *TFQ* em $\lambda_c^{-1} = -1$ através de:

- i)* o ponto onde o gap de energia se anula;
- ii)* um pico na entropia de emaranhamento do estado fundamental;
- iii)* o ponto onde a fidelidade apresenta uma queda abrupta.

É interessante observar que este ponto onde a *TFQ* ocorre ($\lambda_c^{-1} = -1$) corresponde ao ponto fixo de bifurcação obtido na análise clássica do capítulo anterior. Na próxima seção, vamos fazer uma interpretação física da transição de fase, utilizando o conceito de valor esperado do número de átomos em um dos condensados. No próximo capítulo iremos propor um novo método para identificar a *TFQ*.

3.5 Valor Esperado

Nas seções anteriores, utilizando os conceitos de emaranhamento, fidelidade e gap de energia, identificamos a *TFQ* do sistema e encontramos uma relação existente entre o ponto fixo de bifurcação da análise clássica e ponto crítico da transição de fase quântica. Vamos agora interpretar esta transição de fase quântica através do comportamento do valor esperado normalizado do número do átomos em um dos condensados.

Na Figura 3.4 mostramos o valor esperado normalizado para o estado fundamental do número de partículas no condensado 2 em função da razão $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$, para $N = 500$. Podemos observar que o valor esperado normalizado do número de átomos no condensado dois tem inicialmente um valor $\frac{\langle N_2 \rangle}{N} \cong 0.5$, significando que aproximadamente metade dos átomos está no condensado 2 e a outra metade no condensado 1. Variando o parâmetro $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$ verificamos que este valor sofre uma queda abrupta próximo do ponto crítico $\lambda_c^{-1} = -1$, se aproximando do valor $\frac{\langle N_2 \rangle}{N} \cong 0$ após cruzar esse ponto. O valor $\frac{\langle N_2 \rangle}{N} \cong 0$ pode ser interpretado como a maioria dos átomos estando no condensado 1. Assim, podemos interpretar esta transição como uma separação entre uma *fase deslocalizada*, com tunelamento de átomos entre os dois condensados, e uma *fase localizada*.

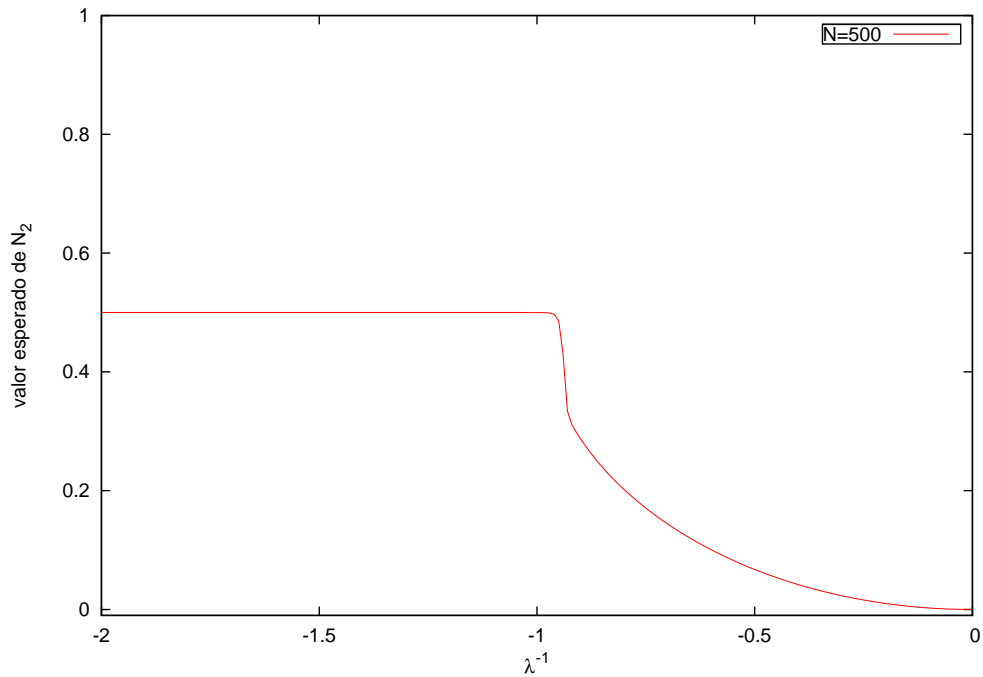


Figura 3.4: Valor esperado do estado fundamental da fração do número de átomos no condensado 2, $\frac{\langle N_2 \rangle}{N}$, em função de $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$ para $\epsilon = 1$, $\mu = 0$ e diferentes valores do número total de átomos N . Podemos observar uma mudança abrupta no comportamento do valor esperado próximo ao ponto crítico $\lambda_c^{-1} = -1$.

3.6 Conclusões

Neste capítulo apresentamos um estudo das transições de fase quânticas (ou “pré-transições de fase quânticas”) para o modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento de átomos utilizando os conceitos de emaranhamento, gap de energia e fidelidade. Observamos a relação existente entre o ponto fixo de bifurcação da análise clássica e o ponto crítico na transição de fase quânticas. Também investigamos o comportamento do sistema próximo ao ponto de TFQ através do valor esperado normalizado de partículas no condensado 2, $\frac{\langle N_2 \rangle}{N}$, e percebemos dois comportamentos distintos: antes do ponto de transição o valor esperado como função do parâmetro λ^{-1} é constante e igual a 0.5; após o ponto de transição o valor esperado para quaisquer valores de λ^{-1} é monotonicamente decrescente. Assim, a existência de uma transição de fase quântica, conjecturada a partir da análise clássica do sistema, foi confirmada através do estudo do gap de energia, do emaranhamento quântico e da fidelidade para o sistema.

Capítulo 4

Soluções das equações do ansatz de Bethe

4.1 Introdução

Neste capítulo nós vamos apresentar a solução do sistema em estudo. Após apresentar a solução exata do modelo para alguns casos particulares, iremos derivar as equações do ansatz de Bethe e energias do modelo. A seguir, utilizaremos recursos numéricos para obter informações detalhadas sobre o comportamento do estado fundamental do sistema, estabelecendo, posteriormente, uma conexão entre o comportamento das soluções das equações do ansatz de Bethe e as *TFQ*.

4.2 Solução exata para o hamiltoniano do modelo

Como vimos no segundo capítulo, o hamiltoniano simplificado que descreve o tunelamento de átomos entre dois condensados de Bose-Einstein acoplados é dado por

$$H = \frac{k}{8} (N_1 - N_2)^2 - \frac{\mu}{2} (N_1 - N_2) - \frac{\epsilon}{2} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1). \quad (4.1)$$

No limite de acoplamento nulo, $k = 0$, o Hamiltoniano pode ser diagonalizado diretamente e encontramos a energia do estado fundamental [42]

$$E_0 = -\frac{N}{2} \sqrt{\epsilon^2 + \mu^2}. \quad (4.2)$$

Usando teoria da perturbação para k pequeno e adotando $\mu = 0$, a energia do estado fundamental pode ser expressa em primeira ordem em k como [42]

$$E_0 = \frac{kN}{8} - \frac{\epsilon N}{2}. \quad (4.3)$$

Por outro lado, no regime de acoplamento forte, $\epsilon = 0$, a energia do estado fundamental pode ser calculada exatamente. Para o caso de um número par de partículas, nós encontramos [24]:

$$E_0 = \frac{k}{2} p^2 + p\mu, \quad p = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2}. \quad (4.4)$$

Observe que no limite de acoplamento forte a energia do estado fundamental é degenerada. Em regimes intermediários, com constantes de acoplamento não nulas, necessitamos de métodos matemáticos mais sofisticados para encontrar as auto-energias do hamiltoniano, apresentadas na próxima seção.

4.3 Mapeamento do modelo e as equações do ansatz de Bethe (*EAB*)

A idéia central deste método é mapear¹ o hamiltoniano (4.1) numa equação diferencial ordinária de segunda ordem. Para isto, começamos com as realizações de Jordan-Schwinger para a álgebra $su(2)$ [43]:

$$S^+ = a_1^\dagger a_2, \quad S^- = a_2^\dagger a_1, \quad S^z = \frac{1}{2}(N_1 - N_2), \quad (4.5)$$

onde $N = N_1 + N_2$ é o número fixo de partículas do sistema. Em termos desta realização, o hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = \frac{k}{2}(S^z)^2 - \mu(S^z) - \frac{\epsilon}{2}(S^+ + S^-). \quad (4.6)$$

Uma representação equivalente da álgebra $su(2)$ é dada pelo mapeamento nos operadores diferenciais

$$S^+ = \frac{d}{du}, \quad S^- = Nu - u^2 \frac{d}{du}, \quad S^z = \frac{N}{2} - u \frac{d}{du}, \quad (4.7)$$

agindo sobre um espaço de polinômios com base $\{1, u, u^2, \dots, u^N\}$. Assim, a representação diferencial do hamiltoniano assume a forma

$$\begin{aligned} H &= \frac{k}{2} \left(\frac{N^2}{4} + (1-N)u \frac{d}{du} + u^2 \frac{d^2}{du^2} \right) - \mu \left(\frac{N}{2} - u \frac{d}{du} \right) - \frac{\epsilon}{2} \left(Nu + (1-u^2) \frac{d}{du} \right) \\ &= \frac{k}{2} u^2 \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} \left((k(1-N) + 2\mu)u - \epsilon(1-u^2) \right) \frac{d}{du} - \frac{\epsilon N}{2} u + \frac{KN^2}{8} - \frac{\mu N}{2}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Agora, encontrar o espectro do hamiltoniano é equivalente a resolver a equação de autovalores

$$HQ(u) = EQ(u)$$

onde $Q(u)$ é uma função polinomial em u de ordem N . Podemos expressar $Q(u)$ em termos de suas raízes $\{\nu_j\}$:

$$Q(u) = \prod_{j=1}^N (u - \nu_j).$$

Agrupando os termos, podemos escrever a equação de autovalores como

$$\alpha(u)Q''(u) + \beta(u)Q'(u) + \gamma(u)Q(u) = EQ(u),$$

¹Veja em detalhes o processo de mapeamento, que fornece as equações do ansatz de Bethe e as autoenergias do modelo, no apêndice A.

onde

$$\begin{aligned}\alpha(u) &= \frac{k}{2}u^2, \\ \beta(u) &= \frac{(u^2 - 1)\epsilon}{2} + \frac{(2\mu - k(N - 1))}{2}u, \\ \gamma(u) &= \frac{kN^2}{8} - \frac{\mu N}{2} - \frac{N\epsilon}{2}u.\end{aligned}$$

Com essa identificação de parâmetros podemos escrever as equações do ansatz de Bethe para os parâmetros ν_j como

$$\frac{\epsilon\nu_l^2 + (k(1 - N) - 2\mu)\nu_l - \epsilon}{k\nu_l^2} = \sum_{j \neq l}^N \frac{2}{\nu_j - \nu_l}, \quad l = 1, \dots, N. \quad (4.9)$$

Escrevendo a expansão assintótica $Q(u) \sim u^N - u^{N-1} \sum_{j=1}^N \nu_j$ e considerando os termos de ordem N , os autovalores de energia são dados por

$$E = \frac{kN^2}{8} - \frac{\mu N}{2} + \frac{\epsilon}{2} \sum_{j=1}^N \nu_j. \quad (4.10)$$

Assim, cada conjunto $\{\nu_j, j = 1, \dots, N\}$, solução das *EAB* (4.9), fornece um autovalor de energia deste hamiltoniano (4.10). A solução destas equações fornece informações físicas importantes sobre este modelo como, por exemplo, a estrutura do estado fundamental e das excitações elementares. Em princípio, não é possível resolver analiticamente estas equações, existindo na literatura apenas alguns estudos assintóticos [44]. Portanto, para que possamos estudar as nuances deste modelo, lançaremos mão de ferramentas numéricas.

4.4 Solução numérica para as equações do ansatz de Bethe

Na análise que segue, nós vamos considerar $\epsilon = 1$ e $\mu = 0$, de tal forma que as equações do ansatz de Bethe podem ser escritas como

$$\frac{\nu_l^2 + k(1 - N)\nu_l - 1}{k\nu_l^2} = \sum_{j \neq l}^N \frac{2}{\nu_j - \nu_l}, \quad l = 1, \dots, N. \quad (4.11)$$

com o espectro de energias dado por

$$E = \frac{kN^2}{8} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \nu_j \quad (4.12)$$

Uma análise numérica das equações (4.11) e (4.12) mostra que, para o estado fundamental, o conjunto $\{\nu_j, j = 1, \dots, N\}$ - soluções das *EAB* - apresentam uma estrutura complexa e simétrica. Para ilustrar, apresentamos na Figura 4.1 a configuração das raízes $\{\nu_j, j = 1, \dots, N\}$, soluções das *EAB* (4.11) no plano complexo, para o estado fundamental do caso $N = 20$ e $k = -0.01$.

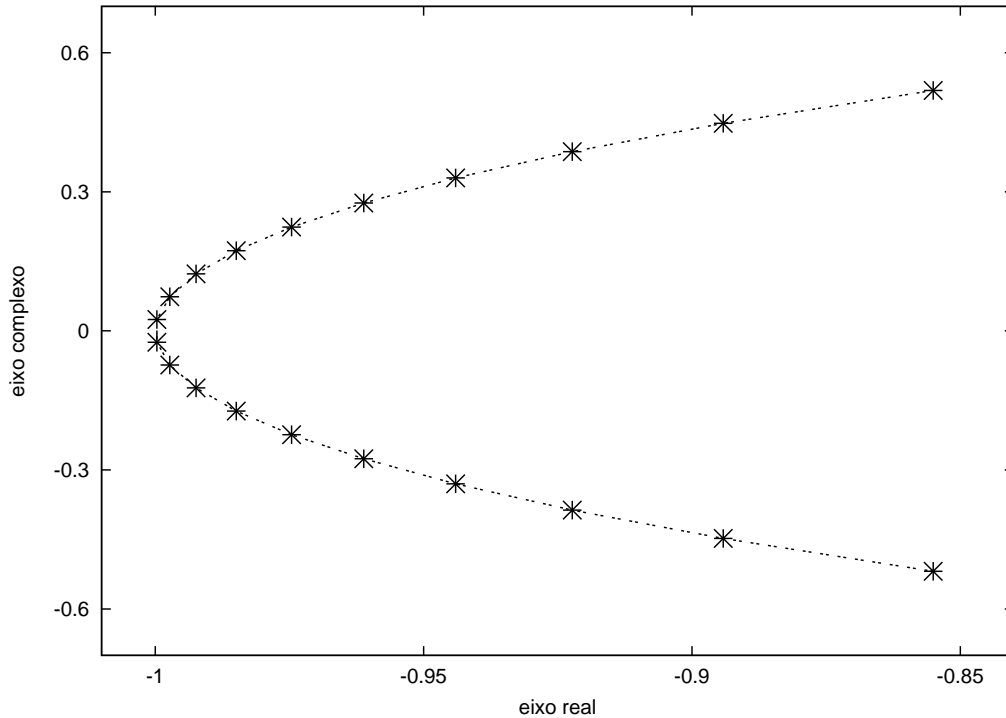
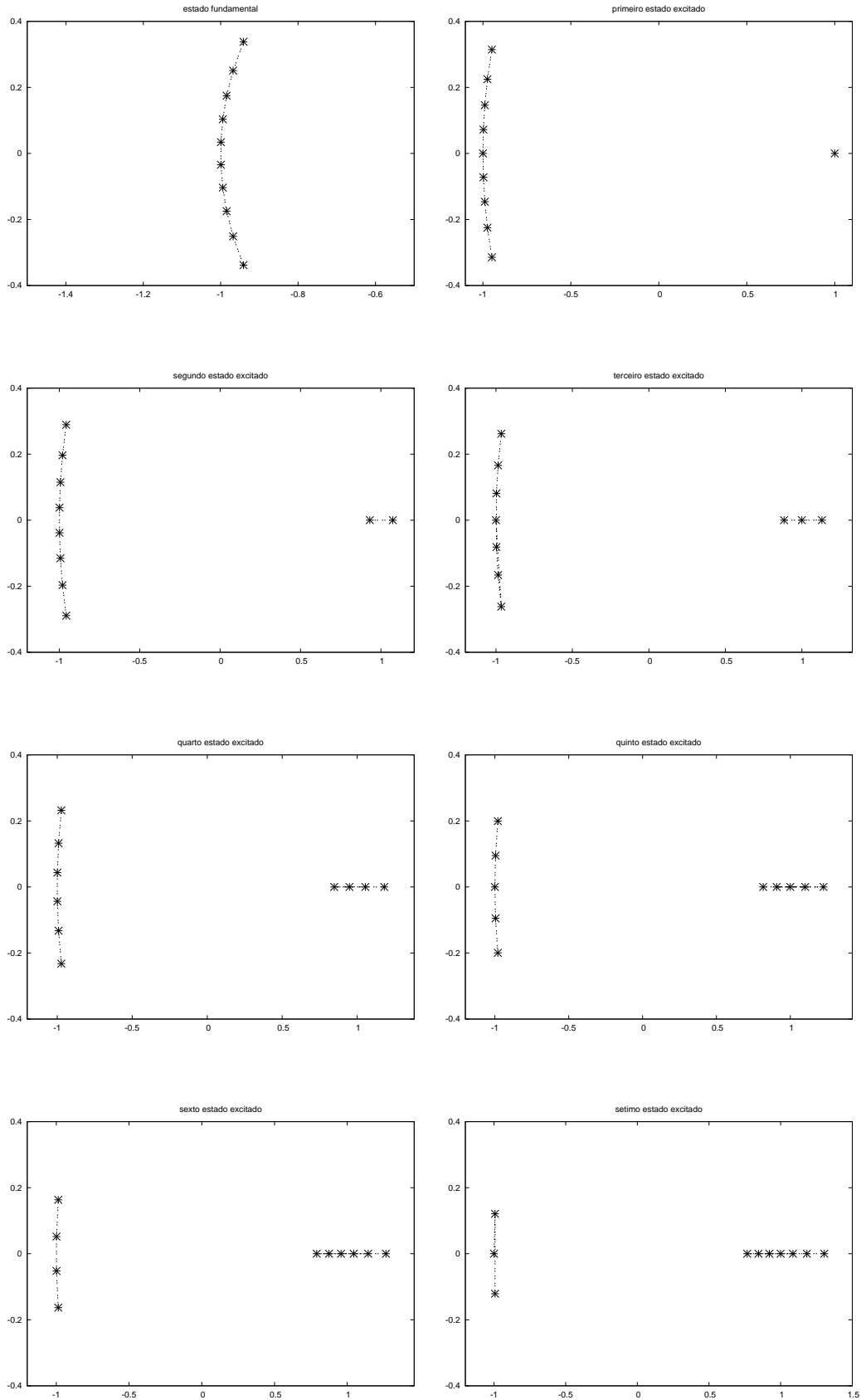


Figura 4.1: Solução da equação do ansatz de Bethe (4.11) para o estado fundamental considerando o caso particular $N = 20$ e $k = -0.01$.

Este tipo de configuração é conhecido na literatura como “*strings*” e possui a propriedade de garantir que a energia (4.12) seja real, por aparecerem sempre pares complexo-conjugados. O conceito de “*strings*” foi introduzido por Minoru Takahashi [45] na década de setenta e tem um papel essencial no estudo da termodinâmica dos modelos integráveis. Vários modelos como, por exemplo, o gás de bósons e o gás de férmions com interação do tipo delta, os modelos de Heisenberg XXX e XXZ, o modelo de Hubbard, o modelo t - J , entre outros, foram estudados nesse contexto. Em cada modelo, a estrutura das raízes do ansatz de Bethe para o estado fundamental pode ter uma configuração diferente, sendo necessário realizar um estudo caso a caso. Nos casos mais simples, tem-se apenas raízes reais populando o estado fundamental; em outros, duas ou mais “*strings*” podem surgir. No modelo que estamos estudando, a solução numérica das equações do ansatz de Bethe para o estado fundamental apresenta uma estrutura complexa do tipo “ N - *strings*”. Excitações elementares correspondem a “quebras” de alguns pares complexo-conjugados em raízes reais. No máximo estado excitado, todas as raízes tornam-se reais.

Na Figura 4.2 apresentamos a configuração das raízes $\{\nu_j, j = 1, \dots, N\}$, no plano complexo, soluções numéricas das *EAB* (4.11), para o estado fundamental e excitações elementares do caso $N = 10$ e $k = -0.01$.



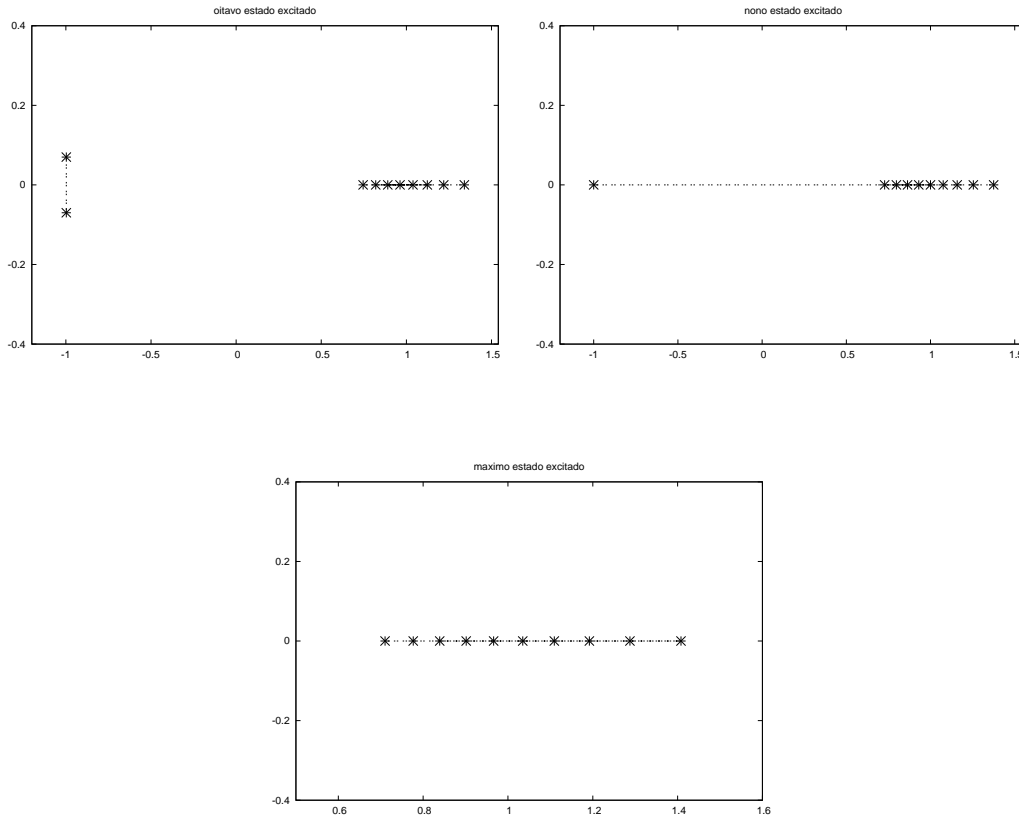


Figura 4.2: Solução das equações do ansatz de Bethe (4.11) no plano complexo para o estado fundamental e excitações elementares considerando o caso particular $N = 10$ e $k = -0.01$.

Neste trabalho estamos basicamente interessados em estudar o estado fundamental, pela sua relevância no contexto dos condensados. Todas as soluções apresentadas foram confirmadas pela comparação com a diagonalização exata do hamiltoniano.

É interessante observar que no caso repulsivo ($k > 0$) as raízes das EAB para o estado fundamental são reais (veja, por exemplo, [42] e o *apêndice B*). Esta situação é análoga ao modelo de férmions de N componentes com interações δ , onde tem-se $N - strings$ populando o estado fundamental no caso atrativo e raízes reais no estado fundamental no caso repulsivo [45]. Nesta dissertação iremos considerar apenas o caso atrativo. Com o objetivo de analisar o comportamento das soluções das EAB próximo ao ponto de pré-transição de fase quântica, vamos fixar o número total de partículas e variar o parâmetro k .

Na Figura 4.3 apresentamos no plano complexo as soluções numéricas do estado fundamental para as EAB (4.11) com $N = 30$, em função do parâmetro k (em cores, conforme a tabela abaixo), variando entre -0.01 e -0.2 , em intervalos de -0.01 :

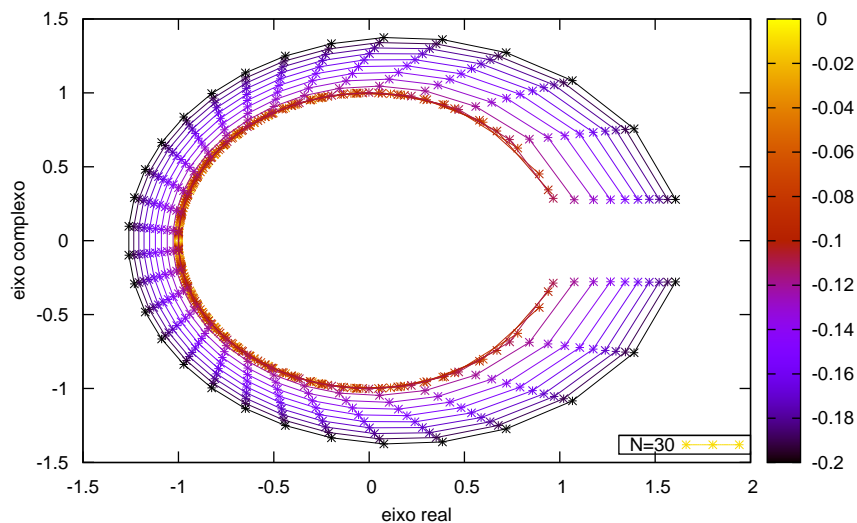


Figura 4.3: Soluções das equações do ansatz de Bethe (4.11) para o estado fundamental considerando o caso particular $N = 30$. Cada curva corresponde a um valor do parâmetro k , conforme tabela de cores, à direita, e se assenta sobre um conjunto de pontos (raízes da equação (4.11)).

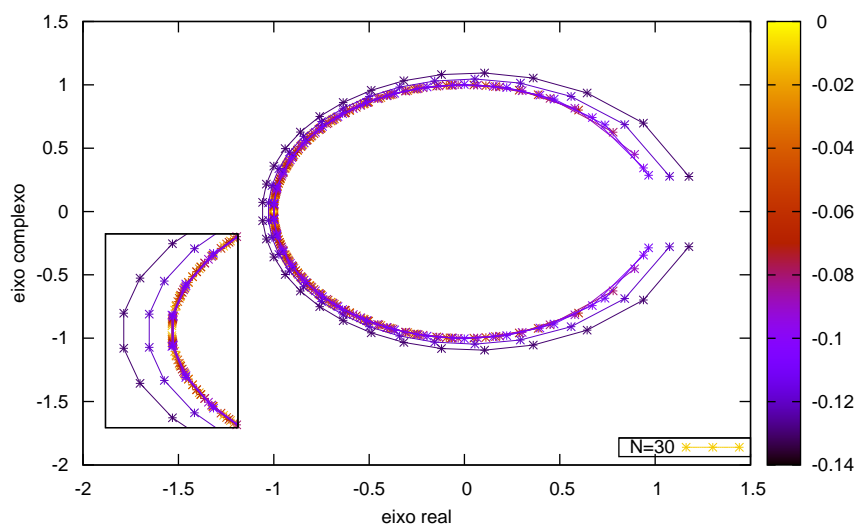


Figura 4.4: Soluções das equações do ansatz de Bethe (4.11) para o estado fundamental considerando o caso particular $N = 30$ e limitada à região $-0.124 < k < 0$. Observa-se que a distribuição das “strings” sofre uma mudança abrupta de comportamento.

É importante observar o comportamento peculiar das soluções: para valores de k até de zero até -0.11 , as raízes agrupam-se sobre a mesma curva; a partir de $k = -0.12$, as soluções começam a “abrir”, ocupando curvas distintas. Esse comportamento pode ser visto em maior detalhe na Figura 4.4. Observamos claramente a existência de uma mudança abrupta na distribuição das raízes na região $-0.12 < k < -0.11$. O mesmo tipo de comportamento pode ser observado para qualquer outro valor de N , conforme a Figura 4.5.

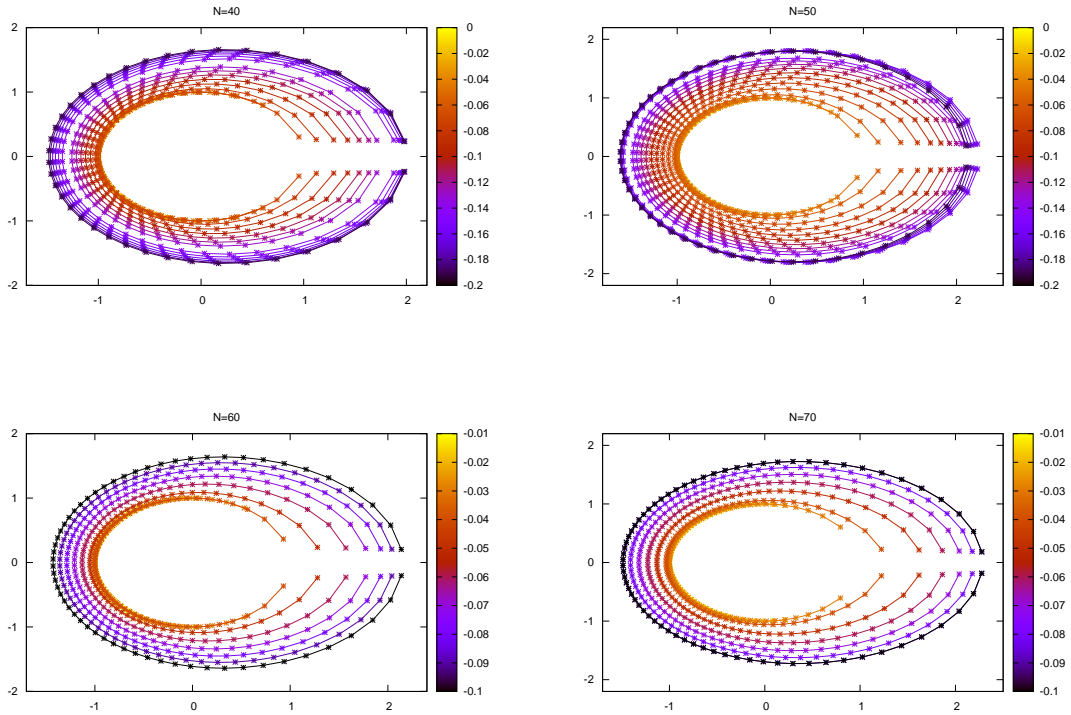


Figura 4.5: Soluções das equações do ansatz de Bethe (4.11) para o estado fundamental considerando os casos particulares $N = 40$, $N = 50$, $N = 60$ e $N = 70$ (no sentido horário a partir da figura no canto superior esquerdo). Cada curva se assenta sobre um único conjunto de pontos (raízes da equação (4.11)).

O maior valor de N para o qual conseguimos resolver numericamente as EAB e determinar as configurações das raízes para o estado fundamental foi $N = 80$, ilustrado na Figura 4.6 para diferentes valores de k . É interessante mencionar que equações semelhantes as EAB (4.11) foram encontradas e resolvidas para outros modelos integráveis de interesse, como o modelo BCS reduzido [46] e o modelo BCS do tipo onda-p [47], onde foi possível resolver as EAB até $N = 100$ e $N = 30$ pares de Cooper, respectivamente.

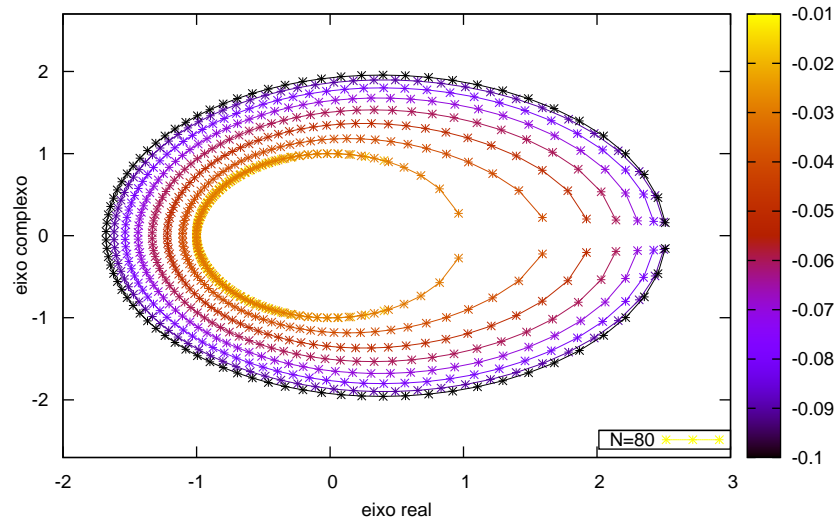


Figura 4.6: Soluções das equações do ansatz de Bethe (4.11) para o estado fundamental do caso $N = 80$. Cada curva corresponde a um valor do parâmetro k , conforme a tabela de cores, à direita, e se assenta sobre um único conjunto de pontos (raízes).

Aqui, a mudança de comportamento pode ser observada no intervalo $-0.04 < k < -0.03$, como fica mais claro na Figura 4.7:

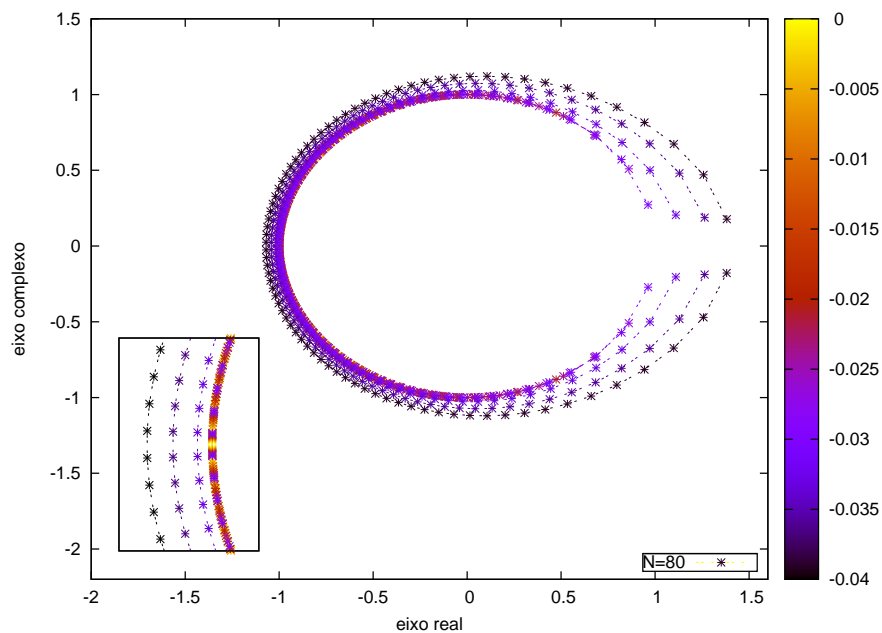


Figura 4.7: Soluções das equações do ansatz de Bethe (4.11) para o estado fundamental do caso $N = 80$, limitada à região $-0.05 < k < 0$. Observa-se que a distribuição das strings sofre uma mudança abrupta de comportamento nesse intervalo.

Na próxima seção vamos mostrar que esta mudança abrupta no comportamento das raízes das *EAB* para o estado fundamental pode ser interpretada como ponto de pré-transição de fase quântica. Assim, além das ferramentas já utilizadas - gap de energia, fidelidade e emaranhamento - as *EAB* também servem para identificar transições de fase quânticas.

4.5 Soluções das *EAB* e *TFQ*

Como vimos na seção anterior, o modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento de átomos sofre uma transição de fase quântica no limite termodinâmico. Os métodos utilizados - emaranhamento, fidelidade e gap de energia - permitiram identificar as *TFQ* com boa precisão. Nosso objetivo agora é fazer uma conexão entre o comportamento observado da solução das *EAB* para o estado fundamental e as *TFQ*. Entretanto, os resultados obtidos até agora são apenas para $N \leq 80$. Assim, para uma melhor comparação, precisamos apresentar os gráficos do gap, fidelidade e emaranhamento também para valores de $N \leq 80$. Nas figuras a seguir apresentamos o gap de energia, a fidelidade e o emaranhamento como função da variável λ^{-1} ,

$$\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}.$$

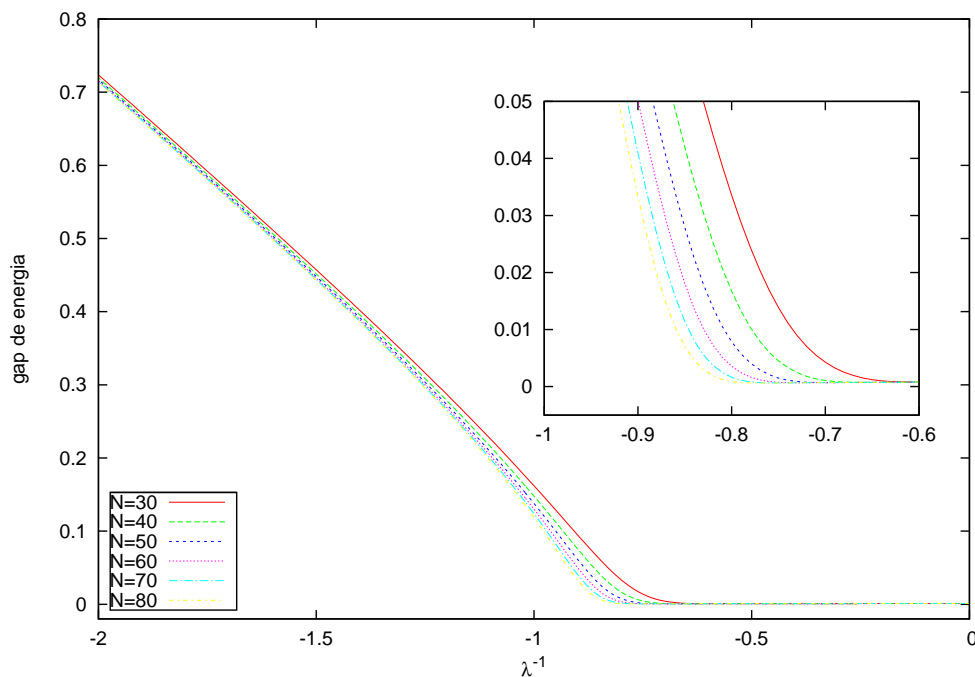


Figura 4.8: *Gap de energia em função de λ^{-1} para $N = 30, 40, 50, 60, 70$ e 80 .*

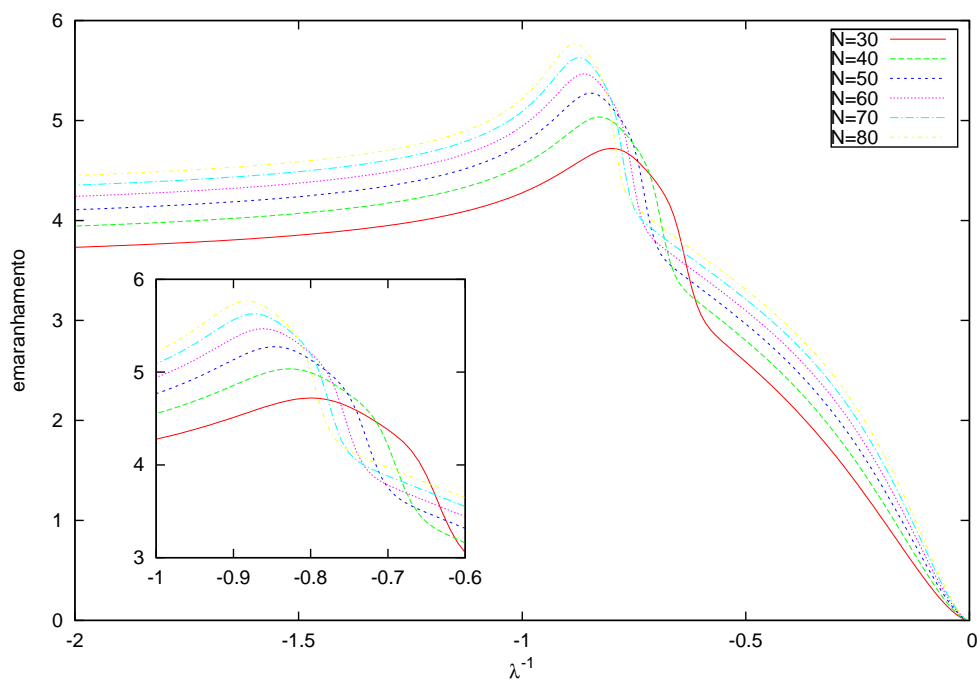


Figura 4.9: *Emaranhamento do estado fundamental versus λ^{-1} para diversos valores de N .*

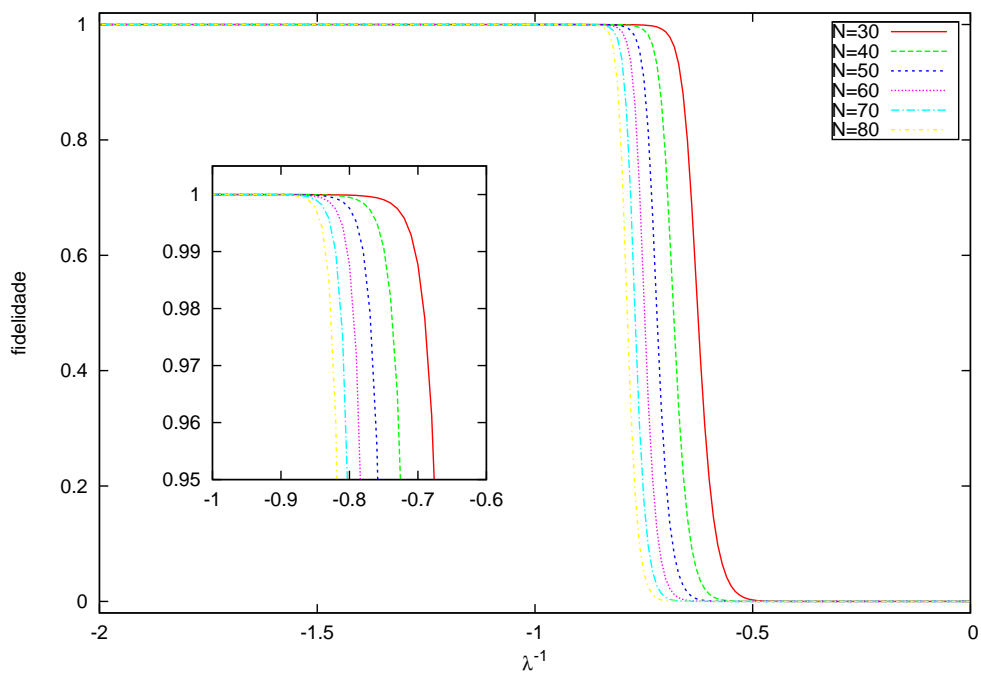


Figura 4.10: *Fidelidade quântica do estado fundamental em função de λ^{-1} para diversos valores de N .*

Observando os gráficos de gap e fidelidade (Figura 4.9 e Figura 4.10), verificamos que os pontos de pré-TFQ para alguns casos como $N=30$ e $N=80$, ocorrem, aproximadamente em $\lambda^{-1} \sim -0.72$ e $\lambda \sim -0.83$, respectivamente. Comparando com as soluções das *EAB* para $N=30$ e $N=80$, apresentadas na seção anterior (Figura 4.4 e Figura 4.7), que apresentam uma mudança de comportamento a partir de $k = -0.11$ e $k=-0.03$, ou $\lambda^{-1} \sim -0.6$ e $\lambda^{-1} \sim -0.83$, respectivamente, notamos que estes valores tendem a coincidir, a medida que N aumenta. Assim, podemos associar uma mudança abrupta de comportamento nas raízes das equações do ansatz de Bethe a uma pré-transição de fase quântica do modelo que, como vimos anteriormente, corresponde ao ponto de bifurcação da análise clássica.

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Conclusões

A idéia central desta dissertação foi o estudo de um modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson em três etapas: análise clássica, estudos dos pontos de pré-transição de fase quântica e observação de mudanças no comportamento das soluções das equações do ansatz de Bethe nas regiões próximas ao ponto de pré-transição de fase quântica.

No capítulo 2 nós apresentamos o hamiltoniano para o modelo em questão e estabelecemos sua integrabilidade através da álgebra de Yang-Baxter. Através de uma substituição adequada de variáveis obtivemos o análogo clássico do modelo, válido para um regime com um número de partículas muito grande, porém ainda finito. Posteriormente determinamos as equações de movimento e os pontos fixos do hamiltoniano. A análise clássica nos permitiu dividir o espaço de parâmetros em duas regiões distintas entre si. Verificamos, em particular, que na ausência de potencial externo, existe um ponto de bifurcação que se localiza na fronteira dessas regiões. A existência desse tipo de bifurcação indica que o ponto seja um máximo local da entropia de emaranhamento do estado fundamental. Assim, a análise clássica sugere o estudo do emaranhamento e, indiretamente, o estudo dos pontos de transição de fase quântica.

No capítulo 3 revisamos o conceito de entropia de emaranhamento e sua relação com a teoria das transições de fase quânticas. Também apresentamos outros métodos para determinar os pontos de TFQ , como o gap de energia e a fidelidade. A seguir, aplicamos esses conceitos no estudo do modelo em questão. Analisamos o comportamento do emaranhamento, do gap de energia e da fidelidade em função do parâmetro $\lambda^{-1} = \frac{2\epsilon}{kN}$. Todos os gráficos obtidos indicaram que, à medida que o número de partículas do sistema aumenta (tendendo ao limite termodinâmico), o ponto de pré- TFQ aproxima-se de $\lambda^{-1} = -1$, ou seja, tende ao ponto de bifurcação da análise clássica. Para interpretar fisicamente a transição de fase quântica, estudamos o comportamento do número esperado de partículas em cada um dos condensados. Concluímos que a TFQ em questão pode ser interpretada como uma transição entre uma fase onde as partículas podem tunelar entre os condensados (*fase deslocalizada*) e uma fase em que as partículas estão presas num dos condensados (*fase localizada*).

No capítulo 4 resolvemos as equações do ansatz de Bethe para o modelo em questão. Começamos apresentando as soluções exatas para alguns casos limites, como nos casos de acoplamento forte e acoplamento fraco. Em regimes intermediários, utilizamos recursos numéricos para obter as soluções explicitamente. As soluções numéricas para o estado fundamental demonstram claramente um arranjo do tipo “*string*”. À medida que variamos o parâmetro de interação k do hamiltoniano verificamos que as soluções das EAB para o estado fundamental podem ser agrupadas em duas famílias distintas: uma família de “*strings*” sobrepostas e uma família de “*strings*” concêntricas, ocupando posições dis-

tintas, no plano complexo Após uma análise criteriosa, observamos que a combinação de parâmetros onde ocorre o intercâmbio entre uma família e outra corresponde, aproximadamente, ao ponto de pré-TFQ para o dado número de partículas. Assim, mostramos para este modelo que o comportamento das soluções das *EAB* também pode ser usado como um indicativo da *TFQ*. Outras possíveis aplicações das soluções das *EAB* encontradas seriam: *i)* o estudo de funções de correlação do modelo, para os quais se tem alguns resultados analíticos preliminares [20]; *ii)* o estudo da dinâmica quântica fora do equilíbrio (“*quenching*”) do modelo, que foi feita recentemente para os modelos integráveis do gás de Bose com interação do tipo δ e o modelo BCS [47], com aplicações experimentais; *iii)* o estudo do modelo com desordem, isto é, considerando-se um potencial externo distribuído de forma randômica [44].

Os resultados deste capítulo são originais e estão sendo preparados para uma futura publicação.

5.2 Trabalhos em preparação

- LIMA, D., FOERSTER, A. *Quantum phase transitions from a Bethe ansatz perspective*, em fase de redação (2010).

Apêndice A

Duas versões do ansatz de Bethe

A.1 Ansatz de Bethe na forma de produtório

Um passo fundamental para aplicarmos com sucesso o método algébrico do ansatz de Bethe consiste em encontrar um pseudo-vácuo adequado, $|0\rangle$, tal que sejam respeitadas as propriedades

$$A(u)|0\rangle = a(u)|0\rangle, \quad B(u)|0\rangle = 0, \quad C(u)|0\rangle \neq 0, \quad D(u)|0\rangle = d(u)|0\rangle, \quad (\text{A.1})$$

onde $a(u)$ e $d(u)$ são funções escalares. A seguir, observando que $C(v)$ atua como um 'operador de criação' sobre o pseudo-vácuo de Fock, definimos o *estado de Bethe*

$$|\vec{v}\rangle \equiv |v_1, v_2, \dots, v_n\rangle = \prod_{i=1}^n C(v_i)|0\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Observando a ação de $t(u)$ sobre $|\vec{v}\rangle$,

$$t(u)|\vec{v}\rangle = \pi(A(u))|\vec{v}\rangle + \pi(D(u))|\vec{v}\rangle,$$

notamos que

$$t(u)|\vec{v}\rangle = \Lambda(u)|\vec{v}\rangle + \sum_{i=1}^M \frac{\eta}{u - v_i} \left(d(v_i) \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j} - a(v_i) \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j + \eta}{v_i - v_j} \right) C(u)|\vec{v}_i\rangle, \quad (\text{A.3})$$

sendo

$$\Lambda(u) = a(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} + d(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i}. \quad (\text{A.4})$$

Portanto, $\Lambda(u)$ será um autovalor para a matriz de transferência $t(u)$ sempre que as equações

$$\frac{a(v_i)}{d(v_i)} = \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}. \quad (\text{A.5})$$

conhecidas como *equações do ansatz de Bethe* (EAB) na forma de produtório são satisfeitas. Neste procedimento exigimos o cancelamento dos termos indesejados (segundo e terceiro termos do lado direito da equação (A.3)), uma vez que estes termos não são capazes de produzir um autovetor da matriz de transferência. Agora, dependendo da realização utilizada (ou do modelo estudado), teremos diferentes expressões para $a(v_i)$ e $d(v_i)$.

A.2 Ansatz de Bethe na forma de somatório

Nesta seção vamos investigar o processo de mapeamento entre estruturas algébricas distintas, buscando conexões entre as diferentes formas de representar um sistema físico. Vamos basicamente seguir o trabalho [43]. Isso nos possibilita encontrar uma expressão alternativa para as equações do ansatz de Bethe dos modelos.

As auto-energias de um sistema quântico são determinada pela equação de Schrödinger independente do tempo (em uma dimensão):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Adotando as unidades naturais $\hbar = 1$ e $m = 1/2$, podemos escrever

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{A.6})$$

vamos adotar o seguinte *ansatz de Bethe* para a função $\psi(x)$:

$$\psi(x) = e^{v(x)}Q(u(x)), \quad (\text{A.7})$$

onde

$$Q(u(x)) = \prod_{j=1}^M (u - \nu_j).$$

sendo " ν_j " as raízes do polinômio Q . Desta forma, $\psi(x)$ satisfaz, por construção, a equação (A.6). O termo " $e^{v(x)}$ " é utilizado para facilitar os cálculos. Substituindo o ansatz (A.7) na equação (A.6), obtemos

$$\alpha(u)Q''(u) + \beta(u)Q'(u) + \gamma(u)Q(u) = EQ(u), \quad (\text{A.8})$$

com

$$\alpha(u) = - \left(\frac{du(x)}{dx} \right)^2,$$

$$\beta(u) = -2 \frac{du(x)}{dx} \frac{dv(x)}{dx} - \frac{d^2u(x)}{dx^2},$$

$$\gamma(u) = V(x) - \left(\frac{dv(x)}{dx} \right)^2 - \frac{d^2v(x)}{dx^2}.$$

Uma vez que

$$Q(u(x)) = \prod_{j=1}^M (u - \nu_j),$$

segue que

$$Q'(u(x)) = \sum_{i=1}^M \prod_{j \neq i}^M (u - \nu_j),$$

$$Q''(u(x)) = \sum_{i=1}^M \sum_{k=1}^M \prod_{j \neq i, j \neq k}^M (u - \nu_j).$$

Portanto,

$$\lim_{u \rightarrow \nu_i} Q(u(x)) = 0,$$

$$\lim_{u \rightarrow \nu_i} Q'(u(x)) = \prod_{j \neq i}^M (u - \nu_j),$$

$$\lim_{u \rightarrow \nu_i} Q''(u(x)) = 2 \sum_{k \neq i}^M \prod_{j \neq i, j \neq k}^M (u - \nu_j).$$

Assim, a partir de (A.8), temos

$$\alpha(\nu_i) 2 \sum_{k \neq i}^M \prod_{j \neq i, j \neq k}^M (\nu_i - \nu_j) + \beta(\nu_i) \prod_{j \neq i}^M (\nu_i - \nu_j) = 0,$$

ou seja,

$$\frac{\beta(\nu_i)}{\alpha(\nu_i)} = \sum_{j \neq i}^M \frac{2}{\nu_j - \nu_i}. \quad (\text{A.9})$$

Podemos identificar a equação (A.9) como as *equações alternativas do ansatz de Bethe* para os parâmetros " ν_i ", ou *equações do ansatz de Bethe na forma de somatório*.

A.3 Discussão

São formas equivalentes para encontrar as auto-energias de um sistema quântico (i) resolver a equação de auto-valores no espaço de estados

$$H(P_x, X)|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (\text{A.10})$$

onde H denota o operador Hamiltoniano como uma função dos operadores *momentum e posição* (explícita ou implicitamente) para o modelo, e (ii) resolver a equação de Schrödinger independente do tempo para um potencial adequado $V(x)$ - equação (4.1). Essa equivalência deve-se ao fato de que a equação de Schrödinger (4.1) é a projeção sobre o espaço de coordenadas da equação (4.5):

$$\langle x|H(P_x, X)|\psi\rangle = \langle x|E|\psi\rangle \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

ou, em outras palavras, a equação de Schrödinger é uma *realização* da equação de operadores (A.6). De forma geral, sempre que for possível expressar uma equação de operadores no espaço de estados em termos de operadores diferenciais num espaço de coordenadas ou polinômios, estamos trabalhando com uma realização da equação. Uma vez feita uma realização sobre a equação (A.6), podemos solucioná-la supondo uma auto-função polinomial $Q(u)$ dependente de parâmetros " ν_i " sujeitos a uma equação de restrição. Se conseguirmos expressar nossa equação de autovalores na forma (A.8), $Q(u)$ será uma auto-função do Hamiltoniano sempre que os parâmetros obedecerem a equação (A.9), as *equações alternativas do ansatz de Bethe* para o sistema. Assim, encontramos as auto-energias do sistema resolvendo uma equação diferencial ordinária de segunda ordem. Note que, dependendo do modelo em questão, teremos diferentes expressões para $\alpha(\nu_i)$ e $\beta(\nu_i)$ em (A.9), como ficará explícito na próxima seção.

A.4 Soluções Exatas para o modelo

Neste capítulo vamos derivar as equações do ansatz de Bethe e a correspondente energia do modelo de condensados de Bose-Einstein discutido no capítulo 2 através de dois métodos diferentes. O Hamiltoniano que descreve o sistema formado por dois CBE acoplados por tunelamento Josephson é dado por

$$H = \frac{k}{8} (N_1 - N_2)^2 - \frac{\mu}{2} (N_1 - N_2) - \frac{\epsilon}{2} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1).$$

A seguir, apresentaremos a solução deste modelo através do método do ansatz de Bethe apresentado em duas formulações diferentes.

A.4.1 EAB e energias na forma de produtório

Seguindo o segundo capítulo, escolhemos a seguinte representação para a álgebra de Yang-Baxter τ_R

$$L(u) = L_1^a(u + \omega)L_2^a(u - \omega), \quad (\text{A.11})$$

em termos da representação bosônica do *operador* $-L$ dada em (2.11), onde $\omega \in \mathbb{C}$. Explicitamente,

$$L(u) = \begin{pmatrix} (u + \omega + \eta N_1)(u - \omega + \eta N_2) + a_2^\dagger a_1 & (u + \omega + \eta N_1)a_2 + \eta^{-1}a_1 \\ (u - \omega + \eta N_2)a_1^\dagger + \eta^{-1}a_2^\dagger & a_1^\dagger a_2 + \eta^{-2} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

Uma vez que $L(u)$ satisfaz a relação

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

é fácil checar que as relações da álgebra de Yang-Baxter (3.2) são obedecidas. De (A.12), identificamos:

$$\pi(A(u)) = u^2 - \omega^2 + u\eta N + \eta^2 N_1 N_2 + \eta\omega(N_1 - N_2) + a_2^\dagger a_1,$$

$$\pi(B(u)) = ua_2 + \omega a_2 + \eta N_1 a_2 + \eta^{-1} a_1,$$

$$\pi(C(u)) = ua_1^\dagger - \omega a_1^\dagger + \eta N_2 a_1^\dagger + \eta^{-1} a_2^\dagger,$$

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

A partir da definição para a matriz de transferência temos, explicitamente,

$$t(u) = u^2 + u\eta N + \eta^2 N_1 N_2 + \eta\omega(N_1 - N_2) + a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2 + \eta^{-2} - \omega^2. \quad (\text{A.13})$$

Agora, é direto mostrar que o Hamiltoniano para dois CBE acoplados pode ser expresso a partir da matriz de transferência $t(u)$ e sua derivada como

$$H = -\kappa \left(t(u) - \frac{1}{4} (t'(0))^2 - ut'(0) - \eta^2 + \omega^2 - u^2 \right), \quad (\text{A.14})$$

onde usamos

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

e a seguinte identificação entre os parâmetros foi feita

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

Aplicando o método algébrico do ansatz de Bethe, nós encontramos

$$\pi(A(u))|0,0\rangle = (u^2 - \omega^2)|0,0\rangle,$$

$$\pi(B(u))|0,0\rangle = 0,$$

$$\pi(C(u))|0,0\rangle = (u - w)|1,0\rangle + \eta^{-1}|0,1\rangle,$$

$$\pi(D(u))|0,0\rangle = \eta^{-2}|0,0\rangle,$$

ou seja,

$$a(u) = u^2 - \omega^2, \quad d(u) = \eta^{-2}.$$

Nesse caso, as equações do ansatz de Bethe ficam

$$\eta^2(v_i^2 - \omega^2) = \prod_{j \neq i}^n \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad (\text{A.15})$$

e o espectro de autovalores para o Hamiltoniano (2.16) é

$$E = -\kappa \left(\eta^{-2} \prod_{i=1}^N \left(1 + \frac{\eta}{v_i - u} \right) - (u^2 - \omega^2) \prod_{i=1}^N \left(1 - \frac{\eta}{v_i - u} \right) - u\eta N - u^2 - \eta^{-2} + \omega^2 \right). \quad (\text{A.16})$$

Em princípio, o parâmetro espectral “ u ” pode ser escolhido livremente. Vamos então escolher $u = 0$ para simplificar a expressão de energia, que torna-se

$$E = -\kappa \left(\eta^{-2} \prod_{i=1}^N \left(1 + \frac{\eta}{v_i} \right) + \omega^2 \prod_{i=1}^N \left(1 - \frac{\eta}{v_i} \right) - \eta^{-2} + \omega^2 \right). \quad (\text{A.17})$$

Cada conjunto $\{v_i, i = 1, \dots, N\}$, solução da equação do ansatz de Bethe (A.15) parametriza um autovetor da matriz de transferência e, conseqüentemente, do Hamiltoniano (2.16) com energia dada pela equação (A.15). Assim, resolver o problema de autovalores da matriz de transferência fica reduzido a resolver as equações do ansatz de Bethe.

A.4.2 EAB e energias na forma de somatório

Começamos com as realizações de Jordan-Schwinger para a álgebra $su(2)$

$$S^+ = a_1^\dagger a_2, \quad S^- = a_2^\dagger a_1, \quad S^z = \frac{1}{2}(N_1 - N_2),$$

onde $N = N_1 + N_2$ é o número fixo de partículas do sistema. Em termos desta realização, o Hamiltoniano (2.15) pode ser expresso como

$$H = \frac{k}{2}(S^z)^2 - \mu(S^z) - \frac{\epsilon}{2}(S^+ + S^-). \quad (\text{A.18})$$

Uma representação equivalente da álgebra $su(2)$ é dada pelo mapeamento nos operadores diferenciais

$$S^+ = \frac{d}{du}, \quad S^- = Nu - u^2 \frac{d}{du}, \quad S^z = \frac{N}{2} - u \frac{d}{du},$$

agindo sobre um espaço de polinômios com base $\{1, u, u^2, \dots, u^N\}$. Nós podemos representar (A.17) em sua forma diferencial com

$$\begin{aligned} H &= \frac{k}{2} \left(\frac{N^2}{4} + (1-N)u \frac{d}{du} + u^2 \frac{d^2}{du^2} \right) - \mu \left(\frac{N}{2} - u \frac{d}{du} \right) - \frac{\epsilon}{2} \left(Nu + (1-u^2) \frac{d}{du} \right) \\ &= \frac{k}{2} u^2 \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} \left((k(1-N) + 2\mu)u - \epsilon_j(1-u^2) \right) \frac{d}{du} - \frac{\epsilon_j N}{2} u + \frac{kN^2}{8} - \frac{\mu N}{2}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Agora, encontrar o espectro do Hamiltoniano (2.3) é equivalente a resolver a equação de autovalores

$$HQ(u) = EQ(u), \quad (\text{A.20})$$

onde H é dado por (A.17) e $Q(u)$ é uma função polinomial em u de ordem N . Podemos expressar $Q(u)$ em termos de suas raízes $\{\nu_j\}$:

$$Q(u) = \prod_{j=1}^N (u - \nu_j).$$

Depois de reagruparmos, a equação (A.17) fica na forma

$$\alpha(u)Q''(u) + \beta(u)Q'(u) + \gamma(u)Q(u) = EQ(u),$$

onde

$$\begin{aligned} \alpha(u) &= \frac{k}{2}u^2, \\ \beta(u) &= \frac{(u^2 - 1)\epsilon_j}{2} + \frac{(2\mu - k(N-1))}{2}u, \end{aligned}$$

$$\gamma(u) = \frac{kN^2}{8} - \frac{N\mu}{2} - \frac{N\epsilon u}{2}.$$

Seguindo a discussão anterior, efetuando (A.19) nos pontos $u = \nu_i$, os parâmetros devem satisfazer as *equações do ansatz de Bethe (EAB)*

$$\frac{\epsilon\nu_i^2 + (k(1-N) - 2\mu)\nu_i - \epsilon}{k\nu_i^2} = \sum_{j \neq i}^N \frac{2}{\nu_j - \nu_i}. \quad (\text{A.21})$$

Escrevendo a expansão assintótica $Q(u) \sim u^N - u^{N-1} \sum_{j=1}^N \nu_j$ e considerando os termos de ordem N em (5.8), os autovalores de energia encontrados são

$$E = \frac{kN^2}{8} - \frac{\mu N}{2} + \frac{\epsilon}{2} \sum_{j=1}^N \nu_j. \quad (\text{A.22})$$

Assim, encontramos agora as EAB na forma aditiva. O problema de mapear as equações (A.15) e (A.16) nas equações (A.20) e (A.21) permanece uma questão em aberto [43].

Com o objetivo de checar a consistência e verificar que, de fato, estas duas formulações fornecem o mesmo resultado, vamos resolver numericamente as *EAB* para alguns casos de N pequenos no próximo apêndice.

Apêndice B

Análise das soluções exatas e comparação numérica

Como vimos no apêndice anterior, as auto-energias para o Hamiltoniano (2.16) podem ser encontradas a partir de duas formulações distintas do método do ansatz de Bethe. Neste apêndice vamos fazer uma breve análise das simetrias das auto-energias, resolver numericamente as diferentes EAB para alguns casos de N pequenos e comparar os resultados numéricos obtidos para cada uma das formulações, checando a consistência para estes exemplos.

B.1 Ansatz de Bethe na forma de produtório

As auto-energias são dadas por

$$E = -\kappa \left(\eta^{-2} \prod_{i=1}^n \left(1 + \frac{\eta}{v_i} \right) + \omega^2 \prod_{i=1}^n \left(1 - \frac{\eta}{v_i} \right) - \eta^{-2} + \omega^2 \right), \quad (\text{B.1})$$

onde as variáveis v_j devem satisfazer as seguintes equações do ansatz de Bethe:

$$\eta^2 (v_i^2 - \omega^2) = \prod_{j \neq i}^n \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}, \quad (\text{B.2})$$

lembrando que

$$\frac{k}{4} = \frac{\kappa\eta^2}{2}, \quad \frac{\mu}{2} = -\kappa\eta\omega \quad e \quad \frac{\epsilon}{2} = \kappa.$$

Se η , ω e v_j são os parâmetros referentes ao caso repulsivo ($k > 0$), podemos definir os novos parâmetros para o caso atrativo ($k < 0$) como

$$\eta' = i\eta, \quad \omega' = i\omega, \quad v'_j = iv_j.$$

Utilizando esses novos parâmetros, podemos reescrever as equações do ansatz de Bethe

como

$$\eta'^2 (v_i'^2 - \omega'^2) = \prod_{j \neq i}^n \frac{v_i' - v_j' - \eta'}{v_i' - v_j' + \eta'}.$$

Portanto, as EAB permanecem inalteradas. As energias como função das variáveis η' , ω' , v_j' relacionam-se com as energias nas variáveis η , ω , v_j por

$$E(\eta', \omega', \{v_j'\}) = -E(\eta, \omega, \{v_j\}).$$

Assim, é fácil notar que o módulo da energia do estado fundamental no caso atrativo é igual ao módulo da energia do máximo estado excitado no caso repulsivo e, além disso, que as soluções das BAE para o estado fundamental diferem das soluções das BAE para o máximo estado excitado por uma constante multiplicativa imaginária.

A partir dos resultados numéricos obtidos e observando as simetrias das soluções das EAB podemos compor um quadro geral a respeito das soluções das EAB na forma de produto, como ilustrado na tabela abaixo:

	Estado fundamental	Estado máximo excitado
Atrativo ($k < 0$)	$v_k = ia_k, \{a_k \in \mathbb{R} \mid a_k < 0\}$	$v_k = \pm x_k + iy_k, \{x_k, y_k \in \mathbb{R}\}$
Repulsivo ($k > 0$)	$v_k = x_k \pm iy_k, \{x_k, y_k \in \mathbb{R}\}$	$v_k = a_k, \{a_k \in \mathbb{R} \mid a_k < 0\}$

B.2 Ansatz de Bethe na forma de somatório

Por este método, as auto-energias do hamiltoniano são dadas por

$$E = \frac{kN^2}{8} - \frac{\mu N}{2} + \frac{\epsilon_j}{2} \sum_{j=1}^N \nu_j, \quad (\text{B.3})$$

onde as variáveis ν_j devem satisfazer as seguintes equações do ansatz de Bethe:

$$\frac{\epsilon \nu_i^2 + (k(1-N) - 2\mu) \nu_i - \epsilon}{k \nu_i^2} = \sum_{j \neq i}^N \frac{2}{\nu_j - \nu_i}. \quad (\text{B.4})$$

Estas equações são válidas para qualquer k . Definindo $k' = |k|$, vemos que as equações acima permanecem inalteradas no caso repulsivo, $k > 0$. Por outro lado, no caso atrativo, $k < 0$, podemos escrever

$$\frac{\epsilon \nu_i^2 + (-k'(1-N) - 2\mu) \nu_i - \epsilon}{-k' \nu_i^2} = \sum_{j \neq i}^N \frac{2}{\nu_j - \nu_i}. \quad (\text{B.5})$$

No caso particular em que $\mu = 0$ re-obtemos a equação (B.4) para o parâmetro k' fazendo a substituição de variáveis $\nu_i' = -\nu_i$.

$$\frac{\epsilon \nu_i'^2 + (k' (1 - N)) \nu_i' - \epsilon}{k' \nu_i'^2} = \sum_{j \neq i}^N \frac{2}{\nu_j' - \nu_i'}.$$

Para casos mais gerais, onde $\mu \neq 0$, as simetrias entre as soluções exatas para os casos repulsivo e atrativo não foram bem estabelecidas. Para $\mu = 0$, as energias para os casos repulsivo e atrativo relacionam-se por

$$E(k < 0, \{\nu_j'\}) = -E(k > 0, \{\nu_j\}). \quad (\text{B.6})$$

Assim, é fácil notar que, no caso especial $\mu = 0$, o módulo da energia do estado fundamental no caso atrativo é igual ao módulo da energia do máximo estado excitado no caso repulsivo e, além disso, que as soluções das BAE para o estado fundamental diferem das soluções das EAB para o máximo estado excitado por uma constante multiplicativa real.

A partir dos resultados numéricos obtidos e da observando as simetrias das soluções exatas podemos compor um quadro geral a respeito das soluções das EAB na forma de produtório, como ilustrado na tabela abaixo:

	Estado fundamental	Estado máximo excitado
Atrativo ($k < 0$)	$\nu_k = w_k \pm iz_k, \{w_k, z_k \in \mathbb{R}\}$	$\nu_k = b_k, \{b_k \in \mathbb{R} b_k > 0\}$
Repulsivo ($k > 0$)	$\nu_k = b_k, \{b_k \in \mathbb{R} b_k < 0\}$	$\nu_k = -w_k \mp iz_k, \{w_k, z_k \in \mathbb{R}\}$

A seguir, apresentamos o resultado numérico das soluções das BAE nas formulações produtório e somatório. Os resultados foram obtidos a partir do programa de cálculo numérico PIP e as energias comparadas às dadas pela diagonalização exata do Hamiltoniano utilizando o Fortran. Observe que, nos casos estudados, obtemos completa correspondência nos valores de energia do sistema por ambas as formulações do Ansatz de Bethe. Utilizaremos $N = 4$, $\mu = 0$ e $\epsilon = 1$ e variaremos o parâmetro k .

Caso atrativo: $k < 0$

Estado fundamental

k=-0.005

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = 0 - 12.5576587i$ $v_2 = 0 - 13.6566012i$ $v_3 = 0 - 14.7059182i$ $v_4 = 0 - 15.8615305i$ $E_0^\Pi = -2.00250470$	$\nu_{1,2} = -0.99931 \pm 0.03708i$ $\nu_{3,4} = -0.99319 \pm 0.11649i$ $E_0^\Sigma = -2.002505193$	$E_0^F = -2.002514969$

k=-0.025

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = 0 - 4.818681088i$ $v_2 = 0 - 5.884430982i$ $v_3 = 0 - 6.938524916i$ $v_4 = 0 - 8.132426980i$ $E_0^\Pi = -2.01261867$	$\nu_{1,2} = -0.99657 \pm 0.08275i$ $\nu_{3,4} = -0.96605 \pm 0.25863i$ $E_0^\Sigma = -2.012619305$	$E_0^F = -2.01261598$

k=-0.05

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = 0 - 3.022784881i$ $v_2 = 0 - 4.066519843i$ $v_3 = 0 - 5.125373169i$ $v_4 = 0 - 6.348985908i$ $E_0^\Pi = -2.025480707$	$\nu_{1,2} = -0.99316 \pm 0.11647i$ $\nu_{3,4} = -0.93232 \pm 0.36164i$ $E_0^\Sigma = -2.025481200$	$E_0^F = -2.025484669$

k=-0.25

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = 0 - 0.7681061446i$ $v_2 = 0 - 1.746464491i$ $v_3 = 0 - 2.841989907i$ $v_4 = 0 - 4.19678240i$ $E_0^\Pi = -2.138335736$	$\nu_{1,2} = -0.96674 \pm 0.25578i$ $\nu_{3,4} = -0.67170 \pm 0.74091i$ $E_0^\Sigma = -2.138836182$	$E_0^F = -2.138846989$

k=-0.5

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = 0 - 0.3249904484i$ $v_2 = 0 - 1.298301958i$ $v_3 = 0 - 2.436616779i$ $v_4 = 0 - 3.890688415i$ $E_0^\Pi = -2.310960739$	$\nu_{1,2} = -0.93608 \pm 0.35179i$ $\nu_{3,4} = -0.37488 \pm 0.92707i$ $E_0^\Sigma = -2.310961008$	$E_0^F = -2.310962019$

k=-1

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = 0 - 0.090583125i$ $v_2 = 0 - 1.163827049i$ $v_3 = 0 - 2.387958413i$ $v_4 = 0 - 3.972258416i$ $E_0^\Pi = -2.807313501$	$\nu_{1,2} = -0.88488 \pm 0.46582i$ $\nu_{3,4} = 0.07757 \pm 0.99699i$ $E_0^\Sigma = -2.807313725$	$E_0^F = -2.807313698$

Estado máximo excitado

k=-0.005

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = \pm 1.64945 + 14.07481i$ $\nu_{3,4} = \pm 0.52417 + 14.10372i$ $E_{me}^\Pi = 1.997505377$	$v_1 = 1.123771981$ $v_2 = 1.037804723$ $v_3 = 0.9635724121$ $v_4 = 0.8898062360$ $E_{me}^\Sigma = 1.997504676$	$E_{me}^F = 1.997504978$

k=-0.025

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = \pm 1.64452 + 6.17398i$ $\nu_{3,4} = \pm 0.52417 + 14.1037i$ $E_{me}^\Pi = 1.987617103$	$v_1 = 1.297785131$ $v_2 = 1.086605917$ $v_3 = 0.9202968479$ $v_4 = 0.7705435791$ $E_{me}^\Sigma = 1.98765738$	$E_{me}^F = 1.987644659$

k=-0.05

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = \pm 1.63839 + 4.25908i$ $\nu_{3,4} = \pm 0.51979 + 4.35169i$ $E_{me}^{\Pi} = 1.9754557626$	$v_1 = 1.445048306$ $v_2 = 1.124804287$ $v_3 = 0.8890435532$ $v_4 = 0.6920183585$ $E_{me}^{\Sigma} = 1.975457268$	$E_{me}^F = 1.97549652$

k=-0.25

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = \pm 1.59041 + 1.52630i$ $\nu_{3,4} = \pm 0.49961 + 1.74449i$ $E_{me}^{\Pi} = 1.885396623$	$v_1 = 2.256835732$ $v_2 = 1.303966282$ $v_3 = 0.7668909953$ $v_4 = 0.4430982663$ $E_{me}^{\Sigma} = 1.885395638$	$E_{me}^F = 1.885399875$

k=-0.5

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = \pm 1.53256 + 0.74692i$ $\nu_{3,4} = \pm 0.47286 + 1.07357i$ $E_{me}^{\Pi} = 1.78949287$	$v_1 = 3.107299743$ $v_2 = 1.460990625$ $v_3 = 0.684467889$ $v_4 = 0.3218122839$ $E_{me}^{\Sigma} = 1.787290143$	$E_{me}^F = 1.787269871$

k=-1

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = \pm 1.42206 + 0.00572i$ $\nu_{3,4} = \pm 0.41575 + 0.56644i$ $E_{me}^{\Pi} = 1.623650187$	$v_1 = 4.731428888$ $v_2 = 1.724746303$ $v_3 = 0.5798055010$ $v_4 = 0.2113526429$ $E_{me}^{\Sigma} = 1.623651667$	$E_{me}^F = 1.623650698$

Caso repulsivo: $k > 0$

Estado fundamental

k=0.005

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = 14.07481 \pm 1.64945i$ $\nu_{3,4} = 14.10372 \pm 0.52417i$ $E_0^\Pi = -1.99750377$	$\nu_1 = -1.123771981$ $\nu_2 = -1.037804723$ $\nu_3 = -0.9635724121$ $\nu_4 = -0.8898602360$ $E_0^\Sigma = -1.997504676$	$E_0^F = -1.997504676$

k=0.025

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = 6.17398 \pm 1.64452i$ $\nu_{3,4} = 6.23900 \pm 0.52223i$ $E_0^\Pi = -1.987617103$	$\nu_1 = -1.297784131$ $\nu_2 = -1.086605917$ $\nu_3 = -0.9202968479$ $\nu_4 = -0.7705435791$ $E_0^\Sigma = -1.987615738$	$E_0^F = -1.987615369$

k=0.05

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = 4.25908 \pm 1.63839i$ $\nu_{3,4} = 4.35169 \pm 0.51979i$ $E_0^\Pi = -1.9754557626$	$\nu_1 = -1.445048306$ $\nu_2 = -1.124804287$ $\nu_3 = -0.8890435532$ $\nu_4 = -0.6920186885$ $E_0^\Sigma = -1.975457268$	$E_0^F = -1.975463124$

k=0.25

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = 1.52630 \pm 1.59041i$ $\nu_{3,4} = 1.74449 \pm 0.49961i$ $E_0^\Pi = -1.885396623$	$\nu_1 = -2.256835732$ $\nu_2 = -1.303966282$ $\nu_3 = -0.7668909953$ $\nu_4 = -0.4430982663$ $E_0^\Sigma = -1.885395789$	$E_0^F = -1.885395637$

k=0.5

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = 0.74692 \pm 1.53256i$ $\nu_{3,4} = 1.07357 \pm 0.47286i$ $E_0^\Pi = -1.7894287$	$v_1 = -3.107299743$ $v_2 = -1.460990625$ $v_3 = -0.684467889$ $v_4 = -0.321822839$ $E_0^\Sigma = -1.78725698$	$E_0^F = -1.787290144$

k=1

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$\nu_{1,2} = 0.005721 \pm 1.42206i$ $\nu_{3,4} = 0.56644 \pm 0.41575i$ $E_0^\Pi = -1.623650187$	$v_1 = -4.731428888$ $v_2 = -1.724716303$ $v_3 = -0.5798055010$ $v_4 = -0.2113526429$ $E_0^\Sigma = -1.625652778$	$E_0^F = -1.623651667$

Estado máximo excitado

k=0.005

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = -12.5576587$ $v_2 = -13.6566012$ $v_3 = -14.7059182$ $v_4 = -15.8615305$ $E_{me}^\Pi = 2.00250470$	$\nu_{1,2} = 0.99931 \pm 0.03708i$ $\nu_{3,4} = 0.99319 \pm 0.11649i$ $E_{me}^\Sigma = 2.002505193$	$E_{me}^F = -2.002504969$

k=0.025

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = -4.818681088$ $v_2 = -5.884430982$ $v_3 = -6.938524916$ $v_4 = -8.132426980$ $E_{me}^\Pi = 2.01261867$	$\nu_{1,2} = 0.99657 \pm 0.08275i$ $\nu_{3,4} = 0.96605 \pm 0.25863i$ $E_{me}^\Sigma = 2.012619305$	$E_{me}^F = 2.01261598$

k=0.05

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = -3.022784881$ $v_2 = -4.066519843$ $v_3 = -5.125373169$ $v_4 = -6.348985908$ $E_{me}^{\Pi} = 2.025480707$	$\nu_{1,2} = 0.99316 \pm 0.11647i$ $\nu_{3,4} = 0.93232 \pm 0.36164i$ $E_{0me}^{\Sigma} = 2.025481200$	$E_{me}^F = 2.025484669$

k=0.25

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = -0.7681061446$ $v_2 = -1.746464491$ $v_3 = -2.841989907$ $v_4 = -4.196782404$ $E_{me}^{\Pi} = 2.138335736$	$\nu_{1,2} = 0.96674 \pm 0.25578i$ $\nu_{3,4} = 0.67170 \pm 0.74091i$ $E_{me}^{\Sigma} = 2.138836182$	$E_{me}^F = 2.138846989$

k=0.5

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = -0.3249904484i$ $v_2 = -1.298301958i$ $v_3 = -2.436616779i$ $v_4 = -3.890688415i$ $E_{me}^{\Pi} = 2.310960739$	$\nu_{1,2} = 0.93608 \pm 0.35179i$ $\nu_{3,4} = 0.37488 \pm 0.92707i$ $E_{me}^{\Sigma} = 2.310961008$	$E_{me}^F = 2.310962019$

k=1

Soluções produtório	Soluções somatório	Energia Fortran
$v_1 = -0.090583125i$ $v_2 = -1.163827049i$ $v_3 = -2.387958413i$ $v_4 = -3.972258416i$ $E_{me}^{\Pi} = 2.807313501$	$\nu_{1,2} = 0.88488 \pm 0.46582i$ $\nu_{3,4} = 0.07757 \pm 0.99699i$ $E_{me}^{\Sigma} = 2.807313725$	$E_{me}^F = 2.807313698$

Referências Bibliográficas

- [1] BETHE, H. *On the theory of metals. Part I. Eigenvalues and eigenfunctions of the linear atomic chain.* ZEITUNG PHYSIC, v. **71**, p. 205 - 206 (1931)
- [2] LIEB, E. H.; LINIGER, W. *Exact analysis of an interacting Bose gas. I. The general solution and the ground state.* PHYSICS REVIEW, v. **130**, p. 1605 - 1616 (1963).
- [3] LIEB, E. *Exact solution of the problem of the entropy of two-dimensional ice.* PHYSICS REVIEW LETTERS v. **18**, p. 692 - 694 (1967).
- [4] YANG, C. N. *Some exact results for the many body problems in one dimension with repulsive delta function interaction.* PHYSICS REVIEW LETTERS, v. **19**, p. 1312 - 1314 (1967).
- [5] BAXTER, R. *Exactly solved models in statistical mechanics.* Academic Press (1982).
- [6] FADDEEV, L. D.; SKLYANIN, E. K.; TAKHTAJAN, A. *The quantum inverse problem method. 1,* THEORETICAL MATHEMATICAL PHYSICS, v. **40**, p. 688-706 (1980)
- [7] FADDEEV, L. D. *How Algebraic Bethe Ansatz works for integrable model.* ANDREJEROSKI LECTURES. SFB288 preprint 70 (1993).
- [8] IACHELLO, F.; ARIMO, A. *The interacting boson model.* Cambridge University Press (1995).
- [9] ESSLER, F. H. L.; KOREPIN, V. E. *Exactly solvable models of strongly correlated electrons.* WORLD SCIENTIFIC (1994).
- [10] MINAHAN, J. A.; ZAREMBO, K. *The Bethe ansatz for $N=4$ super-Yang-Mills.* JOURNAL OF HIGH ENERGY PHYSICS, v. **03**, hep-th/0212208 (2003).
- [11] BEISERT, N.; STAUDACHER, M. *Long-range $PSU(2, 2|4)$ Bethe ansatz for Gauge Theory and Strings.* NUCLEAR PHYSICS B, v. **727**, hep-th/0504190 (2005).
- [12] FOERSTER, A.; RAGOUCY, E. *Exactly solvable models in atomic and molecular physics.* NUCLEAR PHYSICS B, v. **777**, p. 373 - 403 (2007).

- [13] CORNELL, E. A.; WIEMAN, C. E. *Nobel lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments*. REVIEW OF MODERN PHYSICS., v. **74**, p. 875-893 (2002).
- [14] CORNELL, E. A. *Very cold indeed: the nanokelvin physics of Bose-Einstein condensation*. JOURNAL OF RESEARCH OF THE NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY, v. **101**, p. 419-434 (1996).
- [15] JOSEPHSON, B. D. *Possible new effects in superconductive tunnelling*. PHYSICS LETTERS, v. **1**, n.7, p. p. 251-253 (1962).
- [16] SACHDEV, S. *Quantum phase transitions*. Cambridge University Press (1999).
- [17] LEGGETT, A. J. *Bose-Einstein condensation In the alkali gases: some fundamental concepts*. REVIEW OF MODERN PHYSICS, v. **73**, p. 307-359 (2001).
- [18] KUNDU, A. *Yang-Baxter and generation of quantum integrabel models*. THEORETICAL AND MATHEMATICAL PHYSICS, v. **151**, p. 831-842 (2007).
- [19] FOERSTER, A.; LINKS, J.; ZHOU, H-Q. *Exact Solvability in contemporary physics*. CLASSICAL AND QUANTUM INTEGRABLE SYSTEMS (I.O.P. Publishing Ltd.) (2003).
- [20] LINKS, J. et al. *Algebraic Bethe ansatz method for the exact calculation of energy spectra and form factors: applications to models of Bose-Einstein condensates and metallic nanograins*. JOURNAL PHYSICAL A, v. **36**, p. R63-R104 (2003).
- [21] SKLYANIN, E. K. *Quantum Inverse Scattering Method. Selected Topics*. Four lectures given at Nankai Institute of Mathematics, Tianjin, China, 5-13 April (1991).
- [22] ZAMOŁODCHIKOV, A. B.; ZAMOŁODCHIKOV Al. B. *Factorized S-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models*. ANNALS OF PHYSICS, v. **120**, p. 253 - 291 (1995).
- [23] RAGHAVAN, S. et al. *Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects, π oscillations and macroscopic quantum self-trapping*. PHYSICAL REVIEW A, v. **59**, p. 620-633 (1999).
- [24] TONEL, A. P.; LINKS, J.; FOERSTER, A. *Behaviour of the energy gap in a model of Josephson coupled Bose-Einstein condensates*. JOURNAL OF PHYSICS A: MATHEMATICAL AND GENERAL, v. **38**, n. 31 (2005).
- [25] TONEL, A. P.; LINKS, J.; FOERSTER, A. *Quantum dynamics of a model for two Josephson-coupled Bose-Einstei condensates*. JOURNAL PHYSICAL A, v. **38**, p. 1235 - 1245 (2005).

- [26] SANTOS, G. *Modelos de condensados de Bose-Einstein exatamente solúveis*. Tese de Doutorado IF-UFRGS, Porto Alegre (2007).
- [27] HINES, A. P.; McKENZIE, R. H.; MILBURN, G. J. *Quantum entanglement and fixed-point bifurcations*. PHYSICAL REVIEW A, v. **71**, p. 042303-042309 (2005).
- [28] SCHNIDER, S.; MILBURN, G. J. *Entanglement in the steady state of a collective-angular-momentum (Dike) model*. PHYSICAL REVIEW A, v. **65**, p. 0421075 (2002).
- [29] PLENIO, M. B.; VIRMANI, S. *An introduction to entanglement measures*. QUANTUM INFORMATION COMPUTATION, v. **7**, p. 1 (2007).
- [30] GU, S. J. et al. *Entanglement and quantum phase transitions in the extended Hubbard model*. PHYSICAL REVIEW LETTERS, v. **93**, p. 0864024 (2004).
- [31] GU, S. J. et al. *Entanglement, quantum phase transitions and scaling in the XXZ chain*. PHYSICAL REVIEW A, Melville, v. **68**, p. 0423304, (2003).
- [32] BOUNSANTE, P.; VEZZANI, A. *Ground-state fidelity e bipartite entanglement in the Bose-Hubbard model*. PHYSICAL REVIEW LETTERS, Melville, v. **98**, p. 1106014 (2007).
- [33] LAMBERT, M.; EMARY, C.; BRANDES, T. *Entanglement and entropy in a spin-boson quantum phase transition*. PHYSICAL REVIEW A, v. **71**, n. 5, p. 0538048 (2005).
- [34] ZANARDI, P.; PAUNKOVIC, N. *Ground state overlap and quantum phase transitions*. PHYSICAL REVIEW E, v. **74**, p. 0311236 (2006).
- [35] SANTOS, G.; FOERSTER, A.; LINKS, J.; MATTEI, E.; DAHMEN, S. R. *Quantum phase transitions in an interacting atom-molecule boson model*. PHYSICAL REVIEW A, v. **81**, p. 063621 (2010).
- [36] DUNCAN, M. et al. *Emergent quantum phases in a heteronuclear molecular Bose-Einstein condensate model*. NUCLEAR PHYSICS B, v. **767**, p. 227-249 (2007).
- [37] KANAMOTO, R.; UEDA, M. *Quantum phase transitions in one-dimensional Bose-Einstein condensates with attractive interactions*. PHYSICAL REVIEW A, v. **67**, p. 0136087 (2003).
- [38] PAN, F.; DRAAYER, J. P. *Quantum critical behavior of two coupled Bose-Einstein condensates*. PHYSICAL LETTERS A, v. **339**, p. 403-407 (2005).
- [39] OELKERS, N.; LINKS, J. *Ground-state properties of the attractive one-dimensional Bose-Hubbard model*. PHYSICAL REVIEW B, v. **75**, p. 115119 15 (2007).

- [40] NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press (2000).
- [41] BENNETT, C. H.; DiVICENZO, D. P. *Quantum information and computation*. NATURE, v. **404**, p. 247-255 (2000).
- [42] LINKS, J.; ZHAO, S. Y. *A Bethe ansatz study of the ground state energy for the repulsive Bose-Hubbard dimer*. JOURNAL OF STATISTICAL MECHANICS: THEORY AND EXPERIMENT, v. **x**, p. 1-16. (2009).
- [43] LINKS, J.; HIBBERD, K. E. *Bethe Ansatz Solutions of the Bose-Hubbard Dimer*. SYMMETRY, INTEGRABILITY AND GEOMETRY: METHODS AND APPLICATIONS, v. **2**, p. 1-8 (2006).
- [44] ZHOU, H. Q.; LINKS, J.; McKENZIE, H.; GUAN, X. W. *Exact results for a tunnel-coupled pair of trapped Bose-Einstein condensates*. JOURNAL OF PHYSICS A: MATHEMATICAL AND GENERAL, v. **36**, p. L113-L119 (2002).
- [45] TAKAHASHI, M. *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. Cambridge University Press (1999).
- [46] ROMÁNA, J. M.; SIERRA, G.; DUKELSKYB, J. *Large- N limit of the exactly solvable BCS model: analytics versus numerics*. NUCLEAR PHYSICS B, v. **634**, p. 483-510 (2002).
- [47] IBANEZ, M.; LINKS, J.; SIERRA, G.; ZHAO, S. Y. *Exactly solvable pairing model for superconductors with $p(x)+ip(y)$ -wave symmetry*. PHYSICAL REVIEW B, v. **79**, p. 180501-1-180501-4 (2009).