

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

Modelos Integráveis de Tunelamento Quântico

Juliana Harmatiuk de Oliveira

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado para a
obtenção do grau de Bacharel no Curso de Física
Orientadora: Prof. Dra. Angela Foerster
Coorientador: Dr. Diefferson Rubeni

Porto Alegre - RS

Dezembro de 2017

Agradecimentos

À minha família, de quem tenho muita saudade, e quem me abriu a possibilidade de seguir com o meu sonho através de todo o amparo sem medida prestado durante todos esses anos que estamos distantes. Não existem palavras para agradecer. Muito obrigada.

Aos meus amigos da UFSC, da UFRGS, e a todos que conheci durante essa trajetória. Foi um caminho bastante difícil até aqui, e tenho plena certeza de que não teria conseguido percorrê-lo sem o apoio recebido. Muito obrigada pelas várias conversas, desabafos, e risadas compartilhadas.

A todos os meus professores, que me servem de inspiração desde o ensino médio, e que me deram esse sonho que é a Física. Muito obrigada pelos ensinamentos, pelos conselhos, e por tornar tudo isso possível.

À minha orientadora, Professora Angela Foerster, que me deu a oportunidade de realizar esse trabalho, com o qual eu aprendi e amadureci muito. Eu aproveitei muito todas as etapas desse processo, e só tenho a agradecer pelo aprendizado, pelas discussões e pelos conselhos. Muito obrigada.

E ao meu coorientador, Diefferson Rubeni, sem a ajuda do qual não seria possível ter aprendido tanto durante esses últimos meses. Muito obrigada pelas inúmeras dicas, conversas, e principalmente pela paciência e dedicação inesgotáveis.

Resumo

Desde a realização experimental de condensados de Bose-Einstein, em 1995, busca-se compreender em maiores detalhes o seu comportamento. Modelos integráveis de gases ultrafrios oferecem a oportunidade de realizar esse estudo, devido às suas propriedades algébricas que permitem a obtenção, em muitos casos, da solução exata desses sistemas.

Neste trabalho, determinamos através de diferentes abordagens a integrabilidade de dois modelos importantes para o estudo do fenômeno de tunelamento quântico em gases ultrafrios, o modelo de Bose-Hubbard canônico e o modelo de Bose-Hubbard estendido, cuja relevância reside na possibilidade de serem reproduzidos experimentalmente.

Para tanto, é realizada uma discussão sobre o conceito de integrabilidade quântica, e então os critérios utilizados para a determinação da integrabilidade dos sistemas estudados são apresentados, sendo eles: o método do espalhamento inverso quântico, a existência de soluções exatas para os modelos e o estudo da estatísticas de seus níveis de energia.

Abstract

Since the experimental realisation of Bose Einstein condensates in 1995, we strive to understand their behavior in greater detail. Integrable models of ultracold gases offer the opportunity of studying such systems, due to their algebraic properties which allows us, in many cases, to obtain their exact solutions.

In this work we determine, through different approaches, the integrability of two important models in the study of the quantum tunnelling phenomena in ultracold gases, namely the canonical Bose-Hubbard model and the extended Bose-Hubbard model, which relevance resides in the possibility of being experimentally realised.

For this purpose, we discuss on the concept of quantum integrability, and present the different criteria used to determine the integrability of the studied systems, being: the quantum inverse scattering method, the existence of exact solutions for our models and the study of their energy level statistics.

Sumário

| | | |
|----------|-----------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Introdução | 6 |
| 2 | Integrabilidade | 8 |
| 2.1 | Método do Espalhamento Quântico Inverso | 9 |
| 2.2 | Solução Exata | 12 |
| 2.3 | Distribuição dos Níveis de Energia | 14 |
| 3 | Modelos Integráveis de Gases Ultrafrios | 17 |
| 3.1 | Modelo canônico de Bose-Hubbard de dois sítios | 17 |
| 3.1.1 | Solução exata | 18 |
| 3.1.2 | Distribuição dos Níveis de Energia | 20 |
| 3.1.3 | Solução pelo Ansatz algébrico | 21 |
| 3.2 | Modelo estendido de Bose-Hubbard de dois sítios | 24 |
| 3.2.1 | Solução exata | 24 |
| 3.2.2 | Distribuição dos Níveis de Energia | 26 |
| 4 | Conclusão | 27 |
| A | Representação Matricial | 28 |
| A.1 | N=2 | 29 |
| A.2 | N=10 | 30 |
| B | Pares de Lax | 32 |

Capítulo 1

Introdução

Os modelos integráveis constituem uma categoria especial de sistemas físicos, cuja origem pode ser estabelecida junto ao surgimento da mecânica newtoniana. Logo após a formulação das equações de Newton, interessava encontrar a solução exata para alguns casos interessantes e não-triviais. O mais famoso da época, o problema de Kepler, foi resolvido pelo próprio Newton. Além deste, somente uns outros poucos casos puderam ser tratados analiticamente.

Após a reformulação da mecânica newtoniana por Hamilton, Liouville refinou a noção de integrabilidade para sistemas Hamiltonianos, oferecendo uma abordagem genérica para a solução de sistemas dinâmicos particulares pela técnica de quadraturas. Embora diversos sistemas integráveis tenham sido descobertos durante o século XIX, a matéria permaneceu dormente até boa parte do século XX, principalmente devido aos resultados de Poincaré que apontavam a integrabilidade como uma propriedade excepcional para os sistemas usualmente considerados pela mecânica clássica. Somente a partir de 1960 foi desenvolvido um método sistemático para a análise e criação de sistemas clássicos integráveis, conhecido como Método do Espalhamento Clássico Inverso (MECI), devido a Gardner, Kruskal e Miura [1], que generalizou o conceito de integrabilidade de Liouville para uma ampla gama de modelos clássicos.

Embora bem estabelecida na mecânica clássica, o conceito de integrabilidade para sistemas quânticos ainda não está tão bem fundamentado. A busca por modelos quânticos integráveis remonta aos trabalhos de Hans Bethe e a sua solução por ansatz para o modelo de Heisenberg, em 1931 [2]. O modelo de Heisenberg consiste em uma cadeia unidimensional de spins $1/2$ espacialmente fixos, admitindo interação dos spins em vizinhança imediata, e levando-se em conta condições de contorno periódicas [2]. Bethe construiu seu ansatz em função de alguns parâmetros livres [3], de maneira que ao impor sobre o estado a condição de autoestado do Hamiltoniano, fosse possível obter equações de restrição sobre esses parâmetros, chamadas Equações do Ansatz de Bethe (EAB). O cumprimento desse conjunto de equações restritivas é necessário para que o ansatz de Bethe seja autoestado do modelo de Heisenberg.

Seguindo o trabalho pioneiro de Bethe, uma variedade de problemas distintos puderam ser resolvidos exatamente pelo método do ansatz de Bethe [4], entre eles o modelo de Lieb-Liniger, em 1963 [5] e o modelo de 6-vértices da mecânica estatística, também resolvido por Lieb em 1967 [6] e generalizado para o modelo de 8-vértices por Baxter [7]. Durante este período de ativa pesquisa, surgiu a equação de Yang-Baxter (EYB), cuja solução garante condições suficientes para a construção de modelos exatamente solúveis (incluindo sistemas quânticos em uma dimensão e modelos estatísticos em duas dimensões). Uma característica fundamental da

EYB é que ela pode ser utilizada para construir uma família de matrizes mutuamente comutativas, chamadas matrizes de transferência, que facilita a aplicação do ansatz de Bethe.

A formulação algébrica do método do ansatz de Bethe ganha força a partir da década de 1970, devido aos trabalhos de Faddeev e o grupo de físicos matemáticos de São Petesburgo [8], com o desenvolvimento do Método do Espalhamento Quântico Inverso (MEQI), que é a união de duas tradições da área de sistemas integráveis até então não relacionadas: o método do ansatz de Bethe e o Método do Espalhamento Clássico Inverso [9]. A partir dessa importante formulação, uma série de modelos puderam ser resolvidos exatamente, como os modelos de escada de spin (ver, por exemplo, [4]) e o modelo de Bose-Hubbard de dois sítios [4]. Entretanto, a aplicabilidade do MEQI é limitada, e outras abordagens são necessárias para a verificação da integrabilidade de um modelo quântico [10].

Durante boa parte de sua história os modelos integráveis quânticos eram considerados “toy models”, sendo importantes no desenvolvimento de novas ferramentas analíticas mas sem aplicações diretas a sistemas físicos reais. Esta situação mudou drasticamente a partir de 1995, com a obtenção dos primeiros condensados de Bose-Einstein [11]. 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, formando um gás quântico degenerado. Com o grande desenvolvimento das técnicas de resfriamento e controle [12] tornou-se possível reproduzir em laboratório diversos modelos quânticos integráveis com sistemas de gases ultrafrios, como o modelo do gás de bósons [13] e o gás de Fermi de spin 1/2 [14], entre outros. Em todos os casos, os modelos integráveis foram fundamentais para a compreensão dos fenômenos reproduzidos, havendo perfeita concordância entre os resultados teórico e experimental. O estado de um gás ultrafrio é de natureza puramente quântica; portanto, uma análise de campo médio torna-se inadequada devido às grandes flutuações quânticas inerentes aos sistemas de escala atômica e o desenvolvimento de métodos exatos para tratar o problema é ainda mais fundamental.

É nesse cenário que o presente trabalho foi desenvolvido. O formato deste trabalho é o seguinte: começaremos no capítulo 2 discutindo o conceito de integrabilidade de maneira ampla, desde sua origem histórica na mecânica clássica até o problema da definição de integrabilidade para sistemas quânticos. Apresentaremos algumas abordagens costumeiramente utilizadas na análise da integrabilidade de um modelo, como o MEQI, a solução exata e a estatística das distribuições de energia. No capítulo 3, apresentaremos dois modelos de grande importância no estudo do fenômeno de tunelamento quântico nas realizações experimentais: o modelo canônico de Bose-Hubbard e o modelo estendido de Bose-Hubbard. Em seguida, aplicaremos os métodos discutidos no capítulo 2 pra verificar a integrabilidade destes modelos. Parte desses resultados é original e constitui a contribuição da autora para a área. As conclusões são apresentadas no capítulo 4. No Apêndice A estão apresentadas as representações matriciais dos hamiltonianos trabalhados, e no Apêndice B é feita uma apresentação da abordagem da mecânica clássica em Pares de Lax.

Capítulo 2

Integrabilidade

A mecânica clássica é uma disciplina com excepcional grau de maturidade, tendo desenvolvido plenamente seu belo formalismo matemático. Um dos conceitos mais poderosos no estudo da dinâmica de sistemas clássicos é a noção de integrabilidade. O conceito de um “sistema completamente integrável” surgiu no século 19 no contexto da mecânica clássica de dimensão finita. Um sistema dinâmico definido por um dado Hamiltoniano $H(p, q)$ sobre um espaço de fase de dimensão $2d$ é chamado *completamente integrável* se puderem ser encontradas d quantidades conservadas $I_j, j = 1, \dots, d$, chamadas *primeiras integrais de movimento*, definidas no espaço de fase e em involução, ou seja,

$$\{I_j, I_k\} = 0, \forall j, k$$

sendo $\{, \}$ os *parênteses de Poisson* [15]. Por *quantidade conservada* I entende-se a quantidade que pode ser caracterizada por sua comutação de Poisson com H : $\{I, H\} = 0$. O fato de que H comuta consigo mesmo expressa a conservação de energia do sistema. Uma vez que $\{I_j, H\} = 0, j = 1, \dots, d$, concluímos que a Hamiltoniana é, ela mesma, uma função das quantidades I_j . Em 1855 foi estabelecido o Teorema de Liouville [16], demonstrando que

as equações de movimento de um sistema completamente integrável podem ser obtidas por quadraturas.

Isto é, é possível resolver um número finito de equações algébricas e integrais. Pode-se demonstrar que a condição imposta pelo Teorema de Liouville implica que as quantidades conservadas $I_j(q, p)$ descrevem trajetórias fechadas bem definidas, confinadas a uma superfície no espaço de fase associada a um valor de energia fixo. Esse resultado coloca um sistema integrável em oposição a um sistema caótico, que é o sistema cujas equações de movimento descrevem trajetórias irregulares sobre a superfície de energia constante no espaço de fase. Desta maneira, a noção clássica de integrabilidade divide os modelos da mecânica clássica entre modelos integráveis e modelos não-integráveis (ou caóticos), que manifestam comportamentos físicos completamente distintos.

Apesar de sua importância, o teorema de Liouville normalmente não é útil na resolução de problemas. Em geral, utiliza-se o Método do Espalhamento Clássico Inverso (MECI), que consiste em uma abordagem sistemática para a resolução efetiva de modelos integráveis clássicos. O MECI é ancorado nos conceitos dos *pares de Lax* e das *matrizes- r* , entidades fundamentais para a generalização do teorema de Liouville para sistemas contínuos. Veja maiores detalhes no Apêndice B.

Uma vez que a integrabilidade é um conceito firmemente estabelecido na mecânica clássica, podemos questionar a respeito da existência e implicações da integrabilidade quântica. Em outras palavras, queremos saber se (1) há uma definição unívoca para a integrabilidade de um sistema quântico e (2) qual a importância disso. Para a primeira questão, surpreende o fato de que não há uma definição universalmente aceita de integrabilidade quântica [10]. Embora o termo “integrabilidade” seja amplamente utilizado em publicações atuais, a definição de integrabilidade utilizada depende de critérios diversos [17]. A segunda questão pode ser respondida pela comparação com a mecânica clássica: uma vez que a presença ou ausência de integrabilidade em sistemas clássicos leva à uma mudança drástica no seu comportamento - periódico ou caótico - como a presença (ou não) de integrabilidade em um sistema quântico afeta sua dinâmica? Sem o conhecimento sobre a integrabilidade é muito difícil estabelecer teoremas robustos sobre os estados de equilíbrio e termalização de sistemas quânticos de muitos corpos [18].

Nas próximas seções, iniciaremos nossa discussão listando três das principais definições de integrabilidade em mecânica quântica encontradas na literatura. Embora outras sejam possíveis [10], vamos concentrar nossa análise na definição de integrabilidade quântica a partir do (i) Método do Espalhamento Quântico Inverso, (ii) das soluções exatas e das (iii) das distribuições de probabilidade dos níveis de energia.

2.1 MÉTODO DO ESPALHAMENTO QUÂNTICO INVERSO

Naturalmente, a primeira abordagem para definir integrabilidade no domínio quântico consiste em “adaptar” a definição clássica de Liouville: um sistema quântico de dimensão d é dito integrável se for possível encontrar d operadores $\{\hat{I}_1, \dots, \hat{I}_d\}$ que comutem com o Hamiltoniano \hat{H} do sistema e entre si,

$$[\hat{I}_j, \hat{I}_k] = 0, \forall j, k$$

Infelizmente, é muito difícil desenvolver esta idéia de maneira ampla, principalmente porque não é clara a definição de independência funcional das integrais de movimento no caso quântico [19]. Assim, a aplicabilidade desta abordagem é limitada a modelos quânticos em $1 + 1$ dimensões - ou seja, uma dimensão espacial e uma dimensão temporal - e modelos de vértices da mecânica estatística [19].

A versão quântica do MECI foi elaborada durante a década de 1970 por Faddeev, Korepin, Kulish e Takhtajan, entre outros [9]. Foi estabelecida uma abordagem sistemática para a criação e análise de modelos quânticos integráveis, capaz de abarcar com a mesma linguagem matemática tanto teorias quânticas de campo em $1 + 1$ dimensões quanto modelos estatísticos bidimensionais [20]. O Método do Espalhamento Quântico Inverso (MEQI) foi completamente desenvolvido em linguagem algébrica, estabelecendo uma forte conexão com a teoria dos grupos quânticos [21]. A seguir, apresentaremos uma introdução informal ao método, considerando um sistema quântico com d graus de liberdade em $1 + 1$ dimensões.

Seguindo o trabalho [19], a formulação do MEQI é puramente algébrica. As álgebras utilizadas pelo MEQI são descritas em termos das bases $T_{ij}(u)$, $i, j \in \{1, \dots, d\}$, que podem ser consideradas elementos de uma matriz quadrada $T(u)$ dependente do parâmetro contínuo u chamado *parâmetro espectral*. A álgebra associativa \mathcal{T}_R é então gerada pelas relações quadráticas

$$\sum_{l,m=1}^d R_{ij,lm}(u-v) T_{lp}(u) T_{mq}(v) = \sum_{l,m=1}^d T_{jm}(v) T_{il}(u) R_{lm,pq}(u-v) \quad (2.1.1)$$

onde as “constantes de estrutura” $R_{ij,lm}$ da álgebra podem ser consideradas elementos de uma matriz quadrada $d^2 \times d^2$ chamada *matriz-R*. Para que a álgebra \mathcal{T}_R seja associativa, as constantes de estrutura devem satisfazer uma equação de consistência conhecida como *Equação de Yang-Baxter* (EYB)

$$\begin{aligned} & \sum_{l,m,n=1}^d R_{ij,lm}(u-v) R_{lk,pn}(u-\omega) R_{mn,qr}(v-\omega) \\ &= \sum_{l,m,n=1}^d R_{jk,mn}(v-\omega) R_{in,lr}(u-\omega) R_{lm,pq}(u-v) \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Esta equação também aparece em diversos contextos, como na mecânica estatística clássica bi-dimensional [20] e teoria do espalhamento [22]. A partir desta construção, pode-se demonstrar [23] que o traço $t(u)$ de $T(u)$,

$$t(u) = \text{Tr}[T(u)] \equiv \sum_{j=1}^d T_{jj}(u) \quad (2.1.3)$$

forma uma família de operadores comutativos

$$[t(u), t(v)] = 0, \forall u, v \quad (2.1.4)$$

que podem ser considerados como as primeiras integrais de movimento de algum sistema quântico integrável. Em geral, podem haver outras integrais de movimento independentes, exceto para o caso $d = 2$. Por isso, vamos focar nossa atenção neste caso.

Assim, para cada solução $R(u)$ da EYB 2.1.2 pode-se definir uma álgebra quadrática \mathcal{T}_R . Dada uma determinada representação desta álgebra, é possível obter um sistema integrável quântico cujo espaço de estados é o espaço de representações de \mathcal{T}_R e as primeira integrais comutativas de movimento são $t(u)$. Em resumo, a abordagem do MEQI pode ser resumida nos seguintes passos:

1. Adotar uma matriz $R(u)$ solução da EYB;
2. Escolher uma representação da álgebra \mathcal{T}_R ;
3. Encontrar o espectro do operador $t(u)$.

O primeiro passo envolve a resolução da EYB (2.1.2). Muitas soluções particulares têm sido encontradas por tentativa e erro, e contribuições substanciais a esse estudo foram dadas por [21]. A solução não trivial mais simples para a EYB correspondente ao caso $d = 2$ origina uma matriz-R na forma

$$R(u) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & b(u) & c(u) & \\ & c(u) & b(u) & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad (2.1.5)$$

onde $b(u) = \frac{u}{u+\eta}$, $c(u) = \frac{\eta}{u+\eta}$ e η é um parâmetro complexo arbitrário. Usaremos esta forma para a *matriz-R* neste trabalho. Neste caso, a matriz $T(u)$ é uma matriz 2×2

$$T(u) = \begin{pmatrix} T_{11}(u) & T_{12}(u) \\ T_{21}(u) & T_{22}(u) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix}$$

Uma vez que temos uma matriz $R(u)$, o segundo passo envolve encontrar uma representação da álgebra \mathcal{T}_R . A álgebra \mathcal{T}_R possui uma importante propriedade chamada *comultiplicação*. Se $T_1(u)$ e $T_2(u)$ são duas representações de \mathcal{T}_R nos espaços V_1 e V_2 , respectivamente, então a matriz $T(u) = T_1(u)T_2(u)$ também é uma representação de \mathcal{T}_R no espaço $V_1 \otimes V_2$. A possibilidade de multiplicar representações abre a oportunidade de construir uma infinidade de representações a partir de um conjunto elementar. Essas representações elementares são chamadas *operadores-L* e seu produto

$$T(u) = L_1(u) \dots L_N(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix}$$

é chamado *matriz de monodromia*. Cada nova representação deste tipo dá origem a um novo modelo quântico integrável. Por exemplo, existe uma representação em termos dos operadores bosônicos $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ sujeitos à álgebra de Heisenberg [3]

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad (2.1.6)$$

dada por [22]

$$L_i(u) = \begin{pmatrix} u + \eta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i & \hat{a}_i \\ \hat{a}_i^\dagger & \eta^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.1.7)$$

Finalmente, o terceiro passo consiste na obtenção do espectro do operador $t(u)$, através da escolha de uma base na qual sua representação seja diagonal. Tradicionalmente, existem vários métodos para a resolução deste problema, e todos levam o nome comum de *ansatz de Bethe*. Neste trabalho, vamos nos concentrar no *ansatz de Bethe algébrico* (ABA). Por este método, devemos encontrar um pseudo-vácuo adequado $|0\rangle$ tal que as seguintes relações sejam satisfeitas¹:

$$\begin{aligned} A(u)|0\rangle &= a(u)|0\rangle \\ B(u)|0\rangle &= 0 \\ C(u)|0\rangle &\neq 0 \\ D(u)|0\rangle &= d(u)|0\rangle \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

onde $a(u)$ e $d(u)$ são funções escalares. Observando que $C(u)$ atua como um operador de criação de estados, podemos procurar por um autoestado de $t(u)$ na forma

$$|\vec{v}\rangle \equiv |v_1 \dots v_d\rangle = \prod_{j=1}^d C(v_j)|0\rangle$$

Então é possível demonstrar [17] que a ação do operador $t(u)$ sobre o estado $|\vec{v}\rangle$ resulta em

¹Para todo operador-L $L_i(u)$ existe um vetor $|\omega_i\rangle$, chamado *vácuo local*, tal que a ação do operador sobre este estado gera uma matriz triangular superior. Uma vez que a matriz de monodromia é o produto de operadores-L, o pseudo-vácuo pode ser escrito como o produto dos vácuos locais, $|0\rangle = |\omega_1 \dots \omega_d\rangle$, de forma que a ação da matriz de monodromia sobre este estado também gera uma matriz triangular superior. Portanto, as condições 2.1.8 são necessárias para que a ação da matriz de monodromia sobre o estado resulte em uma matriz triangular superior.

$$t(u)|\vec{v}\rangle = \Lambda(u)|\vec{v}\rangle + \sum_{j=1}^d \frac{\eta}{u-v_j} \underbrace{\left[d(v_j) \prod_{k \neq j}^d \frac{v_j - v_k - \eta}{v_j - v_k} - a(v_j) \prod_{k \neq j}^d \frac{v_j - v_k + \eta}{v_j - v_k} \right]}_{\text{termos indesejados}}$$

sendo

$$\Lambda(u) = a(u) \prod_{j=1}^d \frac{u - v_j + \eta}{u - v_j} + d(u) \prod_{j=1}^d \frac{u - v_j - \eta}{u - v_j}$$

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

$$\frac{a(v_j)}{d(v_j)} = \prod_{k \neq j} \frac{v_j - v_k - \eta}{v_j - v_k + \eta}$$

conhecidas como *Equações do Ansatz de Bethe* (EAB) são satisfeitas. Neste procedimento exigimos o cancelamento dos “termos indesejados”, 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 $a(v_j)$ e $d(v_j)$. Explicitaremos esta discussão no capítulo 3 para o modelo canônico de Bose-Hubbard. Até o momento não é conhecida a aplicação bem sucedida do MEQI sobre o modelo estendido de Bose-Hubbard. Uma das maiores dificuldades consiste na obtenção de um operador L adequado, e portanto a determinação da integrabilidade do modelo estendido através do MEQI permanece um problema aberto.

2.2 SOLUÇÃO EXATA

Uma definição pragmática de integrabilidade quântica consiste em atribuir integrabilidade a todos os modelos que podem ser resolvidos exatamente, isto é, conseguimos obter seus autovalores e autovetores [10].

Seguindo [3], o que faremos nessa seção é resolver a Equação de Schrödinger para a representação polinomial do Ansatz de Bethe, escrito em função de um parâmetro livre u , determinando assim condições sobre ele que garantam a integrabilidade do sistema. Essas condições serão dadas em termos de equações restritivas sobre u , de modo a quantizar o autoestado. Às equações restritivas que especificam essas condições para um determinado Hamiltoniano, damos o nome de **Equações de Bethe**.

Dada a equação de Schrödinger unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x) \psi = E \psi, \quad (2.2.1)$$

A representação polinomial do Ansatz de Bethe é uma função de onda da forma:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{v(x)} Q(u(x)) \quad \text{onde:} \\ Q(u(x)) &= \prod_{i=1}^N (u(x) - v_i) \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

onde v_i são as raízes do polinômio, e o fator de fase $e^{\nu(x)}$ é adicionado para facilitar os cálculos. Para $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, a Eq. (2.2.1) fica:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] e^{\nu(x)} Q(u(x)) = E e^{\nu(x)} Q(u(x)) \quad (2.2.3)$$

Resolvendo (2.2.3), temos que:

$$\begin{aligned} e^{\nu(x)} \left\{ -\frac{d^2 Q(u)}{du^2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 - \frac{dQ(u)}{du} \left(2 \frac{dv}{dx} \frac{du}{dx} + \frac{d^2 u}{dx^2} \right) - Q(u) \left[\left(\frac{dv}{dx} \right) + \frac{d^2 v}{dx^2} - V(x) \right] \right\} &= E e^{\nu(x)} Q(u) \\ -\frac{d^2 Q(u)}{du^2} \underbrace{\left(\frac{du}{dx} \right)^2}_{-\alpha(u)} - \frac{dQ(u)}{du} \underbrace{\left(2 \frac{dv}{dx} \frac{du}{dx} + \frac{d^2 u}{dx^2} \right)}_{-\beta(u)} - Q(u) \underbrace{\left[\left(\frac{dv}{dx} \right) + \frac{d^2 v}{dx^2} - V(x) \right]}_{-\epsilon(u)} &= E Q(u) \\ \alpha(u) \frac{d^2 Q(u)}{du^2} + \beta(u) \frac{dQ(u)}{du} + \epsilon(u) Q(u) &= E Q(u) \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

onde:

$$\begin{aligned} \frac{dQ(u)}{du} &= \sum_{(i=1)}^N \frac{d}{du} (u - v_i) \prod_{(j \neq i)}^N (u - v_j) \\ &= \sum_{(i=1)}^N \prod_{(j \neq i)}^N (u - v_j) \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 Q(u)}{du^2} &= \sum_{(i=1)}^N \frac{d}{du} (u - v_i) \sum_{(j \neq i)}^N \frac{d}{du} (u - v_j) \prod_{\substack{(k \neq i) \\ (k \neq j)}}^N (u - v_k) \\ &= \sum_{(i=1)}^N \sum_{(j \neq i)}^N \prod_{\substack{(k \neq i) \\ (k \neq j)}}^N (u - v_k) \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Seguindo a discussão realizada em [24], podemos, na Eq. (2.2.4), fazer as seguintes identificações:

$$\epsilon(u) Q(u) = E Q(u) \quad (2.2.7)$$

$$\alpha(u) \frac{d^2 Q(u)}{du^2} + \beta(u) \frac{dQ(u)}{du} = 0 \quad (2.2.8)$$

substituindo os termos (2.2.5) e (2.2.6) em (2.2.8), obtemos a expressão:

$$\alpha(u) \sum_{(i=1)}^N \sum_{(j \neq i)}^N \prod_{\substack{(k \neq i) \\ (k \neq j)}}^N (u - v_k) + \beta(u) \sum_{(i=1)}^N \prod_{(j \neq i)}^N (u - v_j) = 0 \quad (2.2.9)$$

A equação acima corresponde à condição do parâmetro u para que os termos fora da diagonal da representação matricial do Hamiltoniano se cancelem. Nesse caso, a matriz é diagonal e descreve um sistema cuja solução é a representação polinomial do Ansatz de Bethe, apresentada na Eq. (2.2.2). Ao tomar o limite $u \rightarrow v_i$,

podemos expressar a restrição em termos das raízes do polinômio. Como:

$$\lim_{u \rightarrow v_i} \sum_{(i=1)}^N \prod_{(j \neq i)}^N (u - v_j) = \prod_{(j \neq i)}^N (v_i - v_j)$$

$$\lim_{u \rightarrow v_i} \sum_{(i=1)}^N \sum_{(j \neq i)}^N \prod_{\substack{(k \neq i) \\ (k \neq j)}}^N (u - v_k) = 2 \sum_{j \neq i}^N \prod_{\substack{(k \neq i) \\ (k \neq j)}}^N (v_i - v_k)$$

obtemos, para a Eq. (2.2.9), a seguinte relação:

$$2\alpha(v_i) \sum_{j \neq i}^N \prod_{\substack{(k \neq i) \\ (k \neq j)}}^N (v_i - v_k) + \beta(v_i) \prod_{(j \neq i)}^N (v_i - v_j) = 0$$

$$-2 \frac{\prod_{(j \neq i)}^N (v_i - v_j)}{\sum_{j \neq i}^N \prod_{\substack{(k \neq i) \\ (k \neq j)}}^N (v_i - v_k)} = \frac{\beta(v_i)}{\alpha(v_i)}$$

onde, finalmente, através da troca de índices ($k \leftrightarrow j$) para a expressão no denominador, obtém-se a **Equação de Bethe** para a representação polinomial do Ansatz, em termos das raízes do polinômio:

$$\frac{\beta(v_i)}{\alpha(v_i)} = - \sum_{j \neq i}^N \frac{2}{(v_i - v_j)} \quad (2.2.10)$$

Portanto, o Ansatz de Bethe será autoestado de um Hamiltoniano qualquer, dado que existam valores do parâmetro v_i que satisfaçam a igualdade acima. Nesse caso, as energias serão dadas pela expressão 2.2.8, e o modelo será integrável por apresentar solução exata.

2.3 DISTRIBUIÇÃO DOS NÍVEIS DE ENERGIA

Nesta seção, iremos investigar o comportamento da distribuição dos níveis de energia de um sistema e de seus espaçamentos, e como essas informações podem ser usadas para determinar a integrabilidade de um modelo. Suponha um Hamiltoniano integrável que dependa de um parâmetro contínuo l . Graficamente, segundo [25], as linhas que representam os autovalores de energia do Hamiltoniano em função de l devem variar independentemente, apresentando um comportamento de correlação nula, ou de aleatoriedade. Além disso, devem existir cruzamentos entre os diferentes níveis de energia devido às degenerescências ocasionadas pela existência de operações de simetria. Esse comportamento é ilustrado na Fig. (2.1).

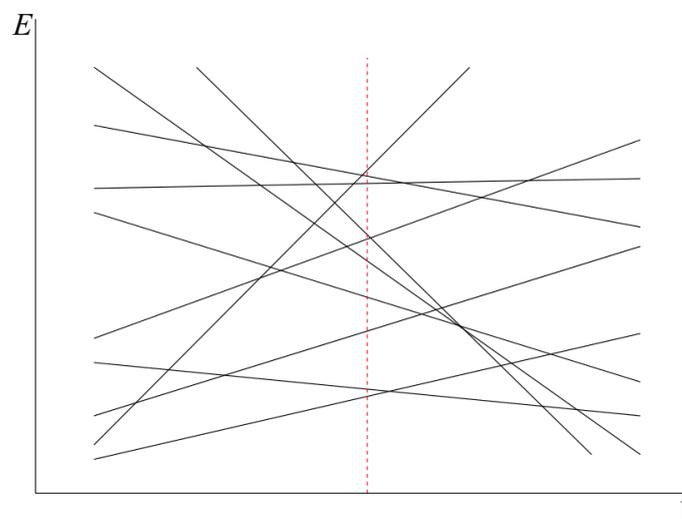


Figura 2.1: Conjunto de linhas com parâmetros e interseções aleatórias, representando diferentes autovalores de um hamiltoniano, não correlacionados entre si, em função do parâmetro l . A distribuição de espaçamentos é tomada para um valor específico de l , indicado pela linha vertical. Adaptado de [25].

Devido ao fato de as energias não estarem correlacionadas, podemos então usar a conjectura de Tabor² [26] e supor que o Hamiltoniano se comportará como uma matriz aleatória. Nesse caso, podemos usar um resultado conhecido de teoria de matrizes aleatórias, devido a Pyke [28]: o espaçamento de autovalores vizinhos de matrizes aleatórias diagonais se distribui de acordo com uma curva de Poisson [27],

$$g(s) = Ne^{-s}$$

onde N é uma constante de normalização. Portanto podemos supor que, para um Hamiltoniano integrável, os espaçamentos de energia se distribuirão de acordo com a distribuição de Poisson. O gráfico de distribuição de espaçamentos dos valores de energia para um conjunto linhas aleatórias, apresentado na Fig (2.2) reflete esse resultado.

²A conjectura de Tabor é a afirmação de que as matrizes dos hamiltonianos de sistemas integráveis se comportam como matrizes de números aleatórios, gerando, portanto, distribuições de Poisson numa análise das distribuições de níveis de energia [26, 27]

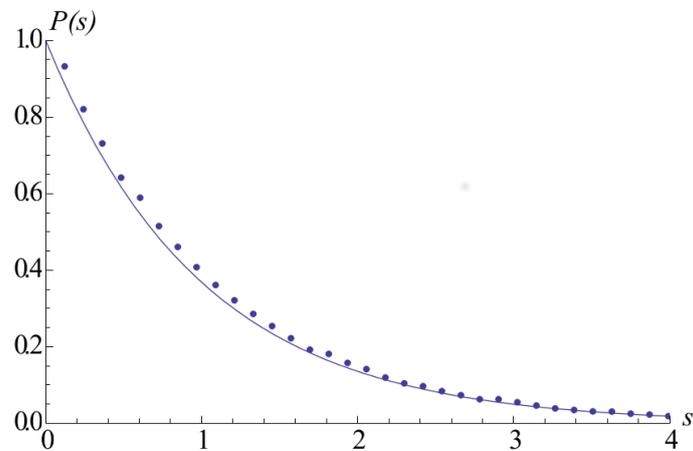


Figura 2.2: Distribuição de espaçamentos de 100 000 linhas aleatórias em um plano, exemplificando o comportamento de espaçamento de autovalores de um hamiltoniano com entradas não correlacionadas entre si. A curva em azul é a distribuição de Poisson. Adaptado de [25].

Podemos concluir, então, que dados os gráficos de níveis de energia de um Hamiltoniano, e a distribuição de espaçamento entre eles, a integrabilidade do modelo fica determinada ao apresentarem um comportamento similar ao da Fig. (2.1) e Fig. (2.2). Esse resultado é razoavelmente aceito, e a estatística de Poisson tem sido verificada numericamente para alguns sistemas quânticos integráveis, como o modelo de Hubbard [29] e o modelo de Heisenberg [30]. Embora as estatísticas referentes aos níveis de energia sejam utilizadas como teste derradeiro para determinação da integrabilidade quântica, são conhecidos modelos integráveis que falham nesta abordagem, como o modelo reduzido BCS [31].

Capítulo 3

Modelos Integráveis de Gases Ultrafrios

A obtenção de gases quânticos ultrafrios oferece a oportunidade única de explorar as propriedades básicas dos sistemas quânticos. Nas recentes realizações experimentais, destaca-se a possibilidade de controle fino sobre os parâmetros. Em particular, devido ao desenvolvimento das técnicas de confinamento óptico e magnético de átomos ultrafrios, é possível explorar diferentes regimes da dinâmica dos sistemas quânticos [12]. Diversos resultados experimentais estão em excelente concordância com os resultados obtidos por métodos matemáticos e a análise de modelos exatamente solúveis, como o modelo do gás de bósons [13] e o gás de fermi de spin 1/2 [14]. Neste capítulo, apresentaremos dois modelos para a compreensão do fenômeno de tunelamento quântico em sistemas de poço de potencial duplo: o modelo canônico de Bose-Hubbard e o modelo estendido de Bose-Hubbard. Em ambos os casos, discutiremos sua relevância no contexto dos sistemas ultrafrios e investigaremos a integrabilidade dos modelos pelas técnicas apresentadas no capítulo anterior.

3.1 MODELO CANÔNICO DE BOSE-HUBBARD DE DOIS SÍTIOS

O modelo de Bose-Hubbard de dois sítios tem sido extensivamente estudado desde a realização experimental dos condensados de Bose-Einstein (CBE) [11]. Este modelo simples descreve as oscilações Josephson e o auto-aprisionamento não linear de CBE's em um potencial de poço duplo [32], com interações interatômicas fracas. Devido à sua simplicidade, o modelo foi investigado por diversos autores através de uma vasta gama de técnicas, como a aproximação de Gross-Pitaevskii [33], a teoria de campo médio [34] e o método do ansatz de Bethe [35]. Estes estudos proporcionaram a compreensão de diversos fenômenos intrigantes, com a transição de fase quântica entre uma fase aprisionada e uma fase delocalizada [36].

O modelo descreve um sistema físico de dois poços onde se aprisionam partículas de um CBE admitindo a possibilidade de tunelamento dos bósons entre os poços. Este modelo de poços acoplados é dado pelo hamiltoniano¹:

$$\hat{H}_{AA} = U_1 \hat{n}_1^2 + U_2 \hat{n}_2^2 - \frac{\Delta}{2} (\hat{n}_1 - \hat{n}_2) - \frac{J}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \quad (3.1.1)$$

Os diferentes estados possíveis de configuração de bósons nos dois poços formam a base do espaço no qual o hamiltoniano está descrito, o espaço de Fock. Portanto, dado o vácuo desse espaço, $|0 0\rangle$, representando a

¹A representação matricial desse hamiltoniano é obtida no Apêndice A.

configuração onde não há bósons em nenhum dos poços, os estados podem ser gerados através da base:

$$|n m\rangle = \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^n (\hat{a}_2^\dagger)^m}{\sqrt{n!m!}} |0 0\rangle$$

onde os operadores \hat{a}_i e \hat{a}_i^\dagger , denotam os operadores de destruição e criação de bósons no poço $i = 1, 2$, e obedecem as relações de comutação usuais:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_j] &= 0 & [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] &= 0 \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Os parâmetros U_1 e U_2 são referentes ao potencial de interação entre as partículas presentes dentro de um mesmo poço. O parâmetro Δ é o potencial externo, e J é o parâmetro referente à probabilidade de tunelamento destes entre os poços. O número de partículas total, $\hat{n} = \hat{n}_1 + \hat{n}_2$, onde $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$, se conserva.

3.1.1 Solução exata

Para obter a solução exata do modelo, seguindo a discussão realizada em [3], é necessário primeiramente realizar uma mudança na representação do Hamiltoniano em (3.1.1), que se apresenta descrito pela base do espaço de Fock, para a representação no espaço de polinômios, e em seguida aplicá-lo na representação polinomial do ansatz de Bethe, apresentado na Eq. (2.2.2). Isso pode ser feito a partir da identificação dos operadores \hat{n} , $\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1$ e $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2$ de cada um dos poços com operadores \hat{S}_+ , \hat{S}_- e \hat{S}_z pertencentes ao grupo $SU(N)$, e subsequentemente com operadores diferenciais.

$$\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \mapsto \hat{S}_+ \quad \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \mapsto \hat{S}_- \quad \frac{\hat{n}_1 - \hat{n}_2}{2} \mapsto \hat{S}_z \quad (3.1.2)$$

Podemos rearranjar o Hamiltoniano (3.1.1), de modo a escrevê-lo em termos dos operadores convenientes, e teremos:

$$\hat{H}_{AA} = [U_1 + U_2] \hat{S}_z^2 + \frac{1}{4} [U_1 + U_2] \hat{n}^2 + [U_1 - U_2] \hat{n} \hat{S}_z - \Delta \hat{S}_z - \frac{J}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$$

definindo: $k = 2(U_1 + U_2)$ e $\gamma = (U_1 - U_2) \hat{n} - \Delta$, obtemos a expressão:

$$\hat{H}_{AA} = \frac{1}{8} k \hat{n}^2 + \frac{1}{2} k \hat{S}_z^2 + \gamma \hat{S}_z - \frac{J}{2} [\hat{S}_+ + \hat{S}_-] \quad (3.1.3)$$

Pode-se demonstrar que os operadores \hat{S}_+ , \hat{S}_- e \hat{S}_z pertencentes a $SU(N)$ são equivalentes aos seguintes operadores diferenciais [3]:

$$\hat{S}_+ \mapsto u^2 \frac{d}{du} - nu \quad \hat{S}_- \mapsto \frac{d}{du} \quad \hat{S}_z \mapsto u \frac{d}{du} - \frac{n}{2} \quad (3.1.4)$$

e fazendo a substituição em (3.1.3):

$$\hat{H}_{AA} = \frac{1}{8}k\hat{n}^2 + \frac{1}{2}k\left(u\frac{d}{du} - \frac{n}{2}\right)^2 + \gamma\left(u\frac{d}{du} - \frac{n}{2}\right) - \frac{J}{2}\left[\left(u^2\frac{d}{du} - nu\right) + \left(-\frac{d}{du}\right)\right]$$

chegamos à seguinte expressão para o Hamiltoniano representado no espaço de polinômios:

$$\hat{H}_{AA} = \left\{\frac{1}{2}ku^2\right\}\frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2}\left\{[k(1-n)+2\gamma]u - J[u^2-1]\right\}\frac{d}{du} + \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{kn^2}{2}\right) - \gamma n - Jnu\right\}$$

onde podemos identificar os seguintes parâmetros:

$$\begin{aligned}\alpha(u) &= \left\{\frac{1}{2}ku^2\right\} \\ \beta(u) &= \frac{1}{2}\left\{[k(1-n)+2\gamma]u - J[u^2-1]\right\} \\ \epsilon(u) &= \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{kn^2}{2}\right) - \gamma n - Jnu\right\}\end{aligned}$$

e, assim, escrever o hamiltoniano da forma:

$$\hat{H}_{AA} = \alpha(u)\frac{d^2}{du^2} + \beta(u)\frac{d}{du} + \epsilon(u)$$

Tendo trocado a base de representação do Hamiltoniano, agora podemos resolver o problema de autovalores, $HQ(u) = EQ(u)$, sobre o ansatz de Bethe polinomial (Eq. (2.2.2)), conforme a discussão realizada na Seção 2.2. De (2.2.3), obtemos:

$$\hat{H}_{AA}Q(u) = \alpha(u)\frac{d^2Q(u)}{du^2} + \beta(u)\frac{dQ(u)}{du} + \epsilon(u)Q(u)$$

de onde podemos identificar a mesma expressão obtida em (2.2.4). Portanto, para que o Ansatz $Q(u)$ seja um autoestado, a equação acima deve satisfazer a restrição imposta pela Equação de Bethe (Equação (2.2.10)), e portanto o sistema é integrável sob a condição:

$$\frac{\frac{1}{2}[k(1-n)+2\gamma]v_i - J[v_i^2-1]}{\frac{1}{2}kv_i^2} = -\sum_{j \neq i}^N \frac{2}{(v_i - v_j)} \quad (3.1.5)$$

Nesse caso, os estados estacionários são descritos pelo Ansatz de Bethe. e as autoenergias associadas ficam dadas pelo parâmetro $\epsilon(v_i)$:

$$\begin{aligned}\hat{H}Q(v_i) &= \epsilon(v_i)Q(v_i) \\ &= \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{kn^2}{2}\right) - \gamma n - Jnv_i\right\}Q(v_i)\end{aligned}$$

3.1.2 Distribuição dos Níveis de Energia

Seguindo a discussão realizada na seção 2.3, podemos determinar a integrabilidade do modelo (3.1.1) fazendo a análise do comportamento de seus níveis de energia. Para isso, variamos continuamente a interação entre as partículas confinadas no poço 1 através do ajuste do valor do parâmetro U_1 , mantendo os outros parâmetros fixos. Os diferentes autovalores do hamiltoniano (3.1.1) em função de U_1 para um sistema com $N = 10$ partículas estão apresentados na Fig. (3.1a), onde podemos observar os cruzamentos de níveis característicos de sistemas integráveis.

Para fazer a análise estatística entre os espaçamentos dos diferentes níveis, levaremos agora em consideração sistemas com um número de partículas variável, entre $N = 400$ e $N = 440$, variando N de 4 em 4. Isso será feito porque a suposição de Tabor só se mostra válida para sistemas com mais de um grau de liberdade [27]. Caso restringíssemos a análise do modelo (3.1.1) a um número fixo de partículas, teríamos um sistema com apenas um grau de liberdade (ou modo), e a distribuição de Poisson nesse caso não seria observada. A distribuição dos espaçamentos de níveis de energia foi tomada para o sistema com três escolhas diferentes de parâmetros, apresentados na Tab. (3.1), e seu resultado pode ser visto na Fig. (3.1b).

Através da análise dos espaçamentos, observamos que os dados seguem a distribuição de Poisson para diferentes valores dos parâmetros U_1 , U_2 , J e Δ , ficando assim estabelecida a integrabilidade do sistema por esse critério.

| | A | B | C |
|----------|-----|------|-----|
| U_1 | 1,2 | 2,0 | 0,1 |
| U_2 | 1,6 | -0,5 | 2,0 |
| Δ | 0,3 | 3,2 | 9,9 |
| J | 1,9 | 0,1 | 8,6 |

Tabela 3.1: Parâmetros referentes à Fig. (3.1b)

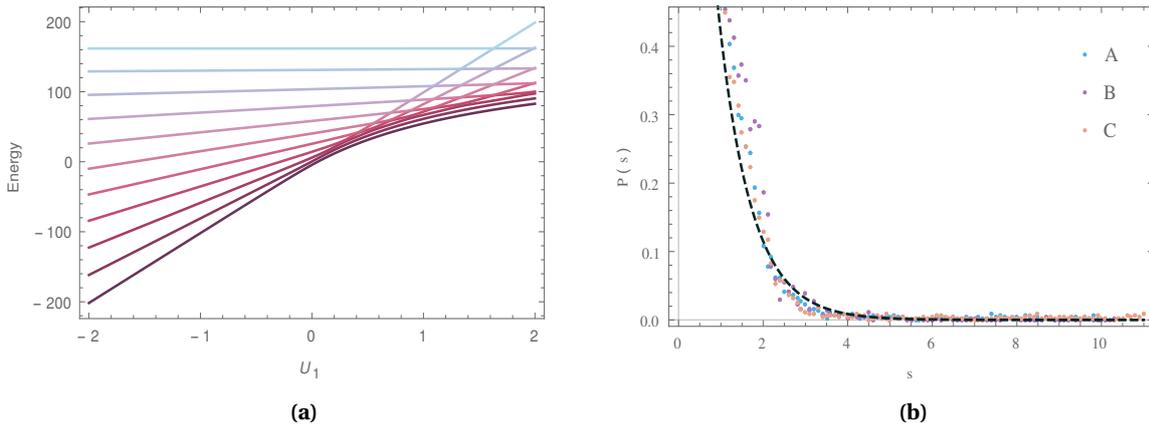


Figura 3.1: (a) Autovalores de energia associados aos autoestados do Hamiltoniano para um sistema com 10 partículas, em função do parâmetro U_1 , para os valores fixos $U_2 = 1,6$, $\Delta = 0,3$ e $J = 1,9$ (b) Distribuição da diferença entre os autovalores de energia para sistemas com um número de partículas entre 400 e 440, com uma variação de 4 partículas entre si, para $U_1 = 1,9$. Os diferentes pontos são referentes aos valores exibidos na Tab. (3.1). Pode-se observar concordância com a distribuição de Poisson (linha tracejada), indicando a integrabilidade do sistema.

3.1.3 Solução pelo Ansatz algébrico

Vamos agora aplicar o método do espalhamento quântico inverso estudado na seção 2.1 para encontrar a solução do modelo pelo Ansatz de Bethe algébrico. Assim, seguindo a discussão realizada na seção 2.1, dadas matrizes $R(u - v)$ e $T(u)$ que satisfaçam a relação 2.1.1, podemos obter a matriz de transferência $t(u)$, que contém a informação sobre as quantidades conservadas do sistema, incluindo o Hamiltoniano, através do traço da matriz de monodromia, $T(u)$. Como solucionar um sistema quântico equivale a encontrar uma base que diagonalize sua representação matricial, queremos agora diagonalizar a matriz de transferência obtida através do método de espalhamento inverso quântico. Portanto nosso objetivo é resolver o problema de autovalores da matriz de transferência:

$$t(u)|\hat{v}\rangle = \Lambda(u)|\hat{v}\rangle$$

Para resolver este problema pelo MEQI precisamos de três ingredientes básicos: a matriz R , a matriz de monodromia $T(u)$ e a matriz de transferência $t(u)$. Mostrou-se em [3] que, para o Hamiltoniano 3.1.1 podemos usar a matriz R (Eq. (2.1.5)) apresentada na seção 2.1:

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

onde $b(u) = \frac{u}{u+\eta}$, $c(u) = \frac{\eta}{u+\eta}$ e η é um parâmetro complexo arbitrário. Neste caso, a representação da álgebra é dada pela matriz L (Eq. (2.1.7)) e a matriz de monodromia pode ser escrita [3] como $T(u) = L(u+\omega)L(u-\omega)$, assumindo a forma:

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix} \quad (3.1.6)$$

onde suas entradas são dadas por:

$$\begin{aligned} A(u) &= (u + \omega + \eta \hat{n}_1)(u - \omega + \eta \hat{n}_2) + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \\ B(u) &= (u + \omega + \eta \hat{n}_1) \hat{a}_2 + \eta^{-1} \hat{a}_1 \\ C(u) &= (u\omega + \eta \hat{n}_2) \\ D(u) &= \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \eta^{-2} \end{aligned}$$

E, como $t(u) = \text{tr} T(u)$, teremos para a matriz de transferência:

$$t(u) = A(u) + D(u)$$

O próximo passo é definir um pseudovácuo $|0\rangle$ sobre o qual os operadores definidos na Eq. (3.1.6) atuam da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
 A(u)|0\rangle &= a(u)|0\rangle \\
 B(u)|0\rangle &= 0 \\
 C(u)|0\rangle &\neq 0 \\
 D(u)|0\rangle &= d(u)|0\rangle
 \end{aligned}$$

Verifica-se que operadores $C(u)$ e $B(u)$, localizados fora da diagonal de $T(u)$ atuam como operadores criação e destruição do estado quântico, respectivamente. Portanto, escolhemos como pseudovácuo $|0\rangle$ o vácuo do espaço de Fock, já que ele é aniquilado pelo operador $B(u)$:

$$\begin{aligned}
 B(u)|0\rangle &= [(u + \omega + \eta \hat{n}_1) \hat{a}_2 + \eta^{-1} \hat{a}_1] |0\rangle \\
 &= 0 |0\rangle
 \end{aligned}$$

Podemos escrever um estado qualquer a partir do operador $C(u)$, como:

$$|\hat{v}\rangle := |v_1, \dots, v_M\rangle = \prod_{i=1}^M C(v_i) |0\rangle$$

Dada a ação de $A(u)$ e $D(u)$ em $|0\rangle$, temos que seus autovalores são:

$$a(u) = (u + \omega)(u - \omega) \quad (3.1.7)$$

$$d(u) = \eta^{-2} \quad (3.1.8)$$

Através da expressão (2.1.1), podemos encontrar as relações:

$$\begin{aligned}
 [C(u), C(v)] &= 0; \\
 A(u)C(v) &= \frac{u - v + \eta}{u - v} C(v)A(u) - \frac{\eta}{u - v} C(u)A(v); \quad (3.1.9)
 \end{aligned}$$

$$D(u)C(v) = \frac{u - v - \eta}{u - v} C(v)D(u) + \frac{\eta}{u - v} C(u)D(v) \quad (3.1.10)$$

A partir das quais podemos encontrar a ação dos operadores $A(u)$ e $D(u)$ sobre os estados $|\vec{v}\rangle$:

$$\begin{aligned}
 A(u)|\vec{v}\rangle &= A(u) \prod_{i=1}^M C(v_i)|0\rangle = \\
 &= a(u) \prod_{i=1}^M \frac{u-v_i+\eta}{u-v_i} |\vec{v}\rangle - \sum_{i=1}^M \frac{\eta}{u-v_i} \left(a(v_i) \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i-v_j+\eta}{v_i-v_j} \right) C(u)|\vec{v}\rangle \\
 D(u)|\vec{v}\rangle &= D(u) \prod_{i=1}^M C(v_i)|0\rangle = \\
 &= d(u) \prod_{i=1}^M \frac{u-v_i-\eta}{u-v_i} |\vec{v}\rangle - \sum_{i=1}^M \frac{\eta}{u-v_i} \left(d(v_i) \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i-v_j-\eta}{v_i-v_j} \right) C(u)|\vec{v}\rangle
 \end{aligned}$$

Como $t(u) = \text{Tr}(T(u)) = A(u) + D(u)$, podemos agora encontrar a ação de $t(u)$ sobre o estado $|\vec{v}\rangle$:

$$\begin{aligned}
 t(u)|\vec{v}\rangle &= A(u)|\vec{v}\rangle + D(u)|\vec{v}\rangle = \\
 &= \left[a(u) \prod_{i=1}^M \frac{u-v_i+\eta}{u-v_i} + d(u) \prod_{i=1}^M \frac{u-v_i-\eta}{u-v_i} \right] |\vec{v}\rangle \\
 &+ \sum_{i=1}^M \frac{\eta}{u-v_i} \left\{ \left(d(v_i) \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i-v_j-\eta}{v_i-v_j} \right) - \left(a(v_i) \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i-v_j+\eta}{v_i-v_j} \right) \right\} C(u)|\vec{v}\rangle
 \end{aligned}$$

A partir da ação de $t(u)$ sobre $|\vec{v}\rangle$, podemos identificar algumas restrições necessárias aos parâmetros para que o estado $|\vec{v}\rangle$ seja autoestado de $t(u)$. Para tanto, exigimos o cancelamento dos termos indesejados na equação acima, já que são incapazes de produzir um autovetor da matriz de transferência devido à ação do operador de criação $C(u)$ sobre o estado $|\vec{v}\rangle$. Isso irá ocorrer sob a condição de que:

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

A restrição acima é conhecida como a *Equação de Bethe* para o estado de Bethe $|\vec{v}\rangle$, ou simplesmente Equação do Ansatz de Bethe. Tendo satisfeito essa condição, agora podemos identificar $\Lambda(u)$ como autovalor de $t(u)$.

$$t(u)|\vec{v}\rangle = \overbrace{\left[a(u) \prod_{i=1}^M \frac{u-v_i+\eta}{u-v_i} + d(u) \prod_{i=1}^M \frac{u-v_i-\eta}{u-v_i} \right]}^{\Lambda(u)} |\vec{v}\rangle = \Lambda(u)|\vec{v}\rangle$$

Substituindo os valores de $a(u)$ e $d(u)$ apresentados na Eq. (3.1.7), as equações do ansatz de Bethe reduzem-se a:

$$\eta^2(v_i^2 - \omega^2) = \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i-v_j-\eta}{v_i-v_j+\eta} \quad (3.1.11)$$

Dado que o Hamiltoniano pode ser obtido da matriz de transferência a partir de uma expansão de $t(u)$ em

série [3], podemos escrever

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

E, finalmente, os autovalores de energia para o Hamiltoniano (3.1.1) podem ser obtidos:

$$E = -\kappa \left[\eta^{-2} \prod_{i=1}^n \left(1 + \frac{\eta}{v_i - u} \right) - (u^2 - \omega^2) \prod_{i=1}^n \left(1 - \frac{\eta}{v_i - u} \right) - u\eta N - u^2 - \eta^{-2} + \omega^2 \right] \quad (3.1.12)$$

Cada elemento do conjunto v_i , $i = 1, \dots, n$, soluções da equação do ansatz de Bethe (3.1.11), especificam um autovetor da matriz de transferência, e conseqüentemente, um autoestado do Hamiltoniano (3.1.1), com energias dadas pela expressão (3.1.12) acima.

3.2 MODELO ESTENDIDO DE BOSE-HUBBARD DE DOIS SÍTIOS

Como discutimos na seção anterior, o modelo canônico de Bose-Hubbard é muito utilizado no estudo do fenômeno de tunelamento quântico em poços duplos. Entretanto, regimes de interação interatômica fortes podem alterar a configuração de tunelamento, resultando no fenômeno de *tunelamento correlacionado*. Na medida em que a força de interação interatômica aumenta, observa-se o tunelamento de pares não ligados de partículas, mesmo quando a força de interação entre as partículas é repulsiva. Este resultado foi recentemente reportado experimentalmente em [37], e uma análise teórica em termos da mecânica quântica de dois corpos foi apresentada em [38]. Foi demonstrado que o Hamiltoniano canônico de Bose-Hubbard pode ser modificado por um termo de tunelamento não-linear, dependente da interação, caso seja considerado um grande número de partículas [39]. Por estes motivos, vamos analisar o modelo estendido de Bose-Hubbard², adotado em [40] e dado por:

$$\hat{H}_{ext} = U_1 \hat{n}_1^2 + U_2 \hat{n}_2^2 - \frac{\Delta}{2} (\hat{n}_1 - \hat{n}_2) - \frac{J}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) - \frac{\Omega}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1) \quad (3.2.1)$$

Acima os parâmetros U_1 , U_2 representam a interação das partículas entre si dentro de cada poço, Δ é o potencial externo e J é a probabilidade associada ao tunelamento de um bóson de um poço a outro. Os operadores $\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^2$ e $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^2$ correspondem à dinâmica de tunelamento de pares, com uma probabilidade associada ao parâmetro $\frac{\Omega}{2}$.

3.2.1 Solução exata

De maneira análoga à discussão feita anteriormente para o modelo canônico de Bose-Hubbard, podemos determinar a integrabilidade desse sistema através da obtenção de sua solução exata pelo Ansatz de Bethe. O procedimento realizado será o mesmo, via mapeamento dos operadores descritos no espaço de Fock para os operadores \hat{S}_z , \hat{S}_+ e \hat{S}_- , e em seguida para os operadores diferenciais, de modo a fazer a troca de representação do hamiltoniano para uma base de polinômios. Portanto, dadas as mesmas considerações feitas nas equações (3.1.2), podemos representar o Hamiltoniano (3.2.1) da forma:

²Para a representação matricial desse hamiltoniano, veja o Apêndice A.

$$\hat{H}_{ext} = \frac{1}{8} k \hat{n}^2 + \frac{1}{2} k \hat{S}_z^2 + \gamma \hat{S}_z - \frac{J}{2} [\hat{S}_+ + \hat{S}_-] - \frac{\Omega}{2} [(\hat{S}_+)^2 + (\hat{S}_-)^2]$$

Considerando agora o mapeamento realizado em (3.1.4), podemos reescrever o último termo da expressão acima como:

$$\begin{aligned} \frac{\Omega}{2} [(\hat{S}_+)^2 + (\hat{S}_-)^2] &= \frac{\Omega}{2} \left[\left(u^2 \frac{d}{du} - nu \right)^2 + \left(-\frac{d}{du} \right)^2 \right] \\ &= \frac{\Omega}{2} \left[2u^3 \frac{d}{du} + u^4 \frac{d^2}{du^2} - 2nu^3 \frac{d}{du} - nu^2 + n^2 u^2 + \frac{d^2}{du^2} \right] \\ &= \left[\frac{\Omega}{2} (u^4 + 1) \right] \frac{d^2}{du^2} + \left[\Omega(1-n)u^3 \right] \frac{d}{du} + \left[\frac{\Omega}{2} n(n-1)u^2 \right] \end{aligned}$$

E portanto obtemos a expressão para o hamiltoniano estendido:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ext} &= \left\{ \frac{1}{2} k u^2 - \left[\frac{\Omega}{2} (u^4 + 1) \right] \right\} \frac{d^2}{du^2} \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ [k(1-n) + 2\gamma] u - J[u^2 - 1] - [2\Omega(1-n)u^3] \right\} \frac{d}{du} \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{kn^2}{2} \right) - \gamma n - Jnu - [\Omega n(n-1)u^2] \right\} \end{aligned}$$

Onde identificamos os parâmetros:

$$\begin{aligned} \alpha(u) &= \left\{ \frac{1}{2} k u^2 - \left[\frac{\Omega}{2} (u^4 + 1) \right] \right\} \\ \beta(u) &= \frac{1}{2} \left\{ [k(1-n) + 2\gamma] u - J[u^2 - 1] - [2\Omega(1-n)u^3] \right\} \\ \epsilon(u) &= \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{kn^2}{2} \right) - \gamma n - Jnu - [\Omega n(n-1)u^2] \right\} \end{aligned}$$

Comparando esses resultados com as condições impostas pela Equação de Bethe (2.2.10) para que o Ansatz seja autoestado do sistema, obtemos a seguinte restrição sobre o parâmetro u :

$$\frac{\frac{1}{2} \left\{ [k(1-n) + 2\gamma] u - J[u^2 - 1] - [2\Omega(1-n)u^3] \right\}}{\left\{ \frac{1}{2} k u^2 - \left[\frac{\Omega}{2} (u^4 + 1) \right] \right\}} = - \sum_{j \neq i}^N \frac{2}{(v_i - v_j)}$$

E temos que a equação de autoestados de energia é dada através da expressão:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ext} Q(u) &= \epsilon Q(u) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{kn^2}{2} \right) - \gamma n - Jnu - [\Omega n(n-1)u^2] \right\} Q(u) \end{aligned}$$

3.2.2 Distribuição dos Níveis de Energia

Ao verificar a integrabilidade do modelo estendido de Bose-Hubbard através da distribuição de níveis de energia, novamente tomamos um número de partículas variável para evitar que haja apenas um grau de liberdade no sistema, o que torna o método inadequado [27]. Portanto, para o setor de 400 a 440 partículas, variando N de 4 em 4, obtemos para os diferentes parâmetros, apresentados na Tab. (3.2), os espaçamentos de energia da Fig. (3.2b). Podemos novamente observar que as curvas de distribuição se ajustam à uma curva de Poisson, apresentando o caráter de aleatoriedade entre os diferentes níveis de energia, e portanto, segundo a conjectura de Tabor [26], os sistemas descritos por estes parâmetros podem ser considerados integráveis.

A integrabilidade do sistema também é observada no cruzamento entre as linhas de diferentes níveis de energia, apresentados na Fig. (3.2a), obtida através da variação do parâmetro de interação U_1 , para os parâmetros U_2 , Δ , J e Ω mantidos constantes, e $U_2 = 2, 1$, $\Delta = 0, 9$, $J = 1, 9$ e $\Omega = 0, 1$. A presença de cruzamentos indicam casos de degenerescência devido à simetria induzida pela existência de um conjunto de observáveis comutantes [27], e portanto, tanto de acordo com a análise estatística dos espaçamentos dos níveis de energia, quanto em relação às características observadas nas curvas, o sistema pode ser considerado integrável.

| | A | B | C |
|----------|-----|------|-----|
| U_1 | 0,1 | 2,0 | 0,1 |
| U_2 | 2,1 | -0,5 | 2,0 |
| Δ | 0,9 | 3,2 | 9,9 |
| J | 1,9 | 0,1 | 8,6 |
| Ω | 0,1 | 2,8 | 7,5 |

Tabela 3.2: Parâmetros referentes à Fig. (3.2b)

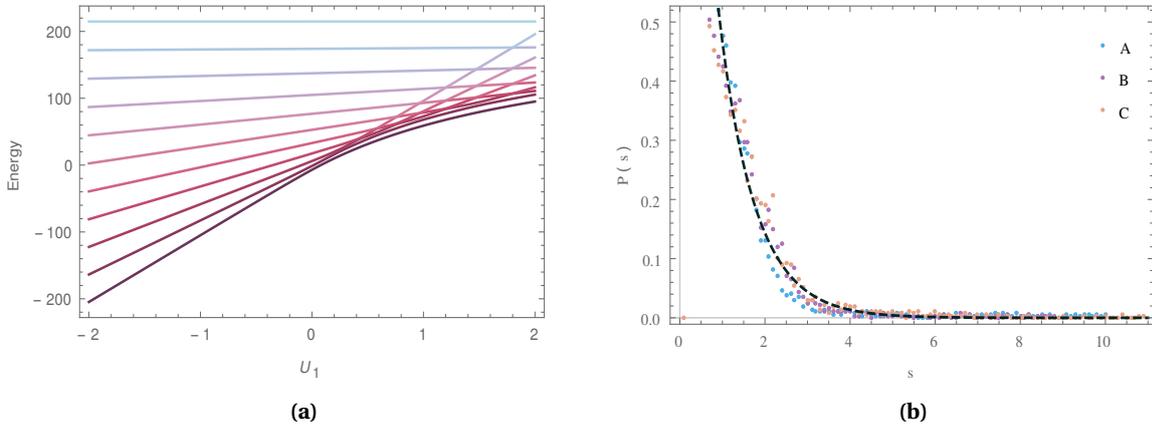


Figura 3.2: (a) Autovalores de energia associados aos autoestados do Hamiltoniano para um sistema com 10 partículas, em função do parâmetro U_1 , e $U_2 = 2, 1$, $\Delta = 0, 9$, $J = 1, 9$ e $\Omega = 0, 1$. (b) Distribuição da diferença entre os autovalores de energia para sistemas com um número de partículas entre 400 e 440, com uma variação de 4 partículas entre si, para $U_1 = 1, 9$. Os diferentes pontos são referentes aos valores exibidos na Tab. (3.2).

Capítulo 4

Conclusão

Neste trabalho realizamos uma discussão sobre a problemática da definição de integrabilidade para sistemas quânticos. Começamos apresentando o conceito, bem estabelecido, de integrabilidade na mecânica clássica. A seguir, discutimos como o Método do Espalhamento Quântico Inverso (MEQI) tenta adaptar o conceito clássico de integrabilidade para o contexto quântico, e apresentamos as suas principais características. Então, analisamos o critério de integrabilidade baseado na existência de soluções exatas para os modelos e utilizamos uma abordagem baseada no ansatz de Bethe para obter a solução exata de determinados modelos quânticos. Finalmente, discutimos sobre a estatística dos níveis de energia de sistemas integráveis e sua ligação com a distribuição de Poisson.

Após a revisão sobre as principais abordagens para a integrabilidade quântica, esses métodos foram então utilizados na análise de dois importantes modelos para o estudo do fenômeno de tunelamento quântico: o modelo canônico de Bose-Hubbard e sua versão estendida. Para ambos os modelos, foram obtidas as autoenergias através de uma versão do ansatz de Bethe, bem como as estatísticas dos níveis de energia. Porém, o MEQI pode ser aplicado somente sobre o modelo canônico, e sua aplicação sobre o modelo estendido continua um problema a ser resolvido. Os resultados apresentados na subseção 3.2.2 são inéditos e frutos deste trabalho.

Apêndice A

Representação Matricial

Sabemos que cada elemento de matriz de um operador qualquer \hat{A} em uma base de estados $|\psi_i\rangle$ é dado pela projeção de $\hat{A}|\psi_i\rangle$ no estado $|\psi_j\rangle$, e portanto tem-se que o elemento i, j da matriz que representa o operador \hat{A} nesta base é dado por: $\hat{A}_{ij} = \langle\psi_j|\hat{A}|\psi_i\rangle$. Então, dada a ação dos operadores em alguma base pode-se montar a sua representação matricial, em qualquer dimensão.

Neste apêndice iremos construir a representação matricial dos hamiltonianos (3.1.1) e (3.2.1) a partir da ação dos operadores que os compõem em um vetor genérico da base do espaço de Fock correspondente a um sistema de dois poços, $|n_1 n_2\rangle$, onde n_1 é o número de partículas no poço 1, n_2 é o número de partículas no poço 2, e $n = n_1 + n_2$ é o número total de partículas. A dimensão deste espaço é $n + 1$, e a ação dos operadores \hat{n} , $\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1$, $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2$, $\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1$ e $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2$ que descrevem os sistemas estudados são dados por:

$$\begin{aligned}\hat{n}_1 |n_1 n_2\rangle &= n_1 |n_1 n_2\rangle \quad ; \quad \hat{n}_1^2 |n_1 n_2\rangle = n_1^2 |n_1 n_2\rangle \\ \hat{n}_2 |n_1 n_2\rangle &= n_2 |n_1 n_2\rangle \quad ; \quad \hat{n}_2^2 |n_1 n_2\rangle = n_2^2 |n_1 n_2\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 |n_1 n_2\rangle &= \sqrt{(n_1 + 1)n_2} |n_1 + 1 n_2 - 1\rangle \quad (\text{se } 0 < n_1 < n) \\ &= 0 \quad (\text{se } n_1 = n); \\ \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 |n_1 n_2\rangle &= \sqrt{n_1(n_2 + 1)} |n_1 - 1 n_2 + 1\rangle \quad (\text{se } 0 < n_2 < n) \\ &= 0 \quad (\text{se } n_2 = n)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 |n_1 n_2\rangle &= (n_1 + 1)n_2 |n_1 + 2 n_2 - 2\rangle \quad (\text{se } 0 < n_1 \leq n - 2) \\ &= 0 \quad (\text{se } n_1 > n - 2) \\ \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 |n_1 n_2\rangle &= n_1(n_2 + 1) |n_1 - 2 n_2 + 2\rangle \quad (\text{se } 0 < n_2 \leq n - 2) \\ &= 0 \quad (\text{se } n_2 > n - 2)\end{aligned}$$

Aplicando o Hamiltoniano (3.2.1) nos vetores de base $|n_1 n_2\rangle$, e utilizando as relações acima, teremos:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{ext} |n_1 n_2\rangle &= U_1 \hat{n}_1^2 |n_1 n_2\rangle + U_2 \hat{n}_2^2 |n_1 n_2\rangle - \frac{\Delta}{2} (\hat{n}_1 - \hat{n}_2) |n_1 n_2\rangle \\
 &- \frac{J}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) |n_1 n_2\rangle \\
 &- \frac{\Omega}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1) |n_1 n_2\rangle \\
 \hat{H}_{ext} |n_1 n_2\rangle &= \left[U_1 n_1^2 + U_2 n_2^2 - \frac{\Delta}{2} (n_1 - n_2) \right] |n_1 n_2\rangle \\
 &- \left[\frac{J}{2} \sqrt{(n_1 + 1)n_2} \right] |n_1 + 1 n_2 - 1\rangle + \left[\frac{J}{2} \sqrt{n_1(n_2 + 1)} \right] |n_1 - 1 n_2 + 1\rangle \\
 &- \left[\frac{\Omega}{2} (n_1 + 1)n_2 \right] |n_1 + 2 n_2 - 2\rangle + \left[\frac{\Omega}{2} n_1(n_2 + 1) \right] |n_1 - 2 n_2 + 2\rangle
 \end{aligned}$$

Os elementos da representação matricial do hamiltoniano ficarão, então, escritos nessa base como: $\langle n'_1 n'_2 | H | n_1 n_2 \rangle$. A seguir, ilustraremos o procedimento de obtenção para os casos com numero de partículas $n = 2$ e $n = 10$

A.1 N=2

Para um sistema de 2 partículas, por exemplo, temos 3 estados distintos possíveis, ortogonais entre si, formando uma base: $|2 0\rangle, |1 1\rangle, |0 2\rangle$. Aplicando o hamiltoniano (3.2.1) nos vetores da base, temos:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{ext} |2 0\rangle &= 4U_1 |2 0\rangle - \Delta |2 0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J |1 1\rangle - \Omega |0 2\rangle \\
 \hat{H}_{ext} |1 1\rangle &= (U_1 + U_2) |1 1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J |2 0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J |0 2\rangle - \Omega |0 2\rangle \\
 \hat{H}_{ext} |0 2\rangle &= 4U_1 |0 2\rangle + \Delta |0 2\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J |1 1\rangle - \Omega |2 0\rangle
 \end{aligned}$$

Fazendo o "sanduíche" dos vetores acima com os vetores da base, os elementos da primeira coluna ficam:

$$\begin{aligned}
 \langle 2 0 | \hat{H}_{ext} | 2 0 \rangle &= 4U_1 \langle 2 0 | 2 0 \rangle - \Delta \langle 2 0 | 2 0 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 2 0 | 1 1 \rangle - \Omega \langle 2 0 | 0 2 \rangle \\
 &= 4U_1 - \Delta \\
 \langle 2 0 | \hat{H}_{ext} | 1 1 \rangle &= (U_1 + U_2) \langle 2 0 | 1 1 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 2 0 | 2 0 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 2 0 | 0 2 \rangle - \Omega \langle 2 0 | 0 2 \rangle \\
 &= -\frac{\sqrt{2}}{2} J \\
 \langle 2 0 | \hat{H}_{ext} | 0 2 \rangle &= 4U_1 \langle 2 0 | 0 2 \rangle + \Delta \langle 2 0 | 0 2 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 2 0 | 1 1 \rangle - \Omega \langle 2 0 | 2 0 \rangle \\
 &= -\Omega
 \end{aligned}$$

Para a segunda coluna, teremos:

$$\begin{aligned}
 \langle 11 | \hat{H}_{ext} | 20 \rangle &= 4U_1 \langle 11 | 20 \rangle - \Delta \langle 11 | 20 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 11 | 11 \rangle - \Omega \langle 11 | 02 \rangle \\
 &= -\frac{\sqrt{2}}{2} J \\
 \langle 11 | \hat{H}_{ext} | 11 \rangle &= (U_1 + U_2) \langle 11 | 11 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 11 | 20 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 11 | 02 \rangle - \Omega \langle 11 | 02 \rangle \\
 &= (U_1 + U_2) \\
 \langle 11 | \hat{H}_{ext} | 02 \rangle &= 4U_1 \langle 11 | 02 \rangle + \Delta \langle 11 | 02 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 11 | 11 \rangle - \Omega \langle 11 | 20 \rangle \\
 &= -\frac{\sqrt{2}}{2} J
 \end{aligned}$$

E para a terceira coluna:

$$\begin{aligned}
 \langle 02 | \hat{H}_{ext} | 20 \rangle &= 4U_1 \langle 02 | 20 \rangle - \Delta \langle 02 | 20 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 02 | 11 \rangle - \Omega \langle 02 | 02 \rangle \\
 &= -\Omega \\
 \langle 02 | \hat{H}_{ext} | 11 \rangle &= (U_1 + U_2) \langle 02 | 11 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 02 | 20 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 02 | 02 \rangle - \Omega \langle 02 | 02 \rangle \\
 &= -\frac{\sqrt{2}}{2} J \\
 \langle 02 | \hat{H}_{ext} | 02 \rangle &= 4U_1 \langle 02 | 02 \rangle + \Delta \langle 02 | 02 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} J \langle 02 | 11 \rangle - \Omega \langle 02 | 20 \rangle \\
 &= 4U_1 + \Delta
 \end{aligned}$$

Portanto, a forma matricial do operador hamiltoniano \hat{H}_{ext} (3.2.1) fica, em um espaço com duas partículas:

$$\hat{H}_{ext} = \begin{bmatrix} 4U_1 - \Delta & -\frac{\sqrt{2}J}{2} & -\Omega \\ -\frac{\sqrt{2}J}{2} & U_1 + U_2 & -\frac{\sqrt{2}J}{2} \\ -\Omega & -\frac{\sqrt{2}J}{2} & 4U_2 + \Delta \end{bmatrix}$$

A forma matricial para o operador \hat{H}_{red} é obtido do anterior fazendo $\Omega = 0$, portanto:

$$\hat{H}_{red} = \begin{bmatrix} 4U_1 - \Delta & -\frac{\sqrt{2}J}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}J}{2} & U_1 + U_2 & -\frac{\sqrt{2}J}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}J}{2} & 4U_2 + \Delta \end{bmatrix}$$

A.2 N=10

Seguindo os mesmos passos da subseção anterior e observando a simetria do operador, podemos escrever a representação matricial para um sistema de $n = 10$ partículas como:

$$\begin{bmatrix}
 n_1^- & s_1 & d_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 s_1 & n_2^- & s_2 & d_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 d_1 & s_2 & n_3^- & s_3 & d_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & d_2 & s_3 & n_4^- & s_4 & d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & d_3 & s_4 & n_5^- & s_5 & d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & d_4 & s_5 & n_+^- & s_5 & d_5 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & d_5 & s_5 & n_5^+ & s_4 & d_3 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_4 & s_4 & n_4^+ & s_3 & d_2 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_3 & s_3 & n_3^+ & s_3 & d_1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_2 & s_2 & n_2^+ & s_1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_1 & s_1 & n_1^+
 \end{bmatrix}$$

Onde os termos fora da diagonal principal são os parâmetros que representam os termos de tunelamento simples (s_i) e tunelamento duplo (d_i), e os termos na diagonal principal são os termos dependentes do operador \hat{n} e \hat{n}^2 , que comutam com o Hamiltoniano. Para o Hamiltoniano (3.2.1):

$$\begin{aligned}
 n_1^\pm &= 100U_1 \pm 5\Delta & s_1 &= -\frac{J}{2}\sqrt{10} & d_1 &= -5\Omega \\
 n_2^\pm &= 81U_1 + U_2 \pm 4\Delta & s_2 &= -\frac{J}{2}\sqrt{18} & d_2 &= -9\Omega \\
 n_3^\pm &= 64U_1 + 4U_2 \pm 3\Delta & s_3 &= -\frac{J}{2}\sqrt{24} & d_3 &= -12\Omega \\
 n_4^\pm &= 49U_1 + 9U_2 \pm 2\Delta & s_4 &= -\frac{J}{2}\sqrt{28} & d_4 &= -14\Omega \\
 n_5^\pm &= 36U_1 + 16U_2 \pm \Delta & s_5 &= -\frac{J}{2}\sqrt{30} & d_5 &= -15\Omega \\
 n_+^- &= 25U_1 + 25U_2
 \end{aligned}$$

Para o Hamiltoniano (3.1.1) os termos são idênticos, a não ser pelos coeficientes d_i referentes ao tunelamento duplo, que nesse caso são nulos.

Apêndice B

Pares de Lax

Um sistema clássico admite outra formulação, através de estruturas chamadas de *Pares de Lax*, por meio das quais se pode generalizar a noção de integrabilidade segundo Liouville para sistemas contínuos. Um *Par de Lax* consiste em um par de matrizes quadradas, L e M , elementos de alguma álgebra matricial \mathfrak{g} , cujas entradas são funções do espaço de fase, definidas de maneira que a evolução temporal da matriz L , dada pela *Equação de Lax*[16]:

$$\frac{d}{dt}L = [M, L]$$

seja equivalente às equações de movimento de Hamilton do sistema. A Equação de Lax é equivalente à afirmação de que a evolução temporal do sistema é gerada por uma transformação de similaridade. Dado que o traço de uma matriz qualquer é invariante sob tais transformações, a informação sobre as quantidades conservadas do sistema está contida no traço da matriz L e suas potências, já que são as quantidades invariantes frente à evolução temporal do sistema. Então a matriz L pode ser usada para gerar todo o conjunto de primeiras integrais de movimento I_j :

$$I_j = \text{Tr}[L^j]$$

Supondo que um par de Lax foi encontrado e que podem ser obtidas n quantidades conservadas independentes a partir dele, nada garante que estas quantidades estejam em involução entre si, e que, portanto, o sistema seja completamente integrável. A integrabilidade do sistema clássico é garantida pelo seguinte teorema:

Os autovalores de L estão em involução se existe um elemento $r_{12} \in \mathfrak{g} \otimes \mathfrak{g}$, função das variáveis do espaço de fase, de modo que:

$$\{L_1, L_2\} = [r_{12}, L_1] - [r_{21}, L_2] \tag{B.0.1}$$

Com L_1 sendo o operador L definido sobre o espaço $\mathfrak{g} \otimes \mathbb{1}$ e L_2 sobre $\mathbb{1} \otimes \mathfrak{g}$ Onde a quantidade r_{12} é chamada *matriz-r clássica*, e é um elemento do espaço $\mathfrak{g} \otimes \mathfrak{g}$, e denotamos $L_1 := \mathfrak{g} \otimes \mathbb{1}$ e $L_2 := \mathbb{1} \otimes \mathfrak{g}$, $\mathbb{1}$ é o elemento identidade. A prova deste teorema pode ser encontrada em [41].

Para que a Identidade de Jacobi seja satisfeita pela quantidade $\{L_1, L_2\}$, é condição suficiente que a matriz-r clássica satisfaça a relação:

$$[r_{12}, r_{13}] + [r_{12}, r_{23}] + [r_{13}, r_{23}] = 0 \tag{B.0.2}$$

conhecida como Equação de Yang-Baxter clássica (EYBC). Esse formalismo, portanto, fornece um método

para a geração das quantidades conservadas I_j do sistema, além de garantir que estejam em involução, assegurando portanto a integrabilidade. Uma de suas vantagens é que as matrizes L e M podem ser definidas em função de um parâmetro contínuo u , chamado *parâmetro espectral*. Dessa forma, dado o par de Lax $L(u), M(u)$ de um sistema, uma expansão de Taylor em u nos leva à obtenção de uma família infinita de quantidades conservadas, e o conceito de integrabilidade pode ser estendido para sistemas com um número infinito de graus de liberdade, que é o caso para teorias de campo. A idéia geral desse procedimento será apresentada agora, para teorias de campo em 1+1 dimensões (ou seja, uma dimensão temporal e uma dimensão espacial).

Dado um campo clássico, este será descrito por uma função $\phi(x, t)$. Agora, o sistema é descrito em termos da função Lagrangiana $\mathcal{L}(x, t) = \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi})$, e as equações de movimento do sistema são dadas pelas *Equações de Euler-Lagrange*, que são dadas, nesse caso, por [42]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \phi)} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_x \phi)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0$$

Duas matrizes L e M , dependentes do parâmetro espectral u , formam um par de Lax para o campo se as equações de Euler-Lagrange podem ser equivalentemente obtidas a partir da relação:

$$\frac{\partial L}{\partial t} - \frac{\partial M}{\partial x} = [M, L]$$

Essa relação pode ser escrita pelo *problema linear auxiliar*:

$$(\partial_x - L)\phi = 0 \quad (\partial_t - M)\phi = 0$$

Uma vez que o par de Lax para um determinado campo é conhecido, a princípio é possível obter uma sequência de quantidades conservadas para a teoria de campo seguindo um procedimento bem definido. Considere uma translação do campo $\phi(x, t)$ na direção espacial x entre os pontos x' e x'' em um tempo fixo t . A mudança no campo pode ser escrita como $\phi(x'', t) = T(u)\phi(x', t)$, onde $T(u)$ é uma matriz quadrada que deve satisfazer o problema linear auxiliar

$$(\partial_{x''} - L)T(u) = 0$$

A solução formal para este problema dá origem à *matriz de monodromia*[43]

$$T(u) = P \exp \int_{x'}^{x''} L(x, t, u) dx$$

onde P representa o operador ordenamento de caminho. Assumindo que o sistema físico está sujeito à condições de contorno periódicas, pode-se demonstrar [43] que as quantidades

$$t(u) := \text{Tr}[T(u)]$$

denominadas *matrizes de transferência*, são conservadas para quaisquer valores do parâmetro espectral u . Por completeza, devemos assegurar que matrizes de transferência para diferentes parâmetros espectrais estão em involução. Este resultado segue de uma versão ligeiramente alterada da equação (B.0.1)[41]

$$\{T_1(u), T_2(v)\} = [r_{12}(u-v), T_1(u) \otimes T_2(v)] \quad (\text{B.0.3})$$

onde $r_{12}(u-v)$ satisfaz a EYBC (Eq. (B.0.2)):

$$[r_{12}(u-v), r_{13}(u-\omega)] + [r_{12}(u-v), r_{23}(v-\omega)] + [r_{13}(u-\omega), r_{23}(v-\omega)] = 0$$

Recuperamos, assim, a definição de integrabilidade segundo Liouville, já que

$$\{t(u), t(v)\} = 0$$

Para quaisquer u, v . Para funções analíticas, $t(u) = \sum_{n \geq 0} Q_n u^n$, logo a condição acima implica que

$$\{Q_i, Q_j\} = 0$$

Portanto, realizando uma expansão em série em torno de u , os coeficientes da expansão formam uma família de primeiras integrais de movimento.

Referências Bibliográficas

- [1] C. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal, and R. M. Miura, *Physical Review Letters* **19**, 1095 (1967).
- [2] H. Bethe, *Zeitschrift fuer Physik* **71**, 205 (1931).
- [3] J. Links, H.-Q. Zhou, R. H. McKenzie, and M. D. Gould, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, R63 (2003).
- [4] M. T. Batchelor and A. Foerster, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **49**, 24 (2015).
- [5] E. H. Lieb and W. Liniger, *Physical Review* **130**, 1605 (1963).
- [6] E. H. Lieb, *Physical Review* **162**, 162 (1967).
- [7] R. J. Baxter, *Physical Review Letters* **26**, 832 (1971).
- [8] L. D. Faddeev, *Physica Scripta* **24**, 832 (1981).
- [9] V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov, and A. G. Izergin, *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press, 1993.
- [10] J. S. Caux and J. Mossel, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P02023 (2011).
- [11] W. Ketterle and N. J. van Druten, *Physical Review A* **54**, 656 (1996).
- [12] M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, A. Schirotzek, and W. Ketterle, *Nature* **442**, 54 EP (2006).
- [13] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Science* **305**, 1125 (2004).
- [14] P. Wicke, S. Whitlock, and N. van Druten, arXiv preprint arXiv:1010.4545 (2010).
- [15] N. A. Lemos, *Mecânica Analítica*, Livraria da Física, 2007.
- [16] A. Torrielli, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **49**, 323001 (2016).
- [17] L. D. Faddeev, *Translations of the American Mathematical Society-Series 2* **220**, 83 (2007).
- [18] J. Hietarinta, *Journal of Mathematical Physics* **25**, 1833 (1984).
- [19] E. K. Sklyanin, arXiv preprint hep-th/9211111 (1992).
- [20] R. J. Baxter, Exactly solved models in statistical mechanics, in *Integrable systems in statistical mechanics*, page 5, World Scientific, 1985.

- [21] V. G. Drinfeld, *Quantum Groups*, 798 (1987).
- [22] A. B. Zamolodchikov, *Annals of Physics* **120**, 253 (1979).
- [23] J. Plunkett, *An Introduction to the Algebraic Bethe Ansatz: An Ideal Companion for Anyone Planning to Understand the Algebraic Bethe Ansatz from First Principles*, VDM Publishing, 2009.
- [24] C. Dunning, K. E. Hibberd, and J. Links, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P11005 (2006).
- [25] G. P. Brandino, R. M. Konik, and G. Mussardo, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P07013 (2010).
- [26] M. V. Berry and M. Tabor, *Level clustering in the regular spectrum*, in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 356, page 375, The Royal Society, 1977.
- [27] S. R. Dahmen, J. Links, R. H. McKenzie, and H. Q. Zhou, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P10019 (2004).
- [28] R. Pyke, *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* **27**, 395 (1965).
- [29] D. Poilblanc, T. Ziman, J. Bellissard, F. Mila, and G. Montambaux, *Europhysics Letters* **22**, 537 (1993).
- [30] D. A. Rabson, B. N. Narozhny, and A. J. Millis, *Physical Review B* **69**, 054403 (2004).
- [31] A. Relano, J. Dukelsky, J. M. G. Gómez, and J. Retamosa, *Physical Review E* **70**, 026208 (2004).
- [32] M. Albiez et al., *Physical Review Letters* **95**, 010402 (2005).
- [33] A. J. Leggett, *Reviews of Modern Physics* **73**, 307 (2001).
- [34] G. J. Milburn, J. Corney, E. M. Wright, and D. F. Walls, *Physical Review A* **55**, 4318 (1997).
- [35] H. Q. Zhou, J. Links, R. H. McKenzie, and X. W. Guan, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, L113 (2003).
- [36] A. P. Tonel, J. Links, and A. Foerster, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **38**, 1235 (2005).
- [37] A. Trenkwalder et al., *Nature Physics* **12**, 826 EP (2016).
- [38] S. Fölling et al., *Nature* **448**, 1029 (2007).
- [39] S. Zöllner, H. D. Meyer, and P. Schmelcher, *Physical Review Letters* **100**, 040401 (2008).
- [40] D. Rubeni, J. Links, P. S. Isaac, and A. Foerster, *Physical Review A* **95**, 1 (2017).
- [41] O. Babelon, D. Bernard, and M. Talon, *Introduction to classical integrable systems*, Cambridge University Press, 2003.
- [42] L. Landau, *The Classical Theory of Fields*, Course of theoretical physics, Butterworth-Heinemann, 1975.
- [43] T. V. Trufini, *Integrabilidade na gravitação bidimensional*, Dissertação de mestrado, Universidade Federal de São Carlos, 2012.