

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Tese de Doutorado

**Condensados de Bose-Einstein Hetero-atômicos
Moleculares Integráveis ***

Eduardo Cerutti Mattei

Tese realizada sob orientação da Prof^a.
Dr^a. Angela Foerster e co-orientação do
Prof^o. Dr^o. Arlei Prestes Tonel apresen-
tada ao Instituto de Física da UFRGS em
preenchimento parcial dos requisitos para
a obtenção do título de Doutor em Física.

Porto Alegre
Setembro - 2010

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

Agradecimentos

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

★ Ao meu co-orientador Arlei Prestes Tonel, pela ajuda e experiência passadas durante este período.

★ À minha família, minha mãe Rosélia Maria Cerutti Mattei, ao meu pai Lourenço Mattei e a minha irmã Carla Cerutti Mattei, pelo suporte e compreensão durante esta jornada.

★ À minha namorada Gabriela Lontra de Lima pela paciência e incentivo.

★ À Universidade Federal do Rio Grande do Sul, juntamente com o Instituto de Física por me darem as condições necessárias para o estudo.

★ Aos Professores do IF que serviram como inspiração neste período.

★ Ao CNPq pelo financiamento durante o período de pós-graduação.

Muito Obrigado.

Resumo

Estudamos um modelo exatamente solúvel para um condensado de Bose-Einstein hetero-atômico molecular. Começamos por uma revisão da integrabilidade do modelo através da álgebra de Yang-Baxter. Usando uma análise clássica, determinamos os pontos fixos do espaço de fase do sistema. Encontramos bifurcações dos pontos fixos que separam o espaço de parâmetros em diferentes regiões. Dois cenários distintos emergem, dependendo do número de átomos de espécies diferentes ser igual ou não. Este resultado sugere que as propriedades do estado fundamental do sistema exibem uma sensibilidade incomum à diferença hetero-atômica. Confirmamos esta indicação através de análises quânticas usando diferentes métodos, tais como o gap de energia, fidelidade, emaranhamento e o comportamento das soluções das equações do *ansatz* de Bethe para o estado fundamental.

Abstract

We study an exactly solvable model for hetero-atomic-molecular Bose-Einstein condensates. We start by revisiting the integrability of the model through the Yang-Baxter algebra. Using a classical analysis we determine the phase space fixed points of the system. It is found that bifurcations of the fixed points naturally separate the coupling parameter space in different regions. Remarkably, two distinct scenarios emerge, depending if the number of atoms of different species is equal or not. This result suggests the ground-state properties of the model exhibit an unusual sensitivity on the atomic imbalance. We then confirm this finding by a quantum analysis using different approaches, such as the energy gap, the fidelity, the entanglement and the behaviour of the ground-state solutions of the Bethe ansatz equations.

Sumário

1	Introdução	2
2	Modelo	8
2.1	Hamiltoniano	9
2.2	Integrabilidade	10
3	Análise Clássica	21
3.1	Caso I: $k \neq 0$	23
3.2	Caso II: $k = 0$	25
4	Análise Quântica	30
4.1	Mapeamento	31
4.1.1	Análise no limite sem espalhamento	36
4.2	Dinâmica Quântica	39
5	Transições de Fase Quânticas	41
5.1	Gap de Energia	43
5.2	Fidelidade	44
5.3	Emaranhamento	48
5.4	Equações do Ansatz de Bethe	51
5.5	Fração Molecular	56
6	Conclusões	58
6.1	Conclusão	59
6.2	Perspectivas para o futuro	61
6.3	Trabalhos publicados e em preparação	61
A	Representação matricial	62
A.1	$N=4, J=0$	64
A.2	$N=20, J=0$	65
A.3	$N=10, J=4$	66
A.4	$N=24, J=8$	69

<i>SUMÁRIO</i>	1
B Emaranhamento	71
B.1 Traço sobre o espaço de moléculas	74
B.2 Traço sobre o espaço de átomos tipo a	76
B.3 Traço sobre o espaço de átomos tipo b	79
Referências	82

Capítulo 1

Introdução

O fenômeno conhecido como Condensação de Bose-Einstein foi previsto teoricamente em 1924 por Albert Einstein [1, 2]. Esta descoberta surpreendente é uma conseqüência da estatística de Bose [3]. Posteriormente, este fenômeno receberia o nome de Condensados de Bose-Einstein em homenagem a estes dois grandes cientistas do século passado. Desde a predição teórica até a realização experimental em 1995, foram precisos aproximadamente 70 anos de estudo e aprimoramento das técnicas utilizadas nos laboratórios. A obtenção do condensado de Bose-Einstein em gases atômicos diluídos abriu a possibilidade de investigar o comportamento de uma nova classe de sistemas quânticos. Subsequentemente, o fenômeno tem sido cada vez mais investigado, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental.

Para entendermos como e porque a condensação de Bose-Einstein acontece precisamos, primeiramente, revisar a estatística das diferentes partículas quânticas. As partículas quânticas são divididas em dois grandes conjuntos, batizados de bósons e férmions. Essa classificação tem como diferenciação, entre os grupos de partículas, a estatística que as mesmas obedecem. Os férmions são os constituintes básicos da matéria, e podemos citar como exemplo os quarks, elétrons e neutrinos. São partículas de spin semi-inteiro: $1/2$, $3/2$, $5/2$, e assim por diante. E como característica definidora, obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, que basicamente declara que férmions não podem ocupar os mesmos estados quânticos. Os bósons por sua vez, são a antítese deste comportamento. A eles é permitido possuírem os mesmos números quânticos, em outras palavras, ocuparem o mesmo estado quântico independentemente do número de bósons. Todos eles possuem spins inteiros: 1 , 2 , $3 \dots$. E como exemplo de bósons temos os fótons, glúons e átomos como o ^{87}Rb .

O fato dos bósons poderem ocupar o mesmo estado quântico é a característica determinante na compreensão do fenômeno da condensação de Bose-Einstein. Em temperatura ambiente, em torno de 300K , os átomos se comportam como partículas clássicas e sua energia é muito elevada para observarmos fenômenos quânticos. Nessas condições os gases podem ser descritos pela estatística de Boltzmann. Mas em temperaturas mais baixas, o comprimento de onda de *de Broglie* aumenta, seguindo a relação de proporcionalidade inversa ao momentum da partícula $\lambda_{dB} = \hbar/p$. Quando atinge-se uma temperatura crítica $T = T_c$, o comprimento de onda de de Broglie é comparável à distância média entre os átomos, os pacotes de onda interferem uns com os outros. A condensação de Bose-Einstein ocorre quando estes átomos ocupam todos o estado fundamental e formam uma única função de onda, onde é impossível distinguir cada um dos átomos.

Desde a previsão de Bose e Einstein, diferentes técnicas experimentais de resfriamento a baixíssimas temperaturas foram desenvolvidas, e em 1995 as

primeiras realizações experimentais dos condensados de Bose-Einstein (CBE) foram obtidas por Anderson, Bradley e Davies [4, 5, 6], usando vapores de átomos do grupo dos metais alcalinos ^{87}Rb , ^7Li e ^{23}Na . A condensação de Bose-Einstein foi obtida, basicamente, combinando a técnica de resfriamento por laser com a técnica de resfriamento evaporativo. A técnica de resfriamento por laser funciona a partir do princípio de transferência de momentum linear. Aparentemente utilizar luz para esfriar um gás parece contra intuitivo, mas se utilizado da maneira e configuração adequada é possível obter uma grande redução de temperatura para um gás de bósons. Como sabido, os átomos do gás sofrem espalhamento somente de fótons com determinados valores de comprimento de onda. Sendo assim, utilizando engenhosamente o efeito Doppler, podemos escolher uma frequência, para o laser, levemente deslocada para o "vermelho". Com essa alteração, os átomos que se deslocam no sentido contrário ao feixe do laser sofrem uma força contrária que freia o seu movimento. Criando um aparato onde os raios lasers possam convergir de diferentes eixos em um único ponto, concentramos neste ponto uma região onde os átomos são resfriados [7].

Mas o resfriamento por laser não é suficiente para atingir a temperatura e densidades necessárias para a obtenção do condensado. Após o resfriamento por laser os átomos são aprisionados por uma armadilha magneto-ótica e usa-se a técnica de resfriamento evaporativo. Esse método é muito eficaz em proporcionar grandes taxas de resfriamento e consiste em diminuir levemente o valor do potencial magnético que aprisiona os átomos. Essa diminuição permite que os átomos mais energéticos possam escapar do condensado, levando com eles grande quantidade de energia. É importante notar que a interação entre átomos, mesmo sendo fraca para a obtenção do condensado de Bose-Einstein, é muito importante, pois só através dela os átomos podem transferir energia para o átomo que é ejetado para fora do condensado diminuindo a energia média dos átomos restantes. Ao mesmo tempo em que a temperatura cai a densidade também aumenta, pois, os átomos possuindo menos energia se concentram no mínimo do potencial magnético da armadilha. Por fim o gás acaba atingindo a temperatura crítica em torno de 100 nK e densidade crítica de aproximadamente 5×10^{12} átomos por cm^3 para a formação do condensado de Bose-Einstein [8].

Desde sua realização experimental, diversos estudos e aplicações para condensados atômicos têm sido realizados. Entre eles, citamos em particular o fenômeno do tunelamento Josephson e o auto-aprisionamento entre dois condensados [9, 10, 11]. O fenômeno de tunelamento, previsto por B. D. Josephson [12] em 1962 e verificado pela primeira vez em [13], descreve o tunelamento de elétrons entre dois supercondutores separados por uma fina camada isolante. Para o caso dos condensados de Bose-Einstein, técnicas ex-

perimentais permitem dividir um condensado de forma a se obter um duplo poço potencial. A não linearidade da interação entre os átomos que tunelam pela barreira de potencial determina os regimes dinâmicos observados, e, dependendo das condições iniciais do experimento, pode-se observar o fenômeno de tunelamento ou auto-aprisionamento.

A partir do crescimento no domínio das técnicas experimentais, foram também realizadas inúmeras tentativas de obtenção de moléculas ultra frias nos CBE. Esse objetivo encerra maiores dificuldades, pois, devido à conservação de momentum, a associação molecular não pode ser gerada por uma simples colisão de dois corpos, mas exige um processo de colisão de três corpos, troca de fótons (fotoassociação) ou transição adiabática (magnetoassociação). Em 2002, moléculas ultra frias foram produzidas em um CBE através da ressonância de Feshbach, onde átomos se unem para formar um estado ligado molecular durante um curto intervalo de tempo e se separam formando novamente um estado não ligado. Aplicando pulsos magnéticos próximos da ressonância de Feshbach em um condensado de ^{85}Rb [14], uma mistura coerente de átomos e moléculas diatômicas foi obtida no condensado. Estes condensados são chamados de condensados de Bose-Einstein atômico-moleculares (CBE-AM).

Recentemente também foram produzidas moléculas hetero-atômicas do tipo $^{41}\text{K}^{87}\text{Rb}$ a partir de magnetoassociação [15, 16]. Estas moléculas hetero-atômicas têm atraído especial interesse uma vez que seu momento de dipolo permanente permite sua manipulação a partir de campos externos, possibilitando maior controle na interação molecular. Tais condensados também despertam interesse pela sua possível aplicação em diversos campos, como na espectroscopia fotoassociativa [18], em estudos de simetria fundamental [19] e até mesmo na computação quântica [20].

Do ponto de vista teórico, existem diferentes técnicas e modelos para explicar os fenômenos envolvendo os condensados de Bose-Einstein, como as equações de Gross-Pitaevskii, a aproximação de campo médio, entre outros. Uma ferramenta importante na evolução dos aspectos teóricos dos condensados tem sido o desenvolvimento e a aplicação de técnicas matemáticas potentes. O estudo destes fenômenos é extremamente difícil, já que muitas vezes não se pode aplicar métodos aproximados, como, por exemplo, a teoria de perturbações e a teoria de campo médio, devido à existência de grandes flutuações quânticas. Assim, neste contexto, a técnica das soluções exatas de modelos físicos tem recentemente atraído muita atenção da comunidade. O estudo de soluções exatas de modelos tem sua origem no trabalho de Bethe no modelo de Heisenberg [21], em 1931. Posteriormente, este campo recebeu grandes contribuições de Yang [22], Baxter [23], Faddeev e Takhtajam [24], entre outros, e tem prosperado muito. Trabalhos recentes em nanogrãos

levaram a área de modelos exatamente solúveis para uma audiência nova e muito maior, quando a solução exata do modelo BCS reduzido (Bardeen, Cooper e Schrieffer) foi obtida por Richardson [25]. Neste cenário, modelos exatamente solúveis para condensados de Bose-Einstein foram propostos e alguns casos particulares foram investigados [26, 27, 28, 29, 30, 31].

Dentre estes modelos particulares investigados, citamos o modelo de dois condensados de Bose-Einstein acoplados por tunelamento Josephson, descrito pelo hamiltoniano

$$H = U_1 N_1^2 + U_2 N_2^2 + U_{12} N_1 N_2 + \mu_1 N_1 + \mu_2 N_2 - \frac{\varepsilon_j}{2} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1),$$

onde a_i^\dagger e a_i são operadores de criação e aniquilação de átomos e $N_i = a_i^\dagger a_i$ são operadores número de átomos em cada condensado. Os parâmetros $U_{i(j)}$ são as amplitudes de espalhamento de onda-S entre os átomos nos (entre os) respectivos condensados, μ_i são os potenciais externos e ε_j a amplitude de tunelamento de átomos entre um condensado e outro. Este modelo exhibe grande riqueza, descrevendo propriedades como o tunelamento e o auto-aprisionamento, investigados em [32, 33]. Este modelo exemplifica sistemas onde seu estudo, livre de aproximações, é realizado através do uso de soluções exatas obtidas pelo método do Ansatz de Bethe. Outro modelo que segue a mesma sistemática é dado por

$$H = U_a N_a^2 + U_c N_c^2 + U_{ac} N_a N_c + \mu_a N_a + \mu_c N_c - \Omega (a^\dagger a^\dagger c + c^\dagger a a),$$

o qual descreve um condensado de Bose-Einstein homo-atômico molecular [34, 35]. Acima, utiliza-se novamente a notação usual do espaço de Fock, onde a^\dagger é o operador de criação de um átomo do tipo a e c^\dagger é o operador de criação do estado molecular. Os parâmetros U_i descrevem ondas de espalhamento do tipo S, μ_i 's são os potenciais externos e Ω é a amplitude de interconversão de átomos em moléculas. Este hamiltoniano tem a interpretação natural de um condensado atômico-molecular formado por dois átomos que podem se ligar e formar uma molécula diatômica.

Nesta tese, vamos nos concentrar no modelo exatamente solúvel que descreve a interconversão de átomos e moléculas num CBE hetero-atômico molecular, que corresponde a uma generalização do caso acima, em que dois átomos diferentes, a e b , podem se combinar e produzir uma molécula c . Este modelo hetero-atômico molecular apresenta vantagens técnicas sobre outros tipos de modelos de condensados atômico-moleculares exatamente pelo fato de possuir diferentes tipos de átomos em sua constituição e a possível formação de moléculas no mesmo. Estes dímeros podem apresentar momentum de dipolo, o que possibilita um forma de rastreamento e manipulação bastante valiosa do ponto de vista experimental.

O objetivo é fazer um estudo completo e detalhado deste modelo, desde a sua solução exata via ansatz de Bethe, a discussão das dinâmicas clássica e quântica, o mapeamento do modelo em um problema de equação de Schrödinger com um potencial efetivo até a investigação das transições de fase quânticas. A tese está organizada da seguinte forma: no capítulo 2, estudamos a integrabilidade e a solução exata do hamiltoniano que descreve o condensado hetero-atômico molecular, incluindo o limite sem espalhamento. No capítulo 3, fazemos uma análise clássica do modelo em diferentes limites frente às diferenças hetero-atômicas. No capítulo 4, utilizamos métodos de mapeamento espectral na equação de Schrödinger e realizamos a dinâmica quântica. No capítulo 5, fazemos uma análise das transições de fase quânticas deste modelo utilizando os conceitos de gap, fidelidade, emaranhamento, comportamento das raízes das equações do ansatz de Bethe e o número médio molecular do condensado. Por fim, no capítulo 6, apresentamos as conclusões e perspectivas para o trabalho. Os resultados obtidos nos capítulos 3, 4 e 5 são originais e constituem a contribuição do autor para a área.

Capítulo 2

Modelo

2.1 Hamiltoniano

Neste trabalho iremos estudar o modelo geral para o hamiltoniano que descreve um condensado de Bose-Einstein hetero-atômico molecular, ou seja, um sistema constituído por duas espécies distintas de átomos, batizados como átomos do tipo a e átomos do tipo b , que podem, um de cada espécie, se combinar para formar uma molécula, chamada molécula c . O hamiltoniano mais geral que descreve este modelo é dado por [36]

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

Os operadores canônicos de criação e aniquilação $\{a, b, c, a^\dagger, b^\dagger, c^\dagger\}$ obedecem às relações usuais de comutação

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad [N_a, a] = -a, \quad [N_a, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (2.2)$$

Os parâmetros U_{ij} são as amplitudes de espalhamento de onda-S que quantificam as interações interatômicas, intermoleculares e também do tipo átomo-molécula; μ_i são os potenciais externos e Ω é a amplitude de interconversão de átomos e moléculas. Este hamiltoniano age no espaço de Fock, que é gerado pelos vetores

$$|n_a, n_b, n_c\rangle = \frac{(a^\dagger)^{n_a} (b^\dagger)^{n_b} (c^\dagger)^{n_c}}{\sqrt{n_a! n_b! n_c!}} |0, 0, 0\rangle \quad (2.3)$$

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

$$N_a |n_a; n_b; n_c\rangle = n_a |n_a; n_b; n_c\rangle,$$

onde $N_a = a^\dagger a$, $N_b = b^\dagger b$ e $N_c = c^\dagger c$, são os operadores número de átomos do tipo a , átomos do tipo b e moléculas c , respectivamente. Como o hamiltoniano (2.1) não depende explicitamente do tempo e comuta com $J = N_a - N_b$ e com o número total de átomos $N = N_a + N_b + 2N_c$, os autovalores desses operadores também são grandezas conservadas. O operador J é chamado de diferença hetero-atômica e a partir dele podemos definir $k \equiv J/N$, $k \in [-1, 1]$, chamado de diferença hetero-atômica normalizada. Este hamiltoniano pertence a uma classe especial, dos chamados modelos integráveis, o que significa que podemos resolvê-lo analiticamente. Por este motivo, na próxima seção, faremos uma revisão [36] sobre a integrabilidade deste modelo e mostraremos como podemos obter este hamiltoniano e sua solução exata através de álgebras específicas.

2.2 Integrabilidade

Fundamentalmente, a integrabilidade foi um conceito desenvolvido para aplicação e estudo de sistemas clássicos. O Hamiltoniano de um sistema clássico finito é dito integrável quando possui um conjunto de integrais de movimento igual à metade da dimensão do espaço de fases [37]. Estas integrais de movimento (incluindo o hamiltoniano) devem ser independentes e comutativas em relação ao colchete de *Poisson*

$$[I_j, I_k] \equiv \sum_l \left(\frac{\partial I_j}{\partial q_l} \frac{\partial I_k}{\partial p_l} - \frac{\partial I_j}{\partial p_l} \frac{\partial I_k}{\partial q_l} \right) = 0,$$

onde q_l e p_l são as variáveis canônicas. Cientes da definição de integrabilidade, podemos estendê-la para aplicação na mecânica quântica, embora a extensão do conceito de integrabilidade clássica para integrabilidade quântica não seja trivial e apresente alguns problemas. Maiores detalhes estão discutidos em [38]. Esta extensão é feita através da obtenção de um conjunto de operadores quânticos $\{t(u)\}$, onde $u \in \mathbb{C}$ é o chamado *parâmetro espectral*. Este conjunto de operadores age sobre o espaço vetorial que representa o espaço de Hilbert dos estados quânticos, devendo obedecer à relação de comutação

$$[t(u), t(v)] = 0, \quad \forall \quad u, v \in \mathbb{C}. \quad (2.4)$$

A partir da relação acima, podemos perceber que os operadores $\{t(u)\}$ podem ser diagonalizados independentemente da escolha de u , o que significa que seus autovetores também serão independentes do parâmetro espectral. Esta característica é de fundamental importância para a utilização do método algébrico do ansatz de Bethe. Outra característica muito importante pode ser observada se expressarmos os operadores através de uma expansão em série

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

e obedecendo a relação (2.4), $t(u)$ deve comutar com as suas derivadas de qualquer ordem, implicando que

$$[\chi_i, \chi_j] = 0.$$

Podemos, desta forma, garantir a integrabilidade do sistema quando expressamos o hamiltoniano através dos operadores $\{\chi_i\}$. Sendo assim, automaticamente estes operadores comutarão com o hamiltoniano constituindo, cada um deles, uma quantidade conservada. O requisito final é satisfeito quando estas quantidades conservadas constituem tantas integrais de movimento quanto

o número de graus de liberdade do sistema, qualificando este hamiltoniano como integrável.

A certificação do sistema como sendo um modelo integrável possibilita a utilização do método de espalhamento quântico inverso [39, 40]. A teoria de sistemas quânticos exatamente solúveis é fundamentada na construção de uma álgebra τ_R , chamada *álgebra de Yang-Baxter*. Esta álgebra é constituída por operadores T_j^i , sendo $i, j \in \{1 \dots d\}$. Estes operadores são representados por matrizes $T(u)$, do tipo $d \times d$, chamadas de *matrizes de monodromia*. Os operadores da álgebra τ_R devem obedecer à seguinte relação

$$\sum_{j,l=1}^d R_{jl}^{ik}(u-v)T_p^j(u)T_q^l(v) = \sum_{j,l=1}^d T_j^k(v)T_l^i(u)R_{pq}^{lj}(u-v), \quad (2.5)$$

onde os elementos R_{jl}^{ik} são as constantes de estrutura da álgebra representados por uma matriz $d^2 \times d^2$, chamada *matriz-R*. Reescrevendo na forma matricial temos

$$R_{12}(u-v)T_1(u)T_2(v) = T_2(v)T_1(u)R_{12}(u-v). \quad (2.6)$$

A associatividade da álgebra implica que as constantes de estrutura R_{jl}^{ik} devem obedecer à relação

$$R_{12}(u-v)R_{13}(u-w)R_{23}(v-w) = R_{23}(v-w)R_{13}(u-w)R_{12}(u-v) \quad (2.7)$$

conhecida como *equação de Yang-Baxter*. A equação (2.7) também está presente em muitos outros ramos da física e matemática, como a mecânica estatística bidimensional clássica [23], teoria de nós [41, 42], teoria de espalhamento [43], matéria condensada [44], física atômica e molecular [45], teoria de cordas [46], entre outros.

Um ponto crucial no desenvolvimento do método está centrado na propriedade do traço $t(u)$ da matriz de monodromia $T(u)$

$$t(u) = \sum_{i=1}^d T_i^i(u), \quad (2.8)$$

obtido através da relação fundamental (2.5), em criar um conjunto completo de operadores que comutam. Tais operadores podem ser usados como representações das integrais de movimento do modelo quântico, garantindo sua integrabilidade.

Para continuarmos o desenvolvimento do método devemos encontrar as formas matriciais que satisfaçam a álgebra de Yang-Baxter. Seguindo o trabalho [30], primeiro passo para esta tarefa é escolher a matriz R . Vamos

utilizar a seguinte matriz

$$R(u) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(u) & c(u) & 0 \\ 0 & c(u) & b(u) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Na matriz (2.9), os elementos $b(u) = u/(u + \eta)$ e $c(u) = \eta/(u + \eta)$ são funções do parâmetro espectral u , e η é um parâmetro complexo arbitrário. Essa matriz satisfaz a álgebra de Yang-Baxter (2.7) e é invariante frente ao grupo $gl(2)$, ou seja

$$[R(u), g \otimes g] = 0, \quad (2.10)$$

onde g é qualquer matriz 2×2 . Devido a representação (2.9), as matrizes de monodromia $T(u)$ são dadas por matrizes 2×2

$$T(u) = \begin{pmatrix} A(u) & B(u) \\ C(u) & D(u) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

e o operador $t(u)$ toma a seguinte forma

$$t(u) = A(u) + D(u). \quad (2.12)$$

Pode-se mostrar usando a equação (2.6) que $[t(u), t(v)] = 0$, ou seja, o modelo é integrável. Estabelecida a forma matricial para as matrizes R e T , através da relação da álgebra de Yang-Baxter (2.7), podemos obter algumas relações de comutação entre os elementos da matriz de monodromia $T(u)$

$$\begin{aligned} [A(u), A(v)] &= [D(u), D(v)] = 0, \\ [B(u), B(v)] &= [C(u), C(v)] = 0, \\ A(u)C(v) &= \frac{u-v+\eta}{u-v}C(v)A(u) - \frac{\eta}{u-v}C(v)A(u), \\ D(u)C(v) &= \frac{u-v-\eta}{u-v}C(v)D(u) + \frac{\eta}{u-v}C(v)D(u). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Devemos lembrar que o hamiltoniano do sistema integrável será reescrito em função das integrais de movimento representadas pelo operador $t(u)$. Desta forma, para resolvermos o sistema integrável devemos encontrar os autovalores e autoestados deste operador, isto é, devemos resolver o problema de autovalores $t(u)|\vec{v}\rangle = \Lambda|\vec{v}\rangle$. Para isso, é fundamental a escolha de um estado de pseudo-vácuo adequado para a utilização do método algébrico do *ansatz de Bethe*. Este estado de pseudo-vácuo $|0\rangle$ deve ter as seguintes propriedades

$$\begin{aligned} A(u)|0\rangle &= a(u)|0\rangle, \\ B(u)|0\rangle &= 0, \\ C(u)|0\rangle &\neq 0, \\ D(u)|0\rangle &= d(u)|0\rangle, \end{aligned} \quad (2.14)$$

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

Assumimos *a priori* a existência do estado de pseudo-vácuo e, aplicando o operador $C(u)$ e utilizando as propriedades (2.14), escolhemos o chamado *estado de Bethe*, representado pelo vetor

$$|\vec{v}\rangle \equiv |v_1, \dots, v_M\rangle = \prod_{i=1}^M C(v_i)|0\rangle, \quad (2.15)$$

onde a ordem de aplicação dos operadores $C(u)$ sobre o pseudo-vácuo não é importante, pois $[C(u), C(v)] = 0$.

Utilizando as relações de comutação (2.13) conseguimos calcular a ação do operador $t(u)$ no vetor $|\vec{v}\rangle$, obtendo

$$\begin{aligned} t(u)|\vec{v}\rangle &= \Lambda(u, \vec{v})|\vec{v}\rangle \\ &\quad - \left(\sum_i^M \frac{\eta a(v_i)}{u - v_i} \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j + \eta}{v_i - v_j} \right) C(u)|\vec{v}_1\rangle \\ &\quad + \left(\sum_i^M \frac{\eta d(v_i)}{u - v_i} \prod_{j \neq i}^M \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j} \right) C(u)|\vec{v}_1\rangle \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde

$$\Lambda(u, \vec{v}) = a(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i + \eta}{u - v_i} + d(u) \prod_{i=1}^M \frac{u - v_i - \eta}{u - v_i}. \quad (2.17)$$

Podemos notar que $\Lambda(u, \vec{v})$ na fórmula (2.16) constitui o autovalor e $|\vec{v}\rangle$ o autovetor do operador $t(u)$, somente se os demais termos presentes na fórmula forem nulos. Tais termos se anularão se as seguintes equações forem satisfeitas

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

e essas equações são conhecidas como *equações do ansatz de Bethe*. Vale ressaltar que na derivação das equações do ansatz de Bethe é um requisito importante que $v_i \neq v_j \forall i, j$. Se este requisito não é obedecido as equações do ansatz de Bethe podem levar a contradições e incoerências nos cálculos resultando em uma função de onda nula, como demonstrado em [47]. As equações do ansatz de Bethe possibilitam a transformação do problema em uma questão puramente algébrica, codificando toda a informação presente no hamiltoniano que descreve o sistema integrável em um conjunto de equações. Encontrar o conjunto de raízes $\{v_i\}$ que satisfaçam as equações (2.18) significa obter a forma para as autoenergias e os autovetores do modelo quântico exatamente solúvel.

O último e não menos importante passo na resolução do modelo integrável reside em encontrar uma forma de representação para os geradores da álgebra τ_R . No método algébrico do ansatz de Bethe, esta representação atua no espaço vetorial V , o espaço de estados físicos, sendo denotados por π e chamadas *operadores-L* ou *operadores-Lax*

$$L(u) = \pi(T(u)) = \begin{pmatrix} \pi(A(u)) & \pi(B(u)) \\ \pi(C(u)) & \pi(D(u)) \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

com a qual podemos escrever o operador $t(u)$ como

$$t(u) = \pi(\text{tr}T(u)) = \pi(A(u) + D(u)) = \text{tr}L(u). \quad (2.20)$$

Iremos chamar a representação do operador $t(u)$ de *matriz de transferência*.

Uma importante propriedade da álgebra de Yang-Baxter se deve ao fato da mesma possuir uma estrutura de co-multiplicação, que nos permite construir um produto tensorial de representações. Possuindo duas representações distintas L^U e L^W , cada uma delas obedecendo à álgebra de Yang-Baxter (2.6), gerando $L = L^U L^W$, poderemos verificar então que L também obedecerá à relação (2.6). Além disso, se $L(u)$ é um operador-Lax, pode-se mostrar que $L(u + \alpha)$, para qualquer α , também será um operador-Lax [30]. Utilizando todas estas características, escolhemos duas realizações para os operadores-Lax. Primeiramente a realização em termos dos operadores bosônicos c e c^\dagger que obedecem à relação de comutação $[c, c^\dagger] = 1$, sendo [48]

$$L^c(u) = \begin{pmatrix} (1 + \eta u)I + \eta^2 N_c & \eta c \\ \eta c^\dagger & I \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

onde $N_c = c^\dagger c$. Outra realização importante para o modelo é em termos da simetria $su(1, 1)$ dos geradores K^z e K^\pm [51, 52]

$$L^K(u) = \frac{1}{u} \begin{pmatrix} uI + \eta K^z & \eta K^- \\ -\eta K^+ & uI - \eta K^z \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

que obedecem às relações de comutação

$$[K^z, K^\pm] = \pm K^\pm, \quad [K^+, K^-] = -2K^z. \quad (2.23)$$

A partir das realizações $L^c(u)$ e $L^K(u)$, e utilizando a propriedade de co-multiplicação da álgebra de Yang-Baxter, construiremos o operador-Lax para a representação do hamiltoniano (2.1). Ele é obtido através da seguinte relação

$$L(u) = u\mathfrak{g}L^c(u - \eta^{-1} + \omega)L^K(u), \quad (2.24)$$

onde $\mathbf{g} = \text{diag}(-1, 1)$, e $\omega(x)$ é um polinômio arbitrário em função de x .

Para completarmos a representação do hamiltoniano (2.1), precisamos descrevê-lo em função das suas integrais de movimento. A integrabilidade do modelo é garantida quando essas integrais de movimento são representadas pela matriz de transferência. Sendo assim, para consolidarmos esta etapa do método adotaremos a seguinte realização discreta da álgebra $su(1, 1)$

$$K^+ = a^\dagger b^\dagger, \quad K^- = ab, \quad K^z = \frac{N_a + N_b + 1}{2}, \quad (2.25)$$

onde os operadores $\{a, a^\dagger\}$ e $\{b, b^\dagger\}$ são os operadores de criação e aniquilação de átomos do tipo a e b , respectivamente. Adotando esta realização da álgebra, a matriz de transferência resulta na seguinte forma

$$\begin{aligned} t(u) = & -\eta u^2 - \eta^3 N_c (N_a/2 + N_b/2 + 1/2) - \eta^2 K^z \omega(N/2 + 1/2) \\ & + u(2 - \eta^2(N/2 + 1/2) - \eta \omega(N/2 + 1/2)) \\ & + \eta^2 (a^\dagger b^\dagger c + abc^\dagger). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Estabelecemos agora a relação entre a matriz de transferência $t(u)$ e o hamiltoniano (2.1)

$$\begin{aligned} H = & \sigma + \delta(N/2 + 1/2) + \chi(N/2 + 1/2)^2 + \rho \mathbb{J} + \nu \mathbb{J}^2 \\ & + \xi \mathbb{J}(N/2 + 1/2) + \eta^{-2} \Omega t(0), \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde o operador $\mathbb{J} \equiv N_a - N_b$ tem como observáveis o valor J da diferença hetero-atômica. Para o polinômio $\omega(x)$ escolhemos a forma

$$\omega(N/2 + 1/2) = \zeta(N/2 + 1/2) + \gamma \mathbb{J} + \tau, \quad (2.28)$$

e as constantes de acoplamento são vinculadas aos parâmetros do hamiltoniano (2.1) através das seguintes relações

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{U_{aa} + U_{bb} + U_{cc} + U_{ab} - U_{ac} - U_{bc}}{\Omega} \\ \zeta &= \frac{U_{cc} - U_{aa} - U_{bb} - U_{ab}}{\Omega} \\ \tau &= \frac{2U_{aa} + 2U_{bb} + 2U_{ab} - U_{ac} - U_{bc} + 2\mu_c - 2\mu_a - 2\mu_b}{2\Omega} \\ \gamma &= \frac{2U_{bb} - 2U_{aa} + U_{ac} - U_{bc}}{2\Omega} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma &= \frac{U_{aa} + U_{bb} + U_{ab} - 2\mu_a - 2\mu_b}{4} \\
\delta &= \frac{2\mu_c - U_{ac} - U_{bc}}{2} \\
\chi &= U_{cc} \\
\rho &= \frac{U_{bb} - U_{aa} + \mu_a - \mu_b}{2} \\
\nu &= \frac{U_{aa} + U_{bb} - U_{ab}}{4} \\
\xi &= \frac{U_{ac} - U_{bc}}{2}.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Como podemos notar, conseguimos demonstrar a integrabilidade do hamiltoniano (2.1) utilizando a matriz de transferência $t(u)$ para descrevê-lo. Os outros elementos presentes em (2.27), além da matriz de transferência, são dependentes de constantes do modelo, como o número total de átomos N e a diferença hetero-atômica J . Dessa maneira, estamos aptos a resolver o modelo utilizando as equações do ansatz de Bethe algébrico. Para encontrarmos a forma específica das equações do ansatz de Bethe basta aplicarmos os operadores $A(u)$ e $D(u)$ no estado de pseudo-vácuo, representado pelo vetor $|0\rangle \equiv |0\rangle_a |0\rangle_b |0\rangle_c = |0, 0, 0\rangle$, que foi escolhido como o produto tensorial dos espaços de Fock, pois ele é aniquilado pelo operador $B(u)$, de onde obtemos os seguintes autovalores

$$\begin{aligned}
a(u) &= (u + \eta(J/2 + 1/2))(1 - \eta u - \eta(\zeta(N/2 + 1/2) + \gamma J + \tau)) \\
d(u) &= u - \eta(J/2 + 1/2).
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Utilizando as relações (2.30) juntamente com a equação (2.17), encontramos as autoenergias do hamiltoniano (2.1) [36]

$$\begin{aligned}
E(\vec{v}) &= \sigma + \delta(N/2 + 1/2) + \chi(N/2 + 1/2)^2 + \rho J + \nu J^2 \\
&\quad + \xi J(N/2 + 1/2) - \eta^{-1} \Omega(J/2 + 1/2) \prod_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{v_i + \eta}{v_i} \\
&\quad + \eta^{-1} \Omega(J/2 + 1/2) (1 - \eta(\zeta(N/2 + 1/2) + \gamma J + \tau)) \prod_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{v_i - \eta}{v_i}.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Da mesma forma utilizamos a relação (2.18) para encontrarmos as equações

do ansatz de Bethe

$$[1 - \eta(v_i + \zeta(N/2 + 1/2) + \gamma J + \tau)] \left[\frac{v_i + \eta(J/2 + 1/2)}{v_i - \eta(J/2 + 1/2)} \right] = \prod_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta}. \quad (2.32)$$

Agora que obtivemos as equações (2.32), podemos resolver o hamiltoniano (2.1) simplesmente encontrando as raízes $\{v_i\}$ e, dessa maneira, reconstruindo as autoenergias e os autovetores. Como mencionado anteriormente, o hamiltoniano (2.1) representa a forma mais geral para as interações em um condensado de Bose-Einstein hetero-atômico molecular, mas muito de sua física pode ser emulada no limite sem espalhamento

$$H = \mu N_c + \Omega(a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger b a), \quad (2.33)$$

onde aplicamos $U_{ij} = 0$, $\mu_a = \mu_b = 0$ e $\mu_c = \mu$. Para o caso em que todos os parâmetros U_{ij} são nulos, o hamiltoniano em questão modela a geração de harmônicos de segunda ordem em óptica quântica [49, 50]. Anular os parâmetros do modelo, com exceção de μ_c , significa que as relações (2.29) assumirão os seguintes valores

$$\begin{aligned} \eta &\rightarrow 0 & \delta &\rightarrow \mu \\ \zeta &\rightarrow 0 & \chi &\rightarrow 0 \\ \tau &\rightarrow \mu/\Omega & \rho &\rightarrow 0 \\ \gamma &\rightarrow 0 & \nu &\rightarrow 0 \\ \sigma &\rightarrow 0 & \xi &\rightarrow 0 \end{aligned}$$

Verifica-se prontamente que apenas dois parâmetros não se anulam, mas entre os parâmetros nulos encontra-se η , do qual o valor do produtório nas equações do ansatz de Bethe (2.32) é dependente. Por este motivo devemos realizar uma expansão de η para valores muito pequenos. Podemos reescrever cada termo do produtório (2.32) da seguinte forma

$$\frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta} = \frac{1 + \eta/(v_j - v_i)}{1 - \eta/(v_j - v_i)}, \quad (2.34)$$

e aplicando-se a expansão para valores muito pequenos de η ,

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{1 - \eta/(v_j - v_i)} = 1 + \frac{\eta}{v_j - v_i} + \left(\frac{\eta}{v_j - v_i} \right)^2 + \left(\frac{\eta}{v_j - v_i} \right)^3 + \dots$$

obtemos

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta} &= \left(1 + \frac{\eta}{v_j - v_i} \right) \left(1 + \frac{\eta}{v_j - v_i} + \left(\frac{\eta}{v_j - v_i} \right)^2 + \dots \right) \\ &= 1 + \frac{2\eta}{v_j - v_i} + \frac{2\eta^2}{(v_j - v_i)^2} + \frac{2\eta^3}{(v_j - v_i)^3} + \dots \end{aligned} \quad (2.35)$$

Substituindo-se essa relação no produtório (2.32) teremos

$$\begin{aligned}
\lim_{\eta \rightarrow 0} \prod_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{v_i - v_j - \eta}{v_i - v_j + \eta} &= \left(1 + \frac{2\eta}{v_1 - v_i} + \dots\right) \left(1 + \frac{2\eta}{v_2 - v_i} + \dots\right) \dots \\
&= 1 + \frac{2\eta}{v_1 - v_i} + \frac{2\eta}{v_2 - v_i} + \frac{2\eta}{v_3 - v_i} + \dots \\
&= 1 + \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2\eta}{v_j - v_i} + \dots, \tag{2.36}
\end{aligned}$$

onde foram desprezados termos de ordem igual ou maior que η^2 . Realizamos o mesmo procedimento para o lado esquerdo da equação (2.32), reescrevendo-a da seguinte forma

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} [1 - \eta(v_i + \zeta(N/2 + 1/2) + \gamma J + \tau)] = \left(1 - \eta v_i - \frac{\eta \mu}{\Omega}\right) \tag{2.37}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\eta \rightarrow 0} \left(\frac{v_i + \eta \kappa}{v_i - \eta \kappa}\right) &= \frac{1 + \eta \kappa / v_i}{1 - \eta \kappa / v_i} \tag{2.38} \\
&= \left(1 + \frac{\eta \kappa}{v_i}\right) \left(1 + \frac{\eta \kappa}{v_i} + \left(\frac{\eta \kappa}{v_i}\right)^2 + \left(\frac{\eta \kappa}{v_i}\right)^3 + \dots\right) \\
&= 1 + \frac{2\eta \kappa}{v_i} + 2 \left(\frac{\eta \kappa}{v_i}\right)^2 + 2 \left(\frac{\eta \kappa}{v_i}\right)^3 + 2 \left(\frac{\eta \kappa}{v_i}\right)^4 + \dots
\end{aligned}$$

onde $\kappa = (J/2 + 1/2)$. Podemos agora igualar os dois lados da equação (2.32), considerando novamente somente a expansão até a primeira ordem em η

$$\begin{aligned}
\left(1 - \eta v_i - \frac{\eta \mu}{\Omega}\right) \left(1 + \frac{\eta}{v_i}(J+1)\right) &= 1 + \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2\eta}{v_j - v_i} \\
1 + \frac{\eta}{v_i}(J+1) - \eta v_i - \frac{\eta \mu}{\Omega} &= 1 + \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2\eta}{v_j - v_i} \\
\frac{(J+1)}{v_i} - v_i - \frac{\mu}{\Omega} &= \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2}{v_j - v_i}. \tag{2.39}
\end{aligned}$$

A equação encontrada acima, para o limite $\eta \rightarrow 0$, é a equação do ansatz de Bethe na forma de somatório para o hamiltoniano simplificado (2.33), que possui várias características físicas relevantes de interesse para a nossa análise.

Podemos utilizar o mesmo processo para encontrar a forma das autoenergias para o hamiltoniano (2.33). Os produtórios presentes em (2.31) podem ser escritos como

$$\begin{aligned}
\lim_{\eta \rightarrow 0} \prod_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{v_i \pm \eta}{v_i} &= \left(1 \pm \frac{\eta}{v_1}\right) \left(1 \pm \frac{\eta}{v_2}\right) \left(1 \pm \frac{\eta}{v_3}\right) \dots \\
&= 1 \pm \frac{\eta}{v_1} \pm \frac{\eta}{v_2} \pm \frac{\eta}{v_3} \pm \frac{\eta}{v_4} \dots \\
&= 1 \pm \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{\eta}{v_i}, \tag{2.40}
\end{aligned}$$

onde novamente foram mantidos apenas os termos até a primeira ordem em η . Reescrevemos agora a autoenergia (2.31) com os limites do produtório para $\eta \rightarrow 0$, e as novas relações para os parâmetros não nulos

$$\begin{aligned}
E(\vec{v}) &= \frac{\Omega}{2\eta}(J+1) \left[\left(1 - \frac{\eta\mu}{\Omega}\right) \left(1 - \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{\eta}{v_i}\right) - \left(1 + \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{\eta}{v_i}\right) \right] \\
&\quad + \frac{\mu}{2}(N+1) \\
&= \frac{\Omega}{2\eta}(J+1) \left[\left(\frac{\eta\mu}{\Omega} - 2\right) \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{\eta}{v_i} - \frac{\eta\mu}{\Omega} \right] + \frac{\mu_c}{2}(N+1) \\
&= \frac{\mu}{2}(N+1) - \frac{\mu}{2}(J+1) + (J+1) \left(\frac{\eta\mu}{2} - \Omega\right) \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{1}{v_i} \\
&= \frac{\mu}{2}(N-J) - \Omega(J+1) \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{1}{v_i}, \tag{2.41}
\end{aligned}$$

onde anula-se o termo dependente de η . Embora acabemos de encontrar a forma da autoenergia para o hamiltoniano (2.33), podemos escrevê-la de uma maneira muito mais compacta utilizando uma propriedade da equação (2.39). Para demonstrarmos esta propriedade realizaremos uma soma de todas as raízes $\{v_i\}$ sobre a mesma. Naturalmente obtemos

$$\sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{(J+1)}{v_i} - \sum_{i=1}^{(N-J)/2} v_i - \frac{\mu}{2\Omega}(N-J) = \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2}{v_j - v_i}. \tag{2.42}$$

Podemos demonstrar que o lado direito da igualdade tem valor nulo devido à

simetria de sua composição

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{(N-J)/2} \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2}{v_j - v_i} &= \begin{array}{cccc} 0 & + & \frac{2}{v_2 - v_1} & + \frac{2}{v_3 - v_1} & + \frac{2}{v_4 - v_1} & + \dots \\ & & \frac{2}{v_1 - v_2} & + & 0 & + \frac{2}{v_3 - v_2} & + \frac{2}{v_4 - v_2} & + \dots \\ & & \frac{2}{v_1 - v_3} & + \frac{2}{v_2 - v_3} & + & 0 & + \frac{2}{v_4 - v_3} & + \dots \\ & & \frac{2}{v_1 - v_4} & + \frac{2}{v_2 - v_4} & + \frac{2}{v_3 - v_4} & + & 0 & + \dots \\ & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots \end{array} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Rearranjando os termos de (2.42) e multiplicando-os por Ω , obtemos

$$\frac{\mu}{2}(N - J) - \Omega(J + 1) \sum_{i=1}^{(N-J)/2} \frac{1}{v_i} = -\Omega \sum_{i=1}^{(N-J)/2} v_i. \quad (2.43)$$

Verifica-se que o lado esquerdo da equação corresponde à forma da autoenergia (2.41), o que significa que ela pode ser escrita como

$$E(\vec{v}) = -\Omega \sum_{i=1}^{(N-J)/2} v_i. \quad (2.44)$$

Desta forma, conseguimos demonstrar a integrabilidade do hamiltoniano (2.1) e ainda obtivemos as formas de somatório para a autoenergia e as EAB do hamiltoniano simplificado (2.33), o qual será novamente estudado nos capítulos 4 e 5 deste trabalho.

Capítulo 3

Análise Clássica

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

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

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

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

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

$$z = \frac{1}{N}(N_a + N_b - 2N_c)$$

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

sendo que z e ϕ são variáveis canonicamente conjugadas; i.e.

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

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

$$H = \lambda z^2 + 2(\alpha - \lambda)z + \lambda - 2\alpha + \beta + \sqrt{2(1-z)(z+c_+)(z+c_-)} \cos\left(\frac{4\phi}{N}\right) \quad (3.1)$$

com

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

sendo $c_{\pm} = 1 \pm 2k$. Como N e k são conservados, os tratamos como constantes. Um procedimento semelhante a este foi adotado em [32, 34] para os modelos de condensados acoplados por tunelamento Josephson e o modelo homo-atômico molecular.

Nós agora consideramos (3.1) como um hamiltoniano clássico e investigamos os pontos fixos do sistema. O primeiro passo é derivar as equações de movimento a partir do hamiltoniano

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

Os pontos fixos do sistema são determinados pela condição

$$\frac{\partial H}{\partial \phi} = \frac{\partial H}{\partial z} = 0. \quad (3.2)$$

Devido à periodicidade das soluções, restringimos nossa análise ao intervalo $\phi \in [0, N\pi/2)$. É necessário tratar os casos $k = 0$ e $k \neq 0$ separadamente. Como mostramos a seguir, e sem perda de generalidade, vamos supor $k \geq 0$.

3.1 Caso I: $k \neq 0$

Para simplificar a notação, vamos definir as funções

$$f(z) = \lambda z + \alpha - \lambda \quad (3.3)$$

$$g(z) = \frac{(z-1)(2z+2) + (z+c_+)(z+c_-)}{2\sqrt{2(1-z)(z+c_+)(z+c_-)}}. \quad (3.4)$$

Note que o domínio de $g(z)$ é $z \in [2k-1, 1]$, e $g(z)$ é divergente em $z = 2k-1$ e $z = 1$. Para $k \neq 0$, nós temos a seguinte classificação para as soluções de (3.2).

- $\phi = 0$, e z é uma solução de

$$f(z) = g(z) \quad (3.5)$$

que pode admitir uma, duas ou três soluções.

- $\phi = N\pi/4$, e z é uma solução de

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

que pode admitir uma, duas ou três soluções.

Uma representação gráfica dos tipos possíveis de solução para $\phi = 0$ é dada na Fig. 3.1. Das equações (3.5,3.6) nós podemos determinar pontos de bifurcação para certas escolhas dos valores dos parâmetros de acoplamento. Estas bifurcações nos permitem dividir o espaço de parâmetros em diferentes regiões. Para construir tal diagrama, observamos que tais bifurcações ocorrem quando f é tangente à $\pm g$; i.e. para valores de λ , α tal que

$$\lambda = \pm \frac{dg}{dz} \Big|_{z_0} \tag{3.7}$$

$$f(z_0) = \pm g(z_0). \tag{3.8}$$

para algum z_0 . Estas condições determinam as regiões no espaço de parâmetros, representado na Fig. 3.2.

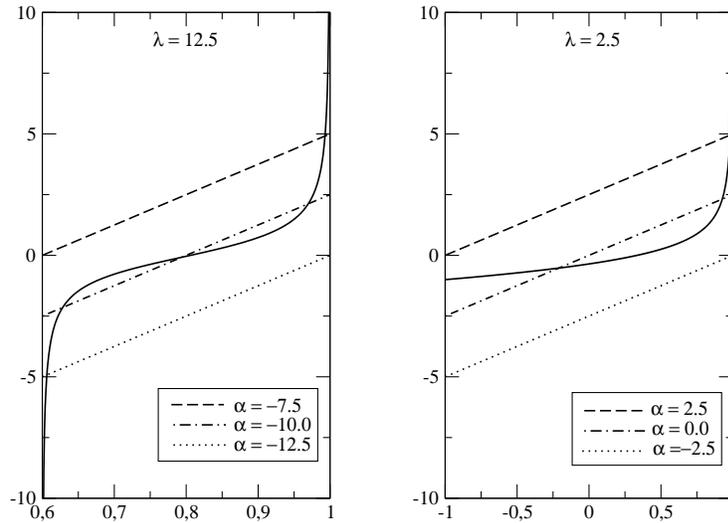


Figura 3.1: No gráfico da esquerda, a solução de (3.5) com $k = 0,8$. Dependendo dos valores de λ e α , haverá uma, duas ou até três soluções. Na direita, o gráfico da solução de (3.10) com $k = 0$. Dependendo dos valores de λ e α , pode haver uma, duas ou nenhuma solução.

3.2 Caso II: $k=0$

Consideremos agora o caso $k = 0$ para o qual a função $g(z)$ possui propriedades bem diferentes do caso anterior. Colocando $c_+ = c_- = 1$ em (3.4), notamos que $g(z)$ reduz a

$$g(z) = \frac{3z - 1}{2\sqrt{2(1 - z)}} \quad (3.9)$$

Aqui nós observamos que $g(z)$ é divergente em $z = 1$, mas finito em $z = -1$. Esta propriedade afeta os tipos de soluções para (3.2). Especificamente, nós temos a seguinte classificação das soluções para $k = 0$

- $\phi = 0$, e z é uma solução de

$$f(z) = g(z) \quad (3.10)$$

a qual pode ter nenhuma, uma ou duas soluções.

- $\phi = N\pi/4$, e z é uma solução de

$$f(z) = -g(z) \quad (3.11)$$

a qual pode ter nenhuma, uma ou duas soluções.

- $z = -1$ e ϕ é solução de

$$\cos\left(\frac{4\phi}{N}\right) = -2\lambda + \alpha \quad (3.12)$$

a qual pode ter nenhuma, uma ou duas soluções.

Um gráfico representando os possíveis tipos de soluções para $\phi = 0$ é dado na Fig. 3.1. Neste caso pelo fato de $g(-1)$ ser finito, pode haver tanto nenhuma, uma ou duas soluções. Como no caso $k \neq 0$, podemos determinar as regiões limítrofes do espaço de parâmetros através das equações (3.7,3.8). Além disso, por causa da existência de soluções da forma dada por (3.12) para $k = 0$, que não possui análoga para $k \neq 0$, temos o surgimento de novas regiões, cujos limites são dados pelas condições $\lambda = (\alpha \pm 1)/2$, para qualquer valor de α . Os limites das regiões no espaço de parâmetros são representados na Fig. 3.3.

Para ajudar a visualizar a dinâmica clássica, é possível graficar as curvas de nível do hamiltoniano (3.1). Como os pontos fixos de bifurcação mudam a topologia das curvas de nível, diferenças qualitativas podem ser observadas

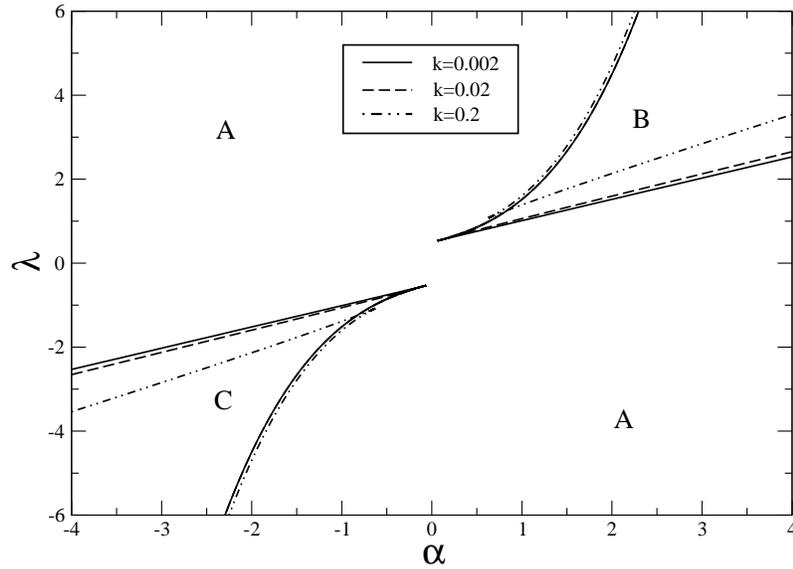


Figura 3.2: Diagrama do espaço de parâmetros mostrando os diferentes tipos de soluções para a equação (3.2), para $k = 0,002; 0,02; 0,2$. Em cada caso o diagrama é dividido em regiões *A* (uma solução para z quando $\phi = 0$ e uma solução quando $\phi = N\pi/4$), *B* (três soluções para z quando $\phi = 0$ e uma solução quando $\phi = N\pi/4$) e *C* (uma solução para z quando $\phi = 0$ e três soluções quando $\phi = N\pi/4$). A fronteira separando as regiões é dada pelas soluções das equações (3.7, 3.8).

entre cada uma das regiões. Os resultados são mostrados na Fig. 3.4 para $k = 0.2$ e Fig. 3.5 para $k = 0$, respectivamente, onde mostramos o intervalo $4\phi/N \in [-2\pi, 2\pi]$ para uma melhor visualização das figuras. Daqui em diante, deteremos nossa atenção no caso onde $\lambda = 0$. Desta forma o modelo possui um único parâmetro efetivo de acoplamento, α . Nas Figs. 3.2, 3.3, pode se ver que neste subespaço não existem bifurcações quando a diferença hetero-atômica é não-nula ($k \neq 0$), com bifurcações ocorrendo em $\alpha = \pm 1$ quando a diferença hetero-atômica é zero ($k = 0$). Para o caso onde a diferença hetero-atômica é não-nula, o mínimo global do hamiltoniano clássico (3.1) ocorre quando $\phi = N\pi/4$ e z é solução única de (3.6). Em particular, para a solução $z \in [2k - 1, 1]$, $dz/d\alpha$ é uma função contínua de α . Quando a diferença hetero-atômica é zero e $\alpha > 1$, o mínimo global do hamiltoniano clássico (3.1) sempre ocorre na fronteira do espaço de parâmetro com $z = -1$, ϕ arbitrário. Em $\alpha = 1$ ocorre uma bifurcação, e para α um pouco menor que 1, surgem dois pontos de sela para $z = -1$ com ϕ dado pela solução de

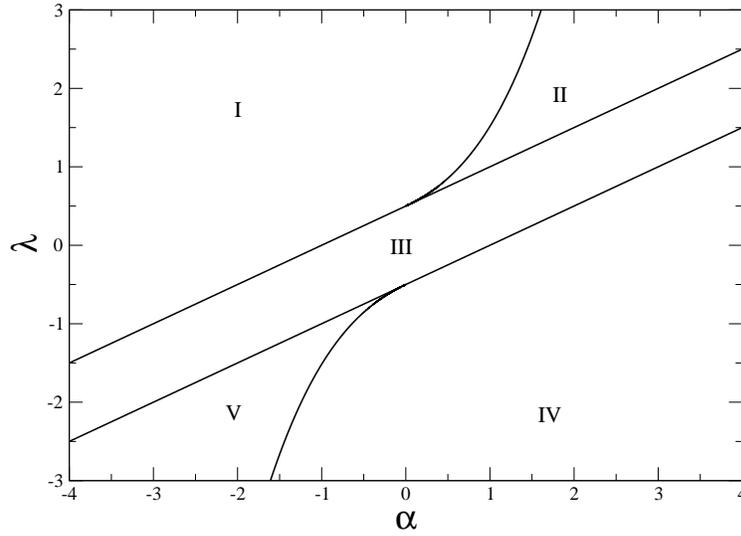


Figura 3.3: Diagrama do espaço de parâmetros mostrando os diferentes tipos de soluções para a equação (3.2), para $k = 0$. Na região I, não há solução para z quando $\phi = 0$, e uma solução para z quando $\phi = N\pi/4$. Na região II, há duas soluções para z quando $\phi = 0$, e uma solução para z quando $\phi = N\pi/4$. Na região III, existe uma solução para z quando $\phi = 0$, uma solução para z quando $\phi = N\pi/4$, e duas soluções para ϕ quando $z = -1$. Na região IV, há uma solução para z quando $\phi = 0$, e nenhuma solução para z quando $\phi = N\pi/4$. Na região V, há uma solução para z quando $\phi = 0$, e duas soluções para z quando $\phi = N\pi/4$. A fronteira separando as regiões II e III é dada por $\lambda = (\alpha + 1)/2$, enquanto a equação $\lambda = (\alpha - 1)/2$ separa as regiões III e IV. As fronteiras entre as regiões I e II e entre as regiões IV e V foram obtidas numericamente.

(3.12) e surge um novo mínimo global correspondendo a $\phi = N\pi/4$ tendo z como única solução de (3.11). Neste caso $dz/d\alpha$ é descontínua em $\alpha = 1$.

No próximo capítulo faremos uma análise quântica do hamiltoniano (2.1). Em particular, mostraremos que o ponto de bifurcação que ocorre em $(\alpha, \lambda) = (1, 0)$, quando a diferença hetero-atômica é nula, afeta as propriedades do estado fundamental do sistema quântico.

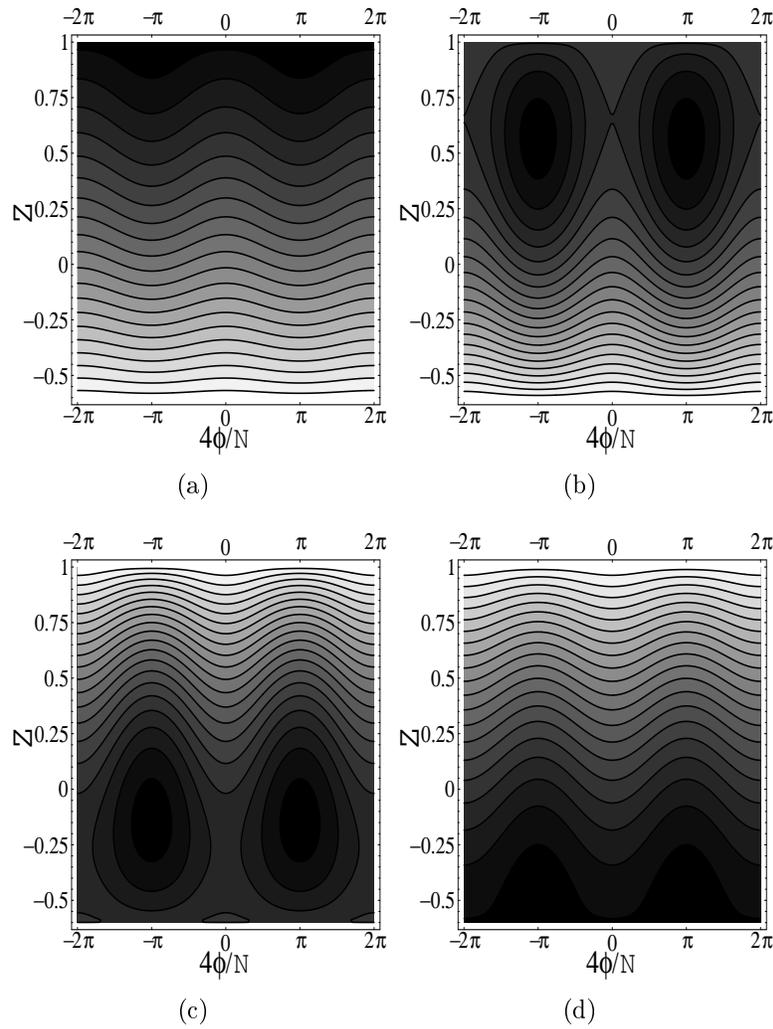


Figura 3.4: Curvas de nível do hamiltoniano (3.1) para $k = 0, 2$, onde as regiões escuras indicam valores menores do que das regiões claras. As figuras (a) e (d) correspondem à região A enquanto as figuras (b) e (c) correspondem à região B. Os valores dos parâmetros são: (a) $\lambda = 10$, $\alpha = -5$; (b) $\lambda = 10$, $\alpha = 4$; (c) $\lambda = 10$, $\alpha = 12$ e (d) $\lambda = 10$, $\alpha = 16$. Na região A, há um ponto de máximo em $\phi = 0$ e um ponto de mínimo em $4\phi/N = \pm\pi$. Dois pontos fixos adicionais, um de sela e um de máximo, ocorrem na região B em $\phi = 0$.

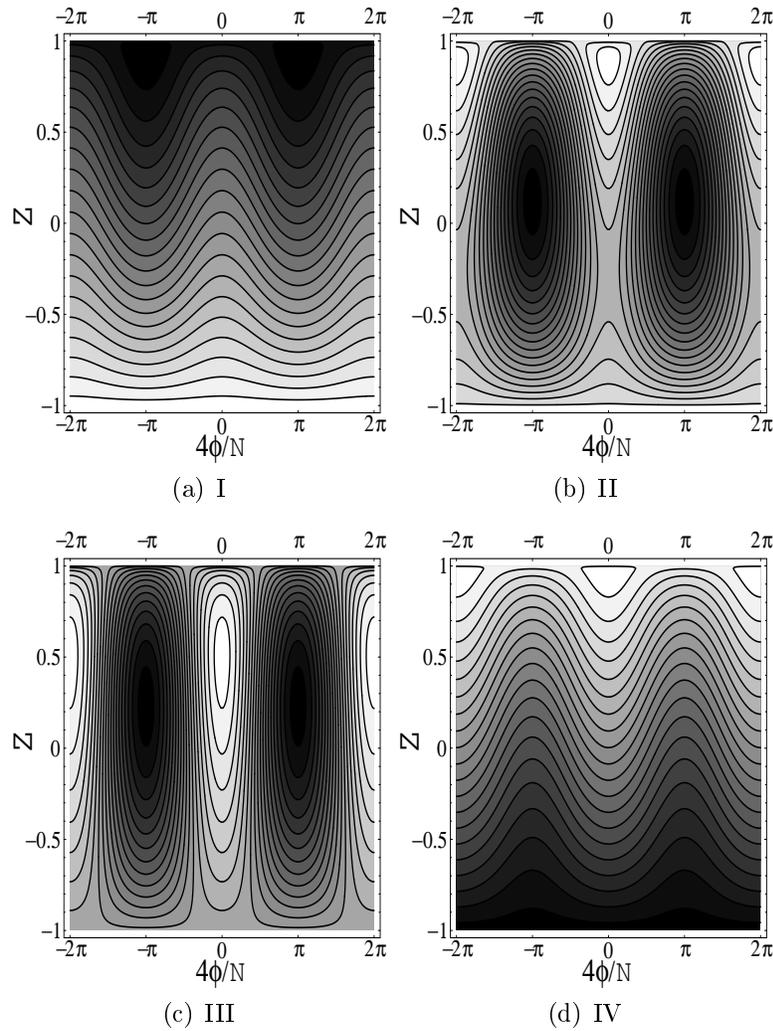


Figura 3.5: Curvas de nível do hamiltoniano (3.1) para $k = 0$, mostrando o comportamento típico das regiões I, II, III e IV. As regiões escuras indicam valores menores do que as regiões claras. Os valores dos parâmetros são $\lambda = 1, 0$, $\alpha = -2, 0$ para I, $\lambda = 2, 0$, $\alpha = 2, 0$ para II, $\lambda = 0, 5$, $\alpha = 0, 5$ para III e $\lambda = 0, 5$, $\alpha = 3, 0$ para IV. Na região I, há mínimos locais para $4\phi/N = \pm\pi$. Além dos mínimos em $4\phi/N = \pm\pi$, dois pontos fixos adicionais (um máximo e um ponto de sela) surgem na região II ocorrendo em $\phi = 0$. Na região III, há mínimos em $4\phi/N = \pm\pi$ e apenas um máximo em $\phi = 0$. Também existem pontos de sela quando $z = -1$. Na região IV, temos apenas um ponto fixo de máximo, que ocorre em $\phi = 0$, o qual sempre possui $z < 1$. Aqui o mínimo global ocorre em $z = -1$.

Capítulo 4

Análise Quântica

Neste capítulo faremos uma análise quântica do modelo. Utilizaremos os dados obtidos na análise clássica, em particular os pontos de bifurcação do sistema, de forma a nos orientar no estudo do comportamento do modelo. Primeiramente vamos derivar uma solução exata do modelo e a partir desta solução, mapearemos o espectro de energia do hamiltoniano (2.1) numa equação de Schrödinger com um potencial efetivo capaz de nos revelar o comportamento do sistema frente as variações dos parâmetros característicos. Logo após, nossa análise se deterá sobre a dinâmica quântica do sistema, comparando diferentes regimes e suas características no processo dinâmico. Com estas abordagens guiadas pela análise clássica concluiremos um apanhado capaz de gerar um maior entendimento do modelo hetero-atômico molecular.

4.1 Mapeamento

Através do método de mapeamento construiremos um potencial efetivo condzente com uma equação de Schrödinger para o modelo. Este potencial será construído a partir do espectro do hamiltoniano (2.1).

Vamos iniciar reescrevendo o hamiltoniano numa forma mais compacta

$$H = U + \Omega(a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger ba) \quad (4.1)$$

onde o operador U é uma função dos operadores número:

$$U = U_{aa}N_a^2 + U_{bb}N_b^2 + U_{cc}N_c^2 + U_{ab}N_aN_b + U_{ac}N_aN_c + U_{bc}N_bN_c \\ + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c$$

Como os operadores N e $k = J/N$ são conservados nós podemos fixá-los, sem nenhuma perda de generalidade, considerando apenas os casos em que $k \geq 0$. Esta condição nos permite restringir o espaço de Hilbert ao subespaço de dimensão $(m + 1)$ gerado pelos vetores

$$|l - j; m - j; j\rangle \quad (4.2)$$

onde definimos

$$l = \frac{N(1+k)}{2} \\ m = \frac{N(1-k)}{2}$$

de tal forma que $l + m = N$. Analisamos então os seguintes autoestados para (2.1)

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^m \rho_j |l - j; m - j; j\rangle \quad (4.3)$$

Como os vetores de base (4.2) são autovetores de cada um dos operadores número, eles também o serão do operador U , sendo assim podemos definir as quantidades \mathcal{U}_j a partir de

$$U|l - j; m - j; j\rangle = \mathcal{U}_j |l - m; m - j; j\rangle. \quad (4.4)$$

A ação do hamiltoniano no estado geral (4.3) é dada por

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle = & \sum_{j=1}^{m-1} \left(\mathcal{U}_j \rho_j + \Omega((j+1)) \rho_{j+1} + \right. \\ & \left. + (l+1-j)(m+1-j) \rho_{j-1} \right) |l - j; m - j; j\rangle \\ & + (\mathcal{U}_0 \rho_0 + \Omega \rho_1) |l; m; 0\rangle \\ & + (\mathcal{U}_m \rho_m + \Omega \rho_{m-1} (l - m + 1)) |l - m; 0; m\rangle \end{aligned} \quad (4.5)$$

Exigindo-se a condição de que (4.3) é um autoestado do hamiltoniano com autoenergia E isto nos leva as seguintes relações de recorrência que devem ser obedecidas pelos coeficientes ρ_j :

$$\Omega \rho_1 + \mathcal{U}_0 \rho_0 = E \rho_0 \quad (4.6)$$

$$\Omega((j+1) \rho_{j+1} + (l+1-j)(m+1-j) \rho_j - 1) + \mathcal{U}_j \rho_j = E \rho_j \quad (4.7)$$

$$\mathcal{U}_m \rho_m + \Omega(l - m + 1) \rho_{m-1} = E \rho_m \quad (4.8)$$

onde $1 < j < m - 1$ na relação (4.7). A normalização do estado (4.3) é arbitrária e por este motivo podemos escolher $\rho_0 = 1$. A relação de recorrência (4.7) nos mostra que ρ_j é um polinômio de ordem j em E . Desta forma a restrição (4.8) é um polinômio em E de ordem $(m + 1)$, cujas as raízes são as autoenergias de (2.1). Como o número de raízes é igual ao número da dimensão do espaço de vetores (4.2), todos os autovalores de energia são dados pelas raízes de (4.8).

Com esta forma implícita para os autovalores de energia podemos mapear o espectro do hamiltoniano (4.1) no espectro de uma equação de Schrödinger unidimensional com potencial efetivo. Começamos mapeando os autoestados de energia em soluções polinomiais para uma particular equação diferencial ordinária de segunda ordem (EDO) e então utilizamos uma troca de variáveis de tal maneira que esta equação diferencial ordinária tome a forma da equação de Schrödinger. Cada autoestado do sistema (4.3) pode ser representado por um polinômio de ordem m com coeficientes ρ_j ($j = 1, 2, \dots, m$). Para uma particular energia, podemos então construir uma EDO para $G(v)$ tal que os coeficientes polinomiais obedeam às relações de recorrência (4.6,4.7,4.8).

Consideremos uma EDO geral de segunda ordem que é satisfeita por $G(v)$, um polinômio de ordem m .

$$a(v)G'' + b(v)G' + c(v)G = EG \quad (4.9)$$

Primeiro nós escrevemos o polinômio $G(v)$ com as raízes $\{v_j\}_{j=1}^m$ na forma fatorada

$$G(v) = \prod_{j=1}^m (v - v_j)$$

tal que

$$G'(v) = \sum_{p=1}^m \prod_{i \neq j} (v - v_i),$$

$$G''(v) = \sum_{p=1}^m \sum_{i \neq j} \prod_{\substack{r \neq p \\ r \neq q}}^m (v - v_r).$$

Resolvendo a equação (4.9) para uma particular raiz u_q obtemos as equações do ansatz de Bethe.

$$\frac{b(v_i)}{a(v_i)} = \sum_{j \neq i}^m \frac{2}{v_j - v_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (4.10)$$

Desta forma as raízes do polinômio devem satisfazer a equação (4.10) se $G(u)$ é solução para (4.9).

Nosso objetivo agora é realizar o mapeamento das soluções de (4.9) com autoenergia E em soluções da equação de Schrödinger¹

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.11)$$

¹Por praticidade escolhemos $m = 1$ e $\hbar = 1$.

com os mesmos autovalores, através do mapeamento das soluções polinomiais de (4.9) em funções de onda que satisfaçam (4.11) na forma

$$\psi(x) = e^{f(x)}G(v(x)).$$

Substituindo a expressão acima na equação de Schrödinger resultam as seguintes relações a serem satisfeitas

$$a(v) = -\left(\frac{dv}{dx}\right)^2 \quad (4.12)$$

$$b(v) = -\frac{d^2v}{dx^2} - 2\frac{dv}{dx}\frac{df}{dx} \quad (4.13)$$

$$c(v) = V(x) - \frac{d^2f}{dx^2} - \left(\frac{df}{dx}\right)^2 \quad (4.14)$$

Satisfazendo estas relações podemos definir a forma do potencial, e para tanto precisamos identificar quais são estes parâmetros no hamiltoniano (2.1). Para simplificarmos a notação definiremos

$$\mathcal{U}_j = A(m-j)(m-j-1) + B(m-j) + C$$

onde

$$\begin{aligned} A &= U_{aa} + U_{bb} + U_{cc} + U_{ab} - U_{ac} - U_{bc} \\ B &= (1 + 2l - 2m)U_{aa} + U_{bb} + (1 - 2m)U_{cc} + (1 + l - m)U_{ab} \\ &\quad + (2m - l - 1)U_{ac} + (m - 1)U_{bc} + \mu_a + \mu_b - \mu_c \\ C &= (l - m)^2U_{aa} + m(l - m)U_{ac} + m^2U_{cc} + (m - l)\mu_a + m\mu_c \end{aligned}$$

O polinômio $G(v)$ pode ser reescrito da seguinte forma

$$G(v) = \sum_{l=0}^m \rho_l v^{m-l} \quad (4.15)$$

sendo que ρ_j deve satisfazer as relações (4.6,4.7,4.8), estas relações condensam as informações contidas no hamiltoniano (2.1). Desta forma multiplicando (4.7) por v e somando sobre todos os l 's possíveis podemos fazer uma correlação com o polinômio $G(v)$ e suas derivadas, e desta forma obter uma equação do tipo (4.9). Realizando estas operações obtemos a seguinte equação

$$(Av^2 + \Omega v)G''' + (Bv + \Omega(l - m + 1 - v^2))G' + (\Omega m v + C)G = EG \quad (4.16)$$

As raízes de $G(v)$ são soluções das equações do Ansatz de Bethe

$$\frac{\Omega(l - m + 1 - v_i^2) + Bv_i}{v_i(\Omega + Av_i)} = \sum_{j \neq i}^m \frac{2}{v_j - v_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (4.17)$$

Podemos também derivar a expressão para os autovalores de energia do modelo em termos das raízes u_q . Considerando as expansões de $G(u)$ e suas derivadas

$$\begin{aligned} G(v) &= v^m - v^{m-1} \sum_{i=1}^m v_i + \dots \\ G'(v) &= mv^{m-1} - (m-1)v^{m-2} \sum_{i=1}^m v_i + \dots \\ G''(v) &= m(m-1)v^{m-2} - (m-1)(m-2)v^{m-3} \sum_{i=1}^m v_i + \dots \end{aligned}$$

Substituímos estas três expressões em (4.16) e igualamos os termos de ordem m para chegar a seguinte expressão para os autovalores de energia do sistema

$$E = Am(m-1) + Bm + C - \Omega \sum_{i=1}^m v_i \quad (4.18)$$

Agora possuímos todos os elementos necessários para realizarmos a identificação dos parâmetros de (4.9). Fazendo então a comparação de (4.9) com (4.16) e obtemos

$$\begin{aligned} a(v) &= Av^2 + \Omega u \\ b(v) &= (l - m + 1 - v^2)\Omega + Bv \\ c(v) &= mv\Omega + C \end{aligned}$$

Utilizando as relações (4.12,4.13,4.14) podemos realizar o mapeamento da equação de Schrödinger escolhendo

$$\frac{dv}{dx} = \pm \sqrt{-Av^2 - \Omega v}$$

Integrando a expressão acima (com uma escolha conveniente da constante de integração) resulta em

$$v = \frac{\Omega}{2A} (\cos(\sqrt{A}x) - 1) \quad (4.19)$$

Desta forma encontramos

$$\begin{aligned} \frac{df}{dx} &= \frac{\Omega^2}{4A^{\frac{3}{2}}} \sin(\sqrt{A}x) + \left(\sqrt{A}(l - m + 1) - \frac{B}{2\sqrt{A}} - \frac{\Omega^2}{2A^{3/2}} \right) \csc(\sqrt{A}x) \\ &\quad + \left(\frac{-\sqrt{A}}{2} + \frac{\Omega^2}{2A^{3/2}} + \frac{B}{2\sqrt{A}} \right) \cot(\sqrt{A}x) \end{aligned}$$

A função de onda toma a seguinte forma

$$\Psi(x) = \exp(f(x)) \prod_{i=1}^m \left(\frac{\Omega}{2A} (\cos(\sqrt{A}x) - 1) - v_i \right) \quad (4.20)$$

satisfazendo a equação de Schrödinger (4.11) com potencial

$$\begin{aligned} V(x) &= mu\Omega + C + \frac{d^2 f}{dx^2} + \left(\frac{df}{dx} \right)^2 \\ &= \left(C + \frac{\Omega^2}{2A} (l - 2m + 2) - \frac{\Omega^4}{2A^3} - \frac{A}{4} + B \left(\frac{1}{2} - \frac{3\Omega^2}{4A^2} - \frac{B}{4A} \right) \right) \\ &\quad + \frac{\Omega^4}{16A^3} \sin^2(\sqrt{A}x) + \frac{\Omega^2}{2A} \left(m + \frac{\Omega^2}{2A^2} + \frac{B}{2A} \right) \cos(\sqrt{A}x) \\ &\quad + \left(\frac{3A}{4} + A(l - m + 1)^2 + \frac{\Omega^2}{A} (l - m + 1) + \frac{\Omega^4}{2A^3} - \frac{\Omega^2}{A} \right. \\ &\quad \quad \left. + B \left(\frac{B}{2A} + \frac{\Omega^2}{A^2} - 1 \right) \right) \times \csc^2(\sqrt{A}x) \\ &\quad + \left(\left(\frac{\Omega^2}{A} + B \right) (l - m + 2) - 2A(l - m + 1) - \frac{\Omega^4}{2A^3} \right. \\ &\quad \quad \left. - B \left(\frac{B}{2A} + \frac{\Omega^2}{A^2} \right) \right) \times \cot(\sqrt{A}x) \csc(\sqrt{A}x). \end{aligned}$$

O conceito de mapear o espectro de sistemas de vários corpos em uma equação de Schrödinger unidimensional é discutido em detalhes em [53].

4.1.1 Análise no limite sem espalhamento

Agora nós realizaremos uma análise mais profunda do hamiltoniano (4.1) no limite sem espalhamento, isto é, quando $U_{ij} = 0$ para todos $j, k = a, b, c$. Neste limite conseguimos simplificar consideravelmente o modelo, mantendo ainda as principais características que possibilitam obter uma compreensão do comportamento do modelo sob mapeamento na equação de Schrödinger. Especificamente, o limite sem espalhamento corresponde a escolha particular de $\lambda = 0$ na análise clássica. Com referência à Fig 3.3 podemos notar que para o caso de $\lambda = 0$ temos dois pontos de fronteira no caso de diferença hetero-atômica nula, ou seja, $k = 0$. Um dos pontos ocorre em $(\alpha, \lambda) = (1, 0)$, identificando a bifurcação de um mínimo global do hamiltoniano, enquanto o outro ponto ocorre em $(\alpha, \lambda) = (-1, 0)$, identificando a bifurcação de um máximo global. Por outro lado, não há bifurcações ao longo da linha $\lambda = 0$ na Fig 3.2 que ilustra a situação em que $k \neq 0$. Assim, nós concentraremos

nossa atenção no ponto $(\alpha, \lambda) = (1, 0)$ como bifurcação no hamiltoniano que está associado, ao estado fundamental do sistema quântico.

Para aplicarmos o limite sem espalhamento utilizaremos valores muito pequenos de A , de forma a usar expansões em série para as funções trigonométricas no potencial $V(x)$ e na função de onda $\Psi(x)$. Então, tomando o limite $A \rightarrow 0$ (correspondendo a $\lambda = 0$ no análogo clássico) o potencial fica

$$V(x) = C - \frac{B}{2}(N+1) + \left(J^2 - \frac{1}{4}\right)x^{-2} + \left(\frac{B^2}{16} - \frac{\Omega^2}{8}(N+2)\right)x^2 + \frac{\Omega^2 B}{32}x^4 + \frac{\Omega^4}{256}x^6 \quad (4.21)$$

onde agora parametrizamos o sistema em termos das variáveis $J = l - m$ e $N = l + m$. Consideraremos uma subclasse do hamiltoniano geral (2.1)

$$H = \mu N_c + \Omega(a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger ba) \quad (2.33)$$

Na seção anterior, nós mapeamos o modelo geral numa equação de Schrödinger. O caso particular (2.33) corresponde a escolher os parâmetros $B = -\mu$ e $C = m\mu$ na equação (4.21). Assim, os autovalores de energia são mapeados nas soluções para equação de Schrödinger com o seguinte potencial

$$V(x) = \frac{\mu(N+1)}{2} + \left(J^2 - \frac{1}{4}\right)x^{-2} + \frac{1}{16}(\mu^2 - 2\Omega^2(N+2))x^2 - \frac{\mu\Omega^2}{32}x^4 + \frac{\Omega^4}{256} \quad (4.22)$$

A função de onda associada é dada por

$$\Psi(x) = x^{(J+1/2)} \exp\left(\frac{-\Omega^2 x^4}{64} + \frac{\mu x^2}{8}\right) \prod_{i=1}^m \left(\frac{-\Omega x^2}{4} - v_i\right) \quad (4.23)$$

com autovalores de energia

$$E = -\Omega \sum_{i=1}^{(N-J)/2} v_i \quad (2.44)$$

onde $\{u_q\}$ são soluções para as equações do ansatz de Bethe

$$\frac{(J+1)}{v_i} - v_i - \frac{\mu}{\Omega} = \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2}{v_j - v_i}, \quad i = 1, 2, \dots, (N-J)/2. \quad (2.39)$$

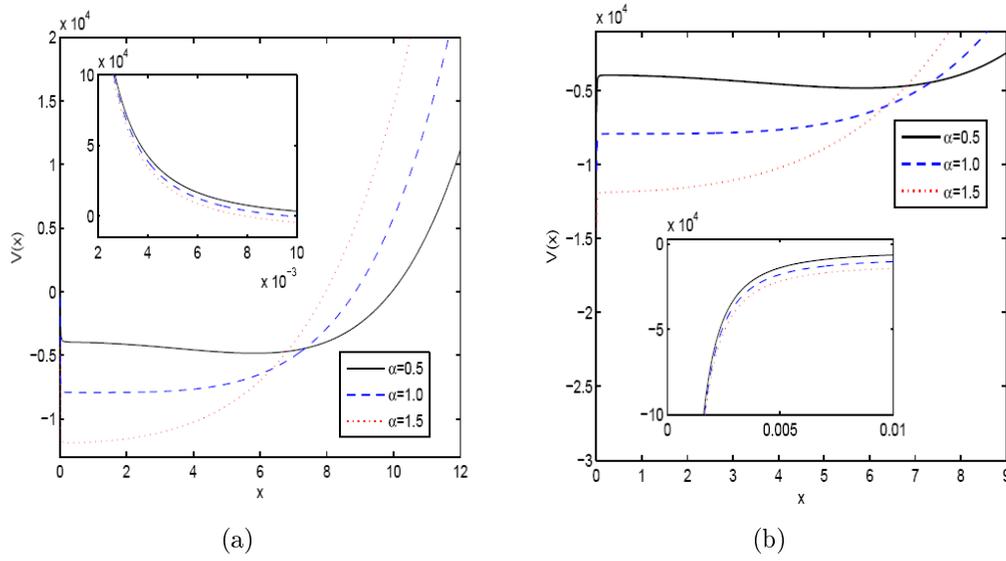


Figura 4.1: Potencial $V(x)$ dado por (4.22). (a) $N = 501$ e $J = 1$. O potencial é limitado inferiormente, com o gráfico em detalhe mostrando $V \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow 0$. Variando o parâmetro α através do valor crítico $\alpha = 1$, não há bifurcação do mínimo do potencial. (b) $N = 500$ e $J = 0$. O potencial não é limitado inferiormente, sendo mostrado no quadro em detalhe que $V \rightarrow -\infty$ quando $x \rightarrow 0$.

Como podemos notar estas são as mesmas equações obtidas a partir da forma de produtório da autoenergia (2.31) e as EAB (2.32) no capítulo 2.

A análise clássica feita no capítulo 3 prediz um ponto crítico em $\alpha = 1$ quando a diferença hetero-atômica é nula e no caso em consideração ($\lambda = 0$) este ponto crítico é dado por $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N})$. Quando a diferença hetero-atômica é não-nula não há previsão de ponto crítico quando $\lambda = 0$ pela análise clássica efetuada. A Fig. 4.1(a) ilustra o potencial (4.22) para $N = 501$, $J = 1$ e vários valores de α próximos ao valor crítico de $\alpha = 1$. Pode-se notar que o potencial possui um único mínimo para todos os α 's. Por outro lado, a Fig. 4.1(b) mostra o potencial (4.22) para $N = 500$ e $J = 0$. Para este caso o potencial não é limitado em sua parte inferior e há uma bifurcação para $\alpha \approx 1$. Assim, para o modelo simplificado (2.33), as previsões sobre um ponto crítico em $\alpha \approx 1$ na análise clássica são consistentes com as diferenças qualitativas encontradas no potencial associado à equação de Schrödinger.

4.2 Dinâmica Quântica

Nesta seção examinaremos o comportamento da dinâmica quântica. Estudando o comportamento do sistema e visualizando o processo de interconversão molecular podemos observar mudanças no mesmo, desta forma identificando a transição de fase quântica do sistema. Basicamente, faremos esta análise comparando a dinâmica do sistema em diferentes regiões do espaço de fase de parâmetros, atravessando as regiões limítrofes onde se encontram as transições de fase quânticas. Se nós olharmos para a dinâmica quântica exatamente nestes pontos críticos, diferenças qualitativas se tornam mais aparentes.

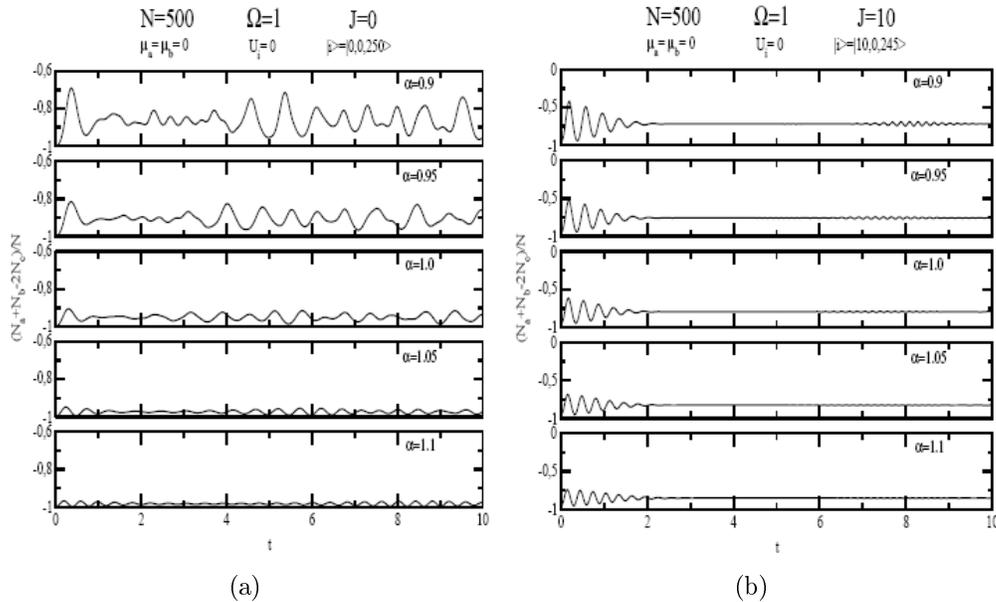


Figura 4.2: Evolução temporal do valor esperado de z para o hamiltoniano (2.33) com $N = 500$. Os casos mostrados são, de cima para baixo, $\alpha = 0.0, 0.95, 1, 1.05, 1, 1$. (a) $J = 0$ e estado inicial $|0; 0; 250\rangle$. As oscilações são bastante irregulares e diminuem sensivelmente assim que atravessado o ponto crítico $\alpha = 1$. Este ponto corresponde à fronteira $(\alpha, \lambda) = (1, 0)$ entre as regiões *III* e *IV* como mostrado na Fig. 3.3. (b) $J = 10$ com valor inicial $|10; 0; 245\rangle$. As oscilações exibem comportamento de colapsos e ressurgimentos havendo uma pequena diminuição de amplitude com a passagem pelo ponto crítico $\alpha = 1$, indicando o fato de não haver fronteira em $(\alpha, \lambda) = (1, 0)$ na Fig. 3.2.

Em geral a evolução temporal de um estado qualquer é dada por $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\phi\rangle$, onde $U(t)$ é o operador evolução temporal

$$U(t) = \sum_{j=0} |j\rangle\langle j| \exp(-iE_j t)$$

$|j\rangle$ é um autoestado com energia E_j e $|\phi\rangle$ representa o estado inicial com $N = N_a + N_b + 2N_c$. Adotamos o método de diagonalização direta do hamiltoniano (2.33) como feito em [34], e computamos o valor esperado de $z(t)$ como

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

Para um valor de J fixo, nós usaremos como estado inicial $|J; 0; (N - J)/2\rangle$. Quando $J = 0$ este estado corresponde a $z = -1$ no espaço de fase, o qual é um ponto fixo para $\alpha > 1$. Sendo assim esperamos neste caso que $z(t)$ não varie significativamente no tempo. Já quando $J \neq 0$ o estado $|J; 0; (N - J)/2\rangle$ não corresponde a um ponto fixo. Então comparamos a dinâmica quântica dos dois casos, um com $J = 0$ e outro com $J \neq 0$, na fronteira de $\alpha = 1$. Fixamos o parâmetro $\Omega = 1$ e usamos μ como a variável de acoplamento.

Os resultados do valor esperado para z são mostrados na Fig. 4.2 para os casos de diferença hetero-atômica igual e diferente de zero. A diferença qualitativa é relativamente aparente. No caso de $J = 0$ ($k = 0$), Fig. 4.2(a), notamos que para $\alpha < 1$ existem oscilações irregulares em z . Por comparação das dinâmicas na Fig. 4.2(b) para $J \neq 0$ ($k = 0,02$) aparece colapso e ressurgimento das oscilações. A medida que o valor do parâmetro α é aumentado passando pela fronteira no valor $\alpha = 1$, a transição para oscilações mais localizadas é mais acentuada no caso (a) comparado ao caso (b). Importante frisar que as escalas verticais são distintas nos casos (a) e (b). Salientamos também que a natureza da dinâmica para $\alpha > 1$ muda de forma contínua de localizada para dispersa dentro dos valores intermediários $0 < k < 0,02$ (não mostrado).

Capítulo 5

Transições de Fase Quânticas

Neste capítulo teremos como objetivo principal estudar o hamiltoniano (2.1) do ponto de vista das Transições de fase quânticas (TFQ), utilizando várias ferramentas matemáticas para sua caracterização. É importante salientar que TFQ têm sido alvo de renovado interesse de estudo devido aos recentes experimentos realizados em cupratos supercondutores, materiais de férmions pesados, condutores orgânicos e outros compostos relacionados [54]. Embora as TFQ sejam estudadas desde a década de 70 em modelos de spin, como o modelo de Ising com campo transversal, e grande parte do progresso teórico da área deve-se ao estudo do mesmo, um renovado interesse tem surgido a partir do modelo de Anderson para elétrons não interagentes, onde a transição ocorre devido a localização de estados eletrônicos na presença de um potencial randômico. Os primeiros resultados obtidos, constituíram as bases para a compreensão do comportamento de sistemas quânticos próximos do ponto crítico. Embora existam muitas questões em aberto e fortes interações eletrônicas desempenhem papel fundamental ainda não compreendido nessas transições, as TFQ abriram uma nova perspectiva na Física.

Transições de fase quânticas diferem fundamentalmente das transições de fase clássicas por estarem desvinculadas à mudança de temperatura, conceito este que se opõe a noção intuitiva de mudança de fase. Na verdade estas transições ocorrem na temperatura de zero absoluto devido a flutuações quânticas do estado fundamental quando variamos um parâmetro externo [54, 55, 56]. Embora as TFQ sejam rigorosamente definidas apenas no limite termodinâmico, as análises feitas em sistemas finitos, indicariam mais precisamente, pontos de *pré-transição de fase quântica*. Mas para efeitos de simplificação utilizaremos a nomenclatura TFQ para estes pontos de pré-transição.

Existem diferentes técnicas para se identificar as TFQ e em particular os valores críticos dos parâmetros para os quais estas transições ocorrem. Uma forma bastante usual 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 [54]. Outro conceito importante que também pode ser empregado na identificação das TFQ é a fidelidade, que teve seu desenvolvimento originado na teoria da Computação Quântica. Basicamente, a fidelidade consiste num produto interno de estados muito próximos e o valor do parâmetro para o qual a fidelidade tende a se anular define um valor crítico para o mesmo, assinalando uma TFQ [57, 58]. Também utilizaremos a entropia de von Neumann [59] que quantifica o nível de emaranhamento entre dois conjuntos complementares do sistema, assinalando o ponto crítico quando esta sofre uma mudança abrupta ou atinge um valor extremo. E por último, analisaremos o comportamento das raízes das equações do ansatz de Bethe (2.39) para obtermos indicações do ponto crítico do sistema. Tal

estudo será feito observando-se possíveis mudanças qualitativas no conjunto das raízes para o estado fundamental. Finalmente, a interpretação física da TFQ será feita utilizando o valor esperado do estado fundamental do número de moléculas do condensado.

A maior parte das discussões feitas neste capítulo será para o caso particular do hamiltoniano hetero-atômico molecular sem espalhamento (2.33) que, apesar de mais simples, ainda permanece suficientemente interessante do ponto de vista físico [49, 50]. Neste caso, o parâmetro λ , da análise clássica feita no capítulo 3, tem o valor $\lambda = 0$, e fica-se apenas com um parâmetro livre, α . Analisando os diagramas de parâmetros Figs. 3.2 e 3.3 em $\lambda = 0$, temos que para $k \neq 0$ não existem pontos fixos e para $k = 0$, existem dois pontos de bifurcação: $\alpha = 1$, associado ao mínimo do hamiltoniano e $\alpha = -1$, associado ao máximo do hamiltoniano. Vamos mostrar no que segue que o ponto fixo $\alpha = 1$ irá corresponder a um ponto crítico de TFQ.

5.1 Gap de Energia

Uma forma 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 o estado fundamental do hamiltoniano, isto é

$$\Delta E = E^{(1)} - E^{(0)}. \quad (5.1)$$

Uma transição de fase quântica ocorre quando o gap de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental se anula no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$ [54].

Os níveis de energia do hamiltoniano (2.1) variam continuamente à medida que variamos os parâmetros do mesmo. Assim utilizaremos como parâmetro a ser variado μ_c , trabalhando com o hamiltoniano (2.33), o valor deste parâmetro para o qual o gap de energia se anula no limite termodinâmico é o valor crítico. A Fig. 5.1 mostra o gap de energia para diferentes valores de N em função do parâmetro $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N})$, onde observamos que o ponto crítico do sistema se encontra em $\alpha \approx 1$ onde há convergência do mínimo para diferentes valores de N . No ponto crítico do sistema, onde o gap de energia assume o menor valor, à medida que N aumenta este mínimo se aproxima de zero, ou seja $\Delta E \approx 0$, levando desta forma a inferirmos que ocorrerá uma transição de fase quântica quando $N \rightarrow \infty$.

Ainda na Fig. 5.1 notamos que os cenários distintos relacionados à diferença hetero-atômica se confirmam a partir do fato que mesmo para diferentes valores de N , podemos notar em todos eles uma clara diferença no valor

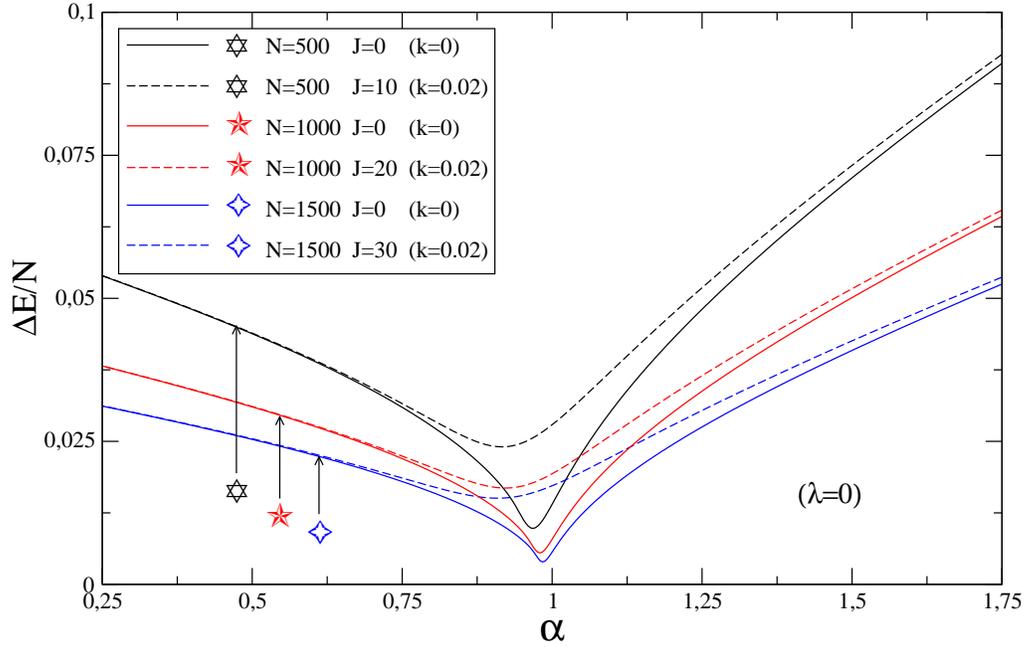


Figura 5.1: Valor do gap de energia calculado para o hamiltoniano (2.33) em função do parâmetro $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N})$ para diferentes quantidades de N com $\lambda = 0$. Para todos os valores de N foram comparadas situações com $k = 0$ e $k = 0.02$

mínimo do gap de energia entre $k = 0$ e $k \neq 0$. Para todos os casos de diferença hetero-atômica não-nula, usamos o valor $k = 0.02$, que mesmo sendo pequeno, demonstra diferença marcante com um mínimo menos pronunciado em relação ao mínimo do caso de diferença hetero-atômica nula.

5.2 Fidelidade

Um modo de se caracterizar transições de fase quânticas é utilizando uma ferramenta oriunda da teoria da Computação Quântica, chamada *Fidelidade* [60]. A fidelidade \mathcal{F} é definida como o módulo do produto escalar entre dois estados quânticos, cujo valor informa o quanto estes estados são “distinguíveis” entre si. Se dois estados pertencem a fases diferentes, então estes estados devem ser distinguíveis, assinalando a passagem por um ponto crítico. A fidelidade¹ varia desde 1 para estados completamente indistinguíveis até 0 para estados totalmente distinguíveis. Para sistemas que exibem uma

¹Rigorosamente, para sistemas finitos, o ponto onde a fidelidade apresenta um mínimo é identificado como um ponto de “pré-transição de fase quântica”[61, 57]

transição de fase quântica no limite termodinâmico o ponto onde a fidelidade vai a zero define um ponto crítico.

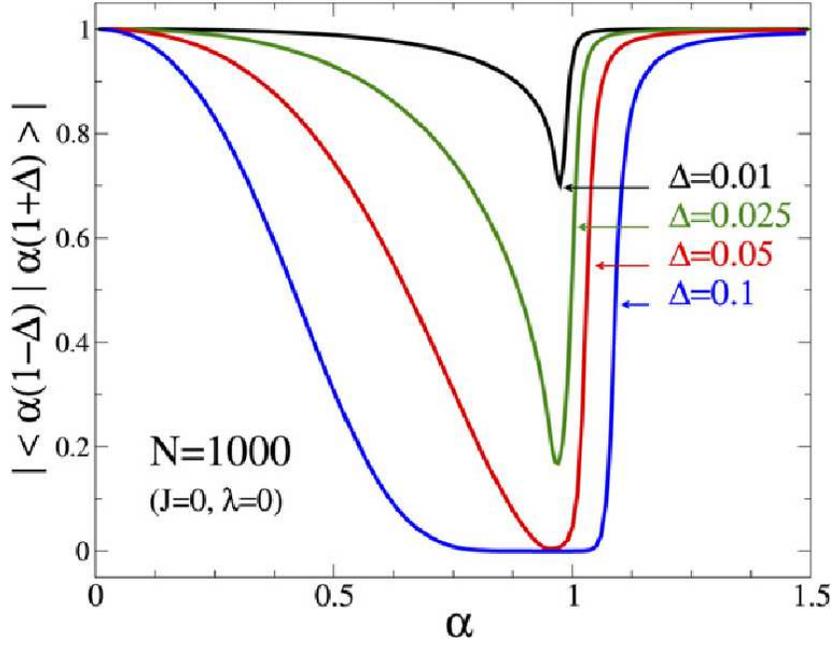


Figura 5.2: Fidelidade do estado fundamental do hamiltoniano (2.33) com $N = 1000$ e vários valores de Δ . O valor do mínimo local em $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N}) \approx 1$ é uma função decrescente de Δ , assintoticamente aproximando-se de zero.

Definiremos formalmente a fidelidade em termos dos estados fundamentais do sistema (2.33). Consideremos $H(\delta)$ como sendo um hamiltoniano genérico dependendo do parâmetro de acoplamento δ . Supondo que o estado fundamental do sistema não é degenerado, denotamos $|\psi(\delta)\rangle$ como o estado fundamental normalizado. Para um pequeno valor fixo Δ , definimos a fidelidade \mathcal{F} por

$$\mathcal{F}_\Delta(\delta) = |\langle \Psi(\delta(1-\Delta)) | \Psi(\delta(1+\Delta)) \rangle| \quad (5.2)$$

que é simétrica em Δ , limitada entre 0 e 1, e satisfaz $\mathcal{F}_0(\delta) = 1$. Genericamente, \mathcal{F}_Δ é uma função decrescente de Δ . A Fig. 5.2 mostra o comportamento da fidelidade para o hamiltoniano (2.33) com $N = 1000$, e diferentes valores de Δ . Fica claro a existência de uma queda no valor da fidelidade quando esta se aproxima do valor crítico $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N}) \approx 1$. Os diferentes valores de Δ alteram a magnitude do mínimo, que pode ser arbitrariamente

pequeno. Como exemplo na Fig. 5.2 quando $\Delta = 0,05$, os auto-estados são essencialmente ortogonais, entretanto o valor de α onde o mínimo ocorre é totalmente independente de Δ . Desta forma dizemos que, para um dado Δ existe uma transição de fase quântica em δ_c se $\mathcal{F}_\Delta(\delta)$, tratado como uma função de única variável δ , possui um mínimo local em δ_c .

Realizamos várias análises de fidelidade para diferentes casos, incluindo situações com diferença hetero-atômica igual a zero e diferente de zero. A Fig. 5.3(a) mostra o comportamento da fidelidade $\mathcal{F}_\Delta(\alpha)$ com $\lambda = 0$, $\Delta = 0,01$ e variando N para os casos $k = 0$ e $k = 0,02$. É fácil notar que o mínimo valor de $\mathcal{F}_\Delta(\alpha)$, o qual determina a transição de fase quântica, ocorre em torno de $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N}) \approx 1$. Para todas as situações o valor do mínimo decresce com o aumento de N .

A Fig. 5.3(b) mostra resultados similares para $N = 1000$ e variando λ , nesta situação podemos acompanhar a ocorrência dos mínimos que determinam a transição de fase quântica concordam muito bem com a relação prevista classicamente no capítulo 3 que descreve as fronteiras no diagrama de parâmetros $\lambda = (\alpha - 1)/2$. Nos casos estudados o mínimo para a fidelidade é muito mais pronunciado quando a diferença hetero-atômica é nula.

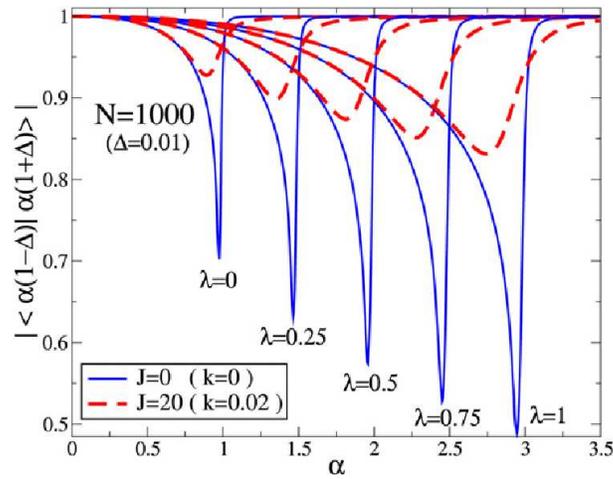
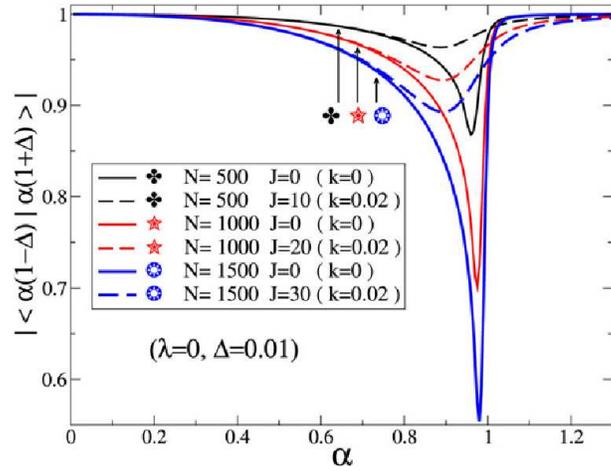


Figura 5.3: (a) Fidelidade do estado fundamental do hamiltoniano (2.33), para $N = 500, 1000, 1500$. As linhas cheias correspondem aos casos em que a diferença hetero-atômica é nula, enquanto as linhas tracejadas ilustram o comportamento para $k = 0.02$. Duas propriedades gerais de transição que podem ser observadas em $\alpha \approx 1$ são (i) o valor do mínimo decresce com o aumento de N ; (ii) para N fixo, o valor do mínimo é bem menor para $k = 0$ comparado a $k \neq 0$. (b) Fidelidade do estado fundamental do hamiltoniano (2.33) para $N = 1000$ e diferentes valores de λ . As linhas cheias correspondem aos casos de $J = 0$, enquanto as linhas tracejadas mostram o comportamento para $k = 0.02$. As localizações dos mínimos se encaixam com a linha de fronteira dada por $\lambda = (\alpha - 1)/2$ como previsto pela análise clássica.

5.3 Emaranhamento

Uma das mais intrigantes características da mecânica quântica, batizada por Einstein como "fantasmagórica" ação à distância, e ilustrada no efeito EPR (Einstein-Podolsky-Rosen) [62], é o efeito chamado emaranhamento. O emaranhamento é uma propriedade física apresentado por um estado quântico de um sistema constituído por dois ou mais subsistemas, sendo estes caracterizados por fortes correlações não-locais. Esta forte correlação faz com que a descrição do subsistema não possa ser feita de forma completa sem a descrição de todo o sistema. Seguindo o trabalho de *G. Milburn et al* [63], se considerarmos dois sistemas A e B, com espaços de Hilbert H_A e H_B , o produto tensorial $H_A \otimes H_B$ destes espaços representa o espaço do sistema composto, onde os estados quânticos $|\phi\rangle_A$ e $|\phi\rangle_B$, respectivamente dos sistemas A e B, geram o seguinte estado do sistema composto

$$|\Psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B. \quad (5.3)$$

Estados que podem ser descritos dessa maneira são chamados de *estados separados* ou *estados produto*, mas esta não é a forma mais geral com que podemos descrever um sistema composto. Se definirmos as bases $|i\rangle_A$ para o espaço H_A e $|j\rangle_B$ para o espaço H_B podemos descrever o estado mais geral para o sistema composto como sendo

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i,j} c_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B. \quad (5.4)$$

Teremos um estado produto se pudermos escrever $c_{ij} = c_i^A c_j^B$, mas se em caso contrário tivermos $c_{ij} \neq c_i^A c_j^B$, os estados dos subsistemas são indissociáveis e isto caracteriza um estado emaranhado. Isto significa dizer que teremos um estado emaranhado sempre que o estado do sistema não puder ser decomposto em estados puros dos subsistemas.

Particularmente interessante para este trabalho, é a utilização do emaranhamento como medida para a caracterização de TFQ. Para tal tarefa devemos utilizar uma forma de quantificar o emaranhamento. Bennett *et al.* [59] demonstraram que para qualquer estado puro em um sistema bipartite, uma forma confiável e fidedigna de mensurar o emaranhamento é através da entropia de von Neumann

$$E(\Psi) = -\text{Tr} \rho \log_2 \rho \quad (5.5)$$

onde, ρ é chamada *matriz de densidade reduzida* obtida através do traço parcial sobre um dos subsistemas

$$\rho_A = \sum_j \langle j|_B (\rho_{AB}) |j\rangle_B = \text{Tr}_B(\rho_{AB}) \quad (5.6)$$

tendo para um estado puro a matriz densidade definida como

$$\rho_{AB} = |\Psi\rangle_{AB}\langle\Psi|_{AB}. \quad (5.7)$$

É de suma importância salientarmos que o valor da entropia de von Neumann, que também chamaremos de entropia de emaranhamento, é totalmente independente da forma que efetuamos o traço parcial sobre a matriz densidade, podendo ser feito tanto sobre o sistema A quanto o sistema B. O traço de uma matriz é independente da representação, e desta forma podemos utilizar uma forma diagonalizada obtendo para um espaço de dimensão finita d , um conjunto de autovalores $\{\lambda_1, \dots, \lambda_d\}$, e reescrevermos a entropia de emaranhamento como

$$E(\Psi_{AB}) = - \sum_{k=1}^d \lambda_k \log_2 \lambda_k. \quad (5.8)$$

O valor da entropia de emaranhamento pode variar desde 0 para sistemas totalmente separáveis, até o valor máximo $\log_2 d$ para sistemas completamente emaranhados [63].

Determinado o método para quantificar o emaranhamento, devemos agora aplicá-lo na forma prática. Para isso utilizaremos o hamiltoniano (2.1) na sua forma reduzida (2.33), calculando-se o seu emaranhamento. Mas antes de aplicarmos o método podemos notar que a entropia de von Neumann é naturalmente aplicável em sistemas bipartites, baseada na forma de pares qbits, como o estado singleto de dois spins 1/2. Mas isto parece gerar uma possível incompatibilidade com o modelo hetero-atômico molecular, pois este modelo é fundamentalmente tripartite, constituído de dois grupos distintos de átomos e um grupo de moléculas. Embora esta configuração implique em diferentes formas de realizarmos o traço parcial sobre a matriz de densidade, mostramos no Apêndice B como todas as escolhas utilizadas geram o mesmo resultado. Desta maneira teremos liberdade em escolher a forma mais conveniente de efetuarmos o traço parcial. Neste caso optamos por descrever o sistema constituído por um subsistema molecular $|N_c\rangle$ e um subsistema atômico $|N_a, N_b\rangle$.

A identificação das TFQ utilizando a entropia de emaranhamento é determinada por uma variação abrupta no valor da mesma, caracterizando um valor de máximo em sua derivada.

Podemos constatar no gráfico 5.4 a variação abrupta do valor da entropia de emaranhamento quando α atinge o valor unitário, variação esta que pode ser observada para todos os valores de $N = 500, 1000$ e 1500 . O valor da mudança aumenta com o incremento de N , pois para valores máximos da entropia de emaranhamento também aumentam acompanhando o valor de N , mas parecem convergir para um valor mínimo comum. Mas este cenário

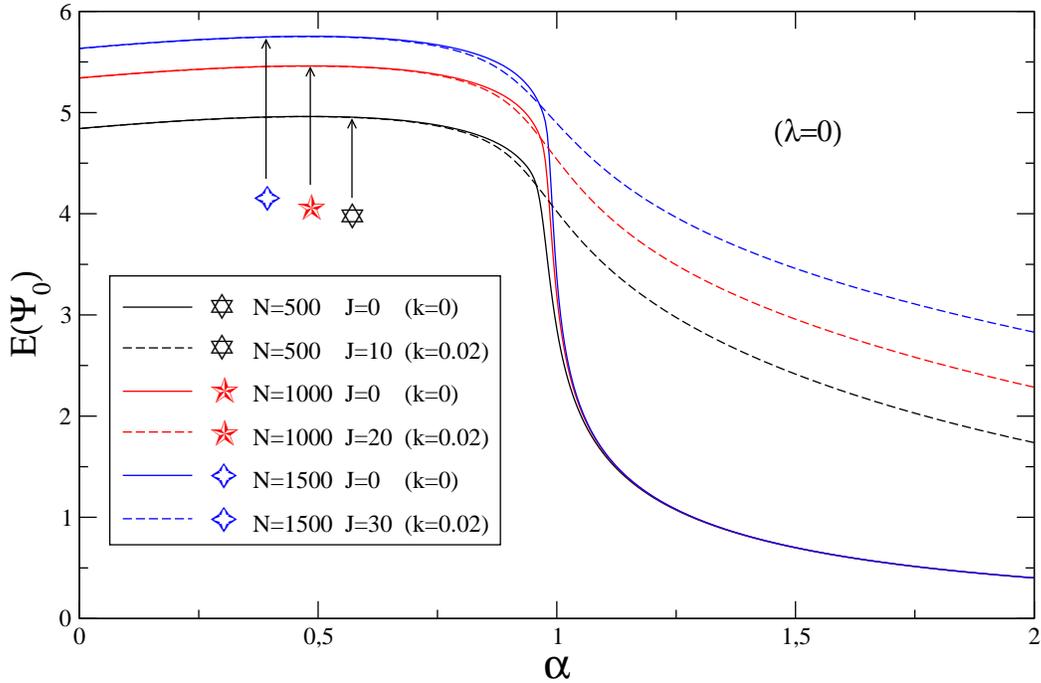


Figura 5.4: O gráfico mostra o comportamento da entropia de emaranhamento próximo ao valor crítico $\alpha = 1$, para o hamiltoniano (2.33). Os diferentes valores $N = 500, 1000$ e 1500 demonstram comportamento semelhante quando $k = 0$, com variações abruptas em direção a um mínimo comum. Mudanças muito mais suaves para são visíveis nos casos em que $k \neq 0$, assinalando novamente a mudança entre os dois cenários.

só se confirma quando a diferença entre tipos distintos de átomos é nula, $k = 0$. Para o caso em que existe uma diferença, ou seja $k \neq 0$, observamos no gráfico 5.4 que a passagem pelo valor $\alpha = 1$ gera uma variação muito mais suave. Mesmo para um valor relativamente muito pequeno, $k = 0.02$, o comportamento do sistema muda de forma radical não apresentando mais a indicação pronunciada da TFQ. O resultado obtido através da entropia de emaranhamento mostra-se desta maneira em perfeita concordância com os resultados obtidos pelo gap de energia e pela fidelidade, apresentados nas seções anteriores.

5.4 Equações do Ansatz de Bethe

Como exposto no capítulo 2, a integrabilidade do hamiltoniano (2.1) nos possibilita encontrarmos as formas dos autoestados e suas autoenergias através da obtenção das raízes das equações do ansatz de Bethe (EAB), transformando o problema de resolver o hamiltoniano num problema puramente algébrico. E através deste método obtivemos as EAB do hamiltoniano (2.1) na forma de produtório, que possui um limite congruente com as EAB obtidas através do método de mapeamento no regime sem espalhamento (2.33), resultando na seguinte forma para a autoenergia

$$E = -\Omega \sum_{i=1}^{(N-J)/2} v_i \quad (5.9)$$

onde as $\{v_i\}$ são soluções para as equações do ansatz de Bethe

$$\frac{(J+1)}{v_i} - v_i - \frac{\mu}{\Omega} = \sum_{j \neq i}^{(N-J)/2} \frac{2}{v_j - v_i}, \quad i = 1, 2, \dots, (N-J)/2. \quad (2.39)$$

A utilização desse método transpõe toda a informação do sistema presente no hamiltoniano para as EAB, por este motivo os conjuntos de raízes que satisfazem as equações possuem informação sobre o comportamento dos autoestados do sistema. Seguindo este princípio como motivador para o uso deste método devemos encontrar o conjunto $\{v_i\}$ de raízes que geram o estado fundamental do sistema para podermos analisar seu comportamento. O valor da autoenergia do estado fundamental é dependente dos valores das raízes das EAB, desta forma, mudanças relacionadas, tanto aos valores quanto à natureza destas raízes, contém informações que apontam mudanças de características no estado fundamental.

Os possíveis conjuntos de raízes que são solução das EAB podem ser constituídos por valores reais, mas também podem se apresentar em formas complexas e simétricas

$$\{v_j\} = \{x_l\} \pm i\{y_l\}, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad l = 1, 2, \dots, N/2.$$

Este tipo de configuração de raízes é conhecido na literatura especializada como "*strings*", e possui a propriedade de garantir que a energia (2.44) seja sempre real, pois a parte imaginária aparece sempre como pares complexos conjugados. O conceito de "*strings*" foi introduzido por Bethe [21] e Minoru Takahashi [64] na década de setenta e tem 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 do tipo XXX e XXZ, o modelo t - J , entre outros, foram estudados neste 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.

Analisando-se a forma da energia (5.9) notamos que o estado fundamental para um valor de Ω positivo deve possuir as raízes v_q com o maior valor positivo possível. Isto ainda não nos dá informações sobre a natureza das raízes, se estas se apresentam no eixo real ou são strings. Mas verificamos que seus valores são sempre reais por comparação direta com a diagonalização exata do hamiltoniano (2.33). Uma vez obtido o conjunto de raízes do estado fundamental do hamiltoniano simplificado (2.33) podemos observar a variação do seu comportamento quando calculamos numericamente seus valores enquanto o valor de α varia perto do ponto crítico $\alpha = 1$.

Podemos notar com bastante clareza no gráfico 5.5 um comportamento característico para o conjunto de raízes do estado fundamental. Todas as raízes parecem se agrupar no eixo real, muito próximas de sua origem, quando o valor de α está próximo de zero, com uma maior densidade também próxima da origem. Gradativamente, com o aumento do valor do parâmetro α , percebemos que o pico de densidade de raízes tende a se afastar da origem aumentando o valor das raízes. Tal processo atinge um ápice no ponto crítico $\alpha = 1$, onde então o conjunto inteiro de raízes parece se afastar da origem do eixo real. Este ponto de "desprendimento" da raiz de menor valor coincide com o ponto crítico obtido nas análises anteriores, o que sugere que este "desprendimento" da origem pode ser usado como sinalizador da TFQ do modelo. De forma complementar observando o gráfico 5.6 onde temos $k = 0.5$, percebemos que nenhuma das raízes tem valor próximo de zero, não existindo assim desprendimento em nenhum valor de α . Este resultado condiz com os resultados anteriores de não haver transição para k diferente de zero, mostrando que os dois cenários e a TFQ podem ser caracterizados através da análise da solução das EAB.

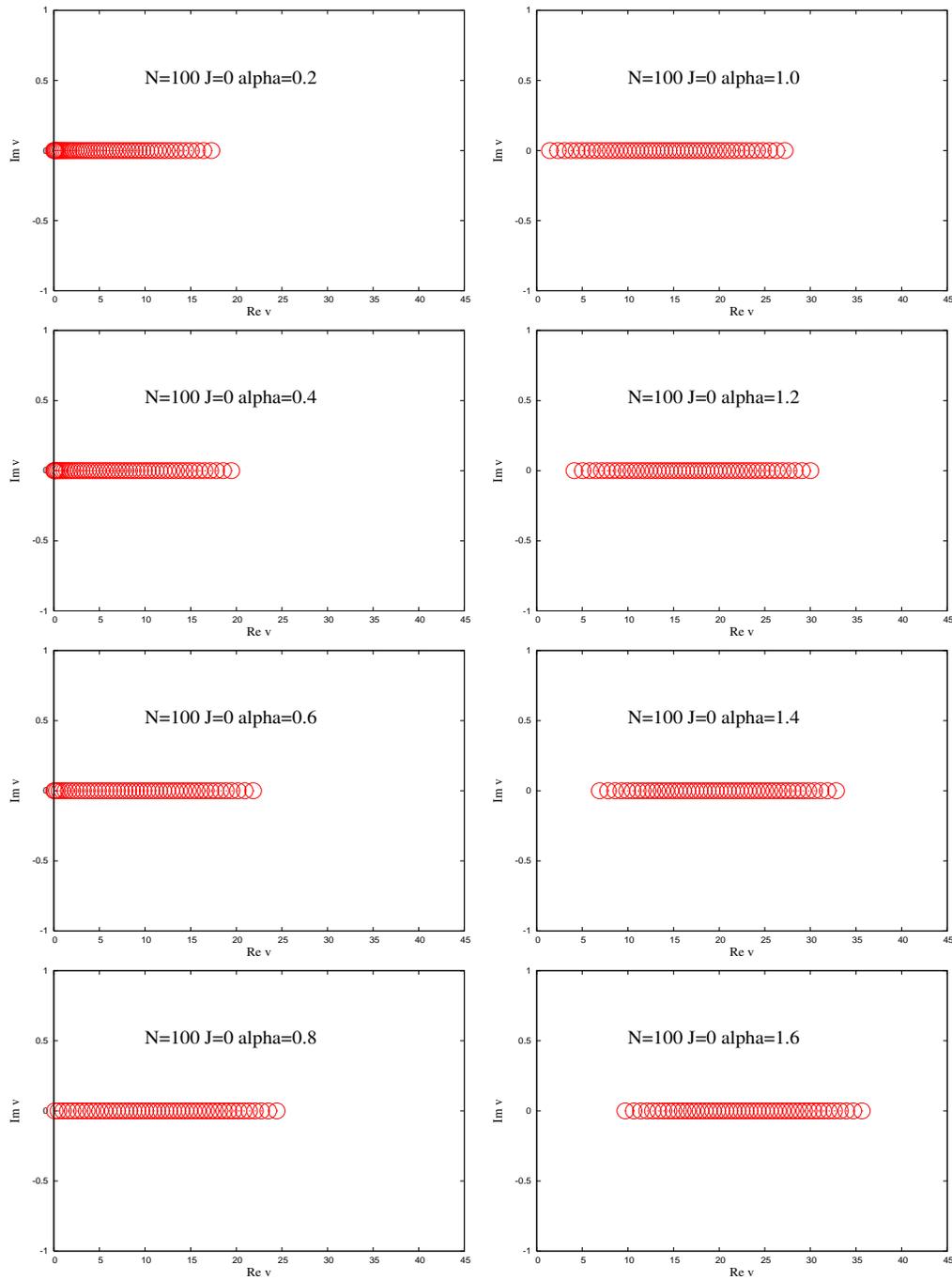


Figura 5.5: Nos gráficos acima apresentamos as soluções das EAB (2.39) para o estado fundamental do hamiltoniano (2.33) para $N = 100$, variando $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N})$ entre 0.2 e 1.6. Podemos observar que as raízes se desprendem da origem em algum ponto entre $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 1$.

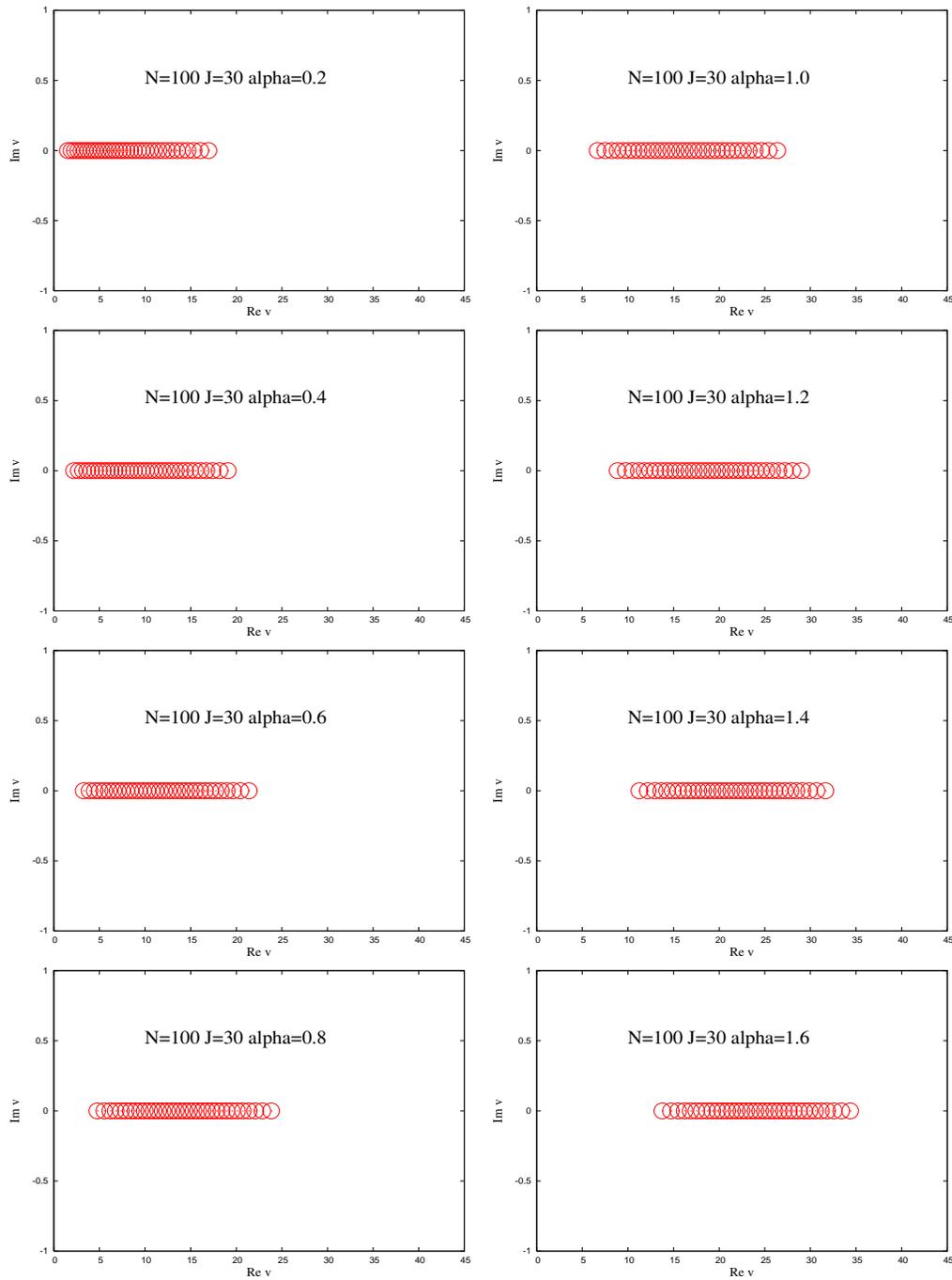


Figura 5.6: Nestes outros gráficos as soluções das EAB (2.39) são calculadas para o estado fundamental do hamiltoniano (2.33) $N = 100$ e $J = 30$, variando $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N})$ entre 0.2 e 1.6. Notamos que as raízes não estão coladas à origem, não podendo haver descolamento das mesmas.

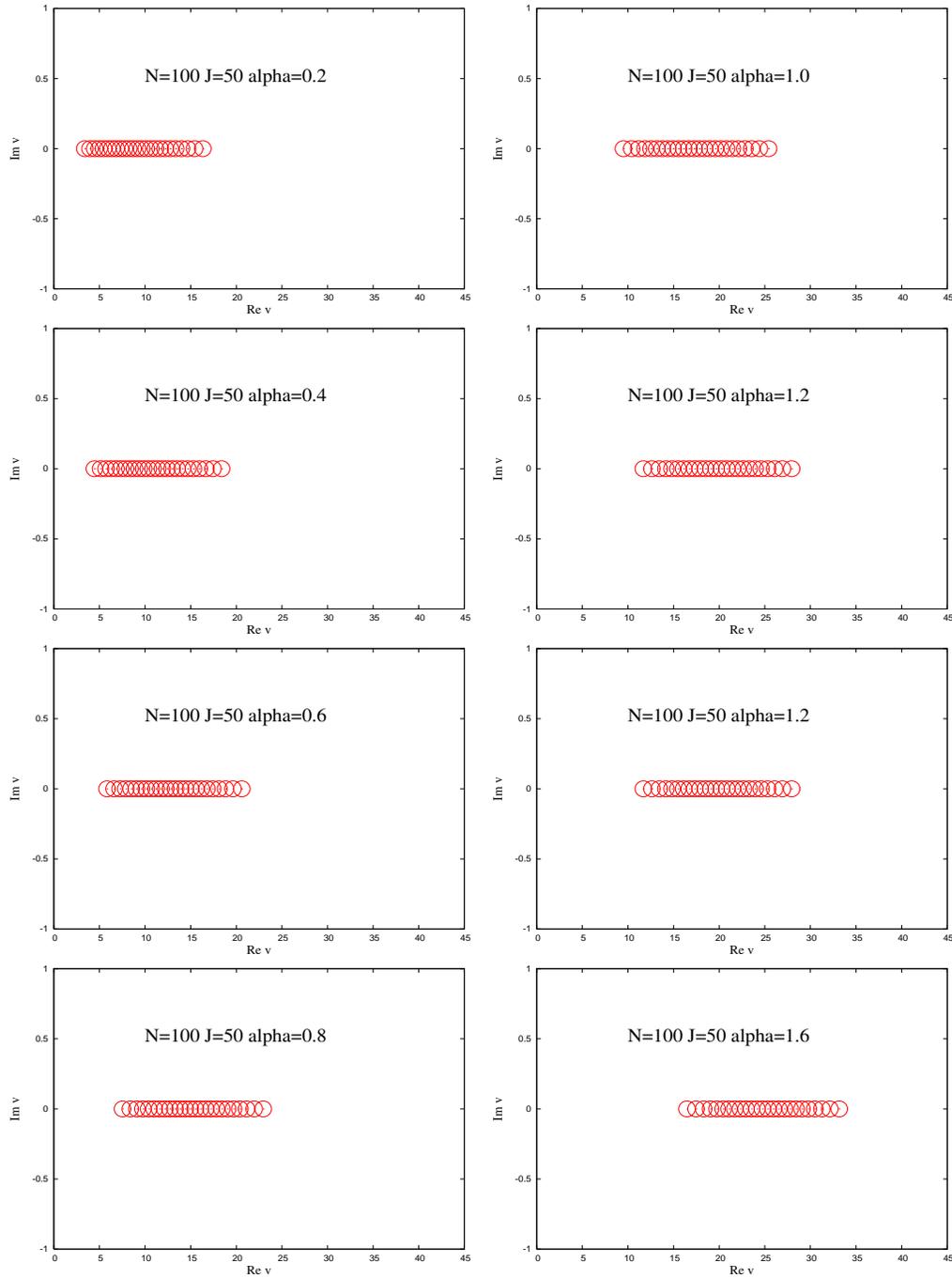


Figura 5.7: Os gráficos apresentam as soluções das EAB (2.39) para o estado fundamental do hamiltoniano (2.33) para $N = 100$ e $J = 50$, variando $\alpha = -\mu/(\Omega\sqrt{2N})$ entre 0.2 e 1.6. Não observamos mudança substancial no comportamento das raízes, em contraste com o caso $k = 0$.

5.5 Fração Molecular

Diante de todos os resultados obtidos nas seções anteriores, através dos diferentes métodos utilizados, encontramos resultados consistentes, evidenciando uma TFQ do hamiltoniano (2.33) no ponto crítico $\alpha = 1$, para o caso em que a diferença hetero-atômica é zero.

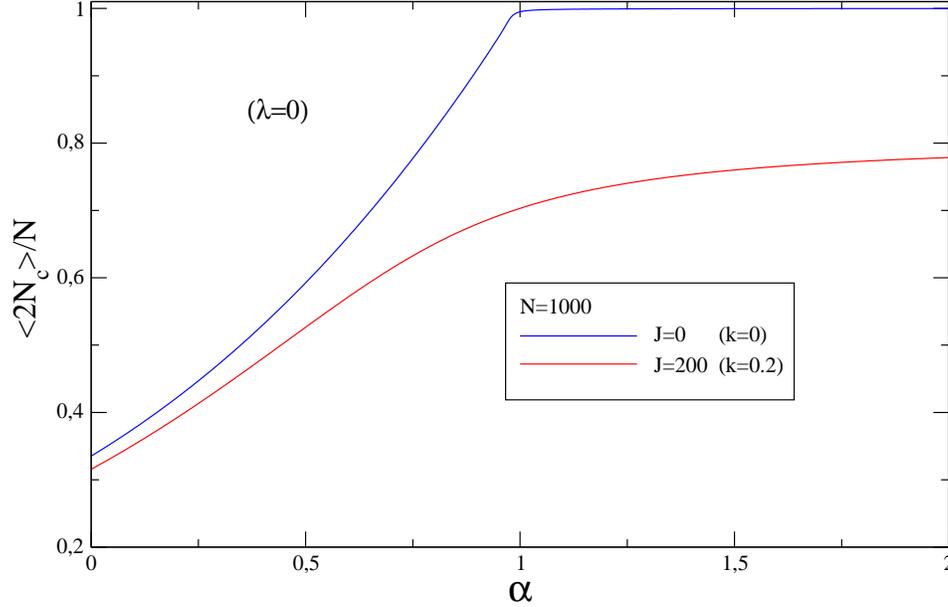


Figura 5.8: Valor esperado normalizado do estado fundamental do número de moléculas no condensado hetero-atômico molecular em função de $\alpha = -\mu/\Omega\sqrt{2N}$, para dois casos distintos, $k = 0$ e $k \neq 0$. Notamos um comportamento abrupto da fração molecular próximo a $\alpha = 1$, apresentando saturação para $\alpha > 1$ no caso $k = 0$. No caso $k = 0.2$ temos uma curva suave, apresentando uma aproximação assintótica do valor máximo.

Vamos agora interpretar esta TFQ para o caso $k = 0$ através do comportamento do valor esperado do número de moléculas normalizado do condensado hetero-atômico molecular. Lembramos que a definição usual de valor esperado de um observável é

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_l a_l^2 \langle \phi_l | A | \phi_l \rangle \quad (5.10)$$

onde o operador $A = 2N_c/N$, e $|\Psi\rangle$ é o estado fundamental.

Podemos observar no gráfico 5.8 a concordância entre a saturação do número de moléculas e o ponto crítico $\alpha = 1$. Notamos que o valor esperado de

moléculas aumenta quase linearmente com o aumento do valor de α . Quando o número de moléculas atinge o ponto de saturação $2N_c/N = 1$ identificamos o ponto crítico do sistema. Da mesma forma que observado nos métodos usados anteriormente para caracterização da TFQ, podemos perceber uma diferença significativa entre os cenários $k = 0$ e $k \neq 0$. No caso em que a diferença hetero-atômica é nula a fração molecular atinge o ponto de saturação de forma abrupta, enquanto para o caso $k \neq 0$ vemos que o condensado tende a atingir, de forma assintótica, a maior fração molecular possível. Sua aproximação é suave e não indica de forma clara um ponto de contato ou de transformação no comportamento do modelo.

Podemos concluir que todos os métodos utilizados mostram grande concordância em relação ao ponto crítico do sistema e ao comportamento distinto nos dois cenários. Através do valor esperado do número de moléculas conseguimos interpretar fisicamente a TFQ no modelo, como sendo uma transição de uma fase mista, composta por átomos e moléculas, e uma fase puramente molecular. Também é interessante observar que o ponto onde a TFQ ocorre ($\alpha = 1$) corresponde ao ponto fixo de bifurcação associado ao mínimo obtido na análise clássica do capítulo 3.

Capítulo 6

Conclusões

6.1 Conclusão

O trabalho exposto nesta tese foi centrado na análise física e algébrica, do hamiltoniano (2.1) que descreve a interconversão de átomos e moléculas em um condensado de Bose-Einstein hetero-atômico molecular. As primeiras exposições feitas visaram construir uma breve compreensão, tanto histórica quanto experimental, referentes à obtenção dos condensados de Bose-Einstein. Elenamos alguns feitos de grande importância científica no desenvolvimento da área e apresentamos alguns modelos integráveis de interesse para o nosso trabalho, como os condensados acoplados por tunelamento Josephson e os condensados homo-atômico moleculares.

Uma vez familiarizados com os condensados, no capítulo 2, revisamos a integrabilidade do modelo hetero-atômico molecular [30]. O fizemos a partir da álgebra de Yang-Baxter e do método do ansatz de Bethe algébrico. Através de uma representação específica para as matrizes de monodromia, foram construídas matrizes de transferência que comutam para qualquer valor do parâmetro espectral. Essa característica fundamental constitui o cerne da integrabilidade do modelo. Com estas poderosas ferramentas matemáticas encontramos as autoenergias e as equações do ansatz de Bethe (EAB) do sistema e restringimos seu domínio para o caso específico sem espalhamento.

No capítulo 3, fizemos uma análise clássica do modelo, identificando os pontos fixos do sistema no espaço de fase. Estes pontos fixos permitiram construir o diagrama de parâmetros do modelo. Nesta construção emergiram dois cenários distintos dependendo se a diferença hetero-atômica do condensado k é nula ou não. Verificamos a existência de 5 regiões distintas no diagrama de parâmetros para o caso $k = 0$ e apenas 3 regiões distintas no diagrama de parâmetros para o caso $k \neq 0$.

Posteriormente, no capítulo 4, utilizamos o método do mapeamento, reescrevendo o hamiltoniano (2.1) na sua forma diferencial. Através do conhecimento de seus autovalores de energia, conseguimos reconstruir um potencial efetivo para a equação de Schrödinger. Este potencial mostra uma mudança drástica em sua configuração dependendo da diferença hetero-atômica k . Considerando o caso particular sem espalhamento (2.33) verificamos que para o caso $k \neq 0$, o potencial exibe um mínimo global; já para o caso $k = 0$ o potencial não é limitado inferiormente, apresentando uma bifurcação para o valor do parâmetro $\alpha = 1$. Através da análise da dinâmica quântica do modelo também pudemos apreciar sensível alteração no padrão das oscilações do condensado. Novamente para o cenário de $k = 0$ foi possível verificar uma mudança abrupta nas oscilações do modelo quando cruzamos o ponto crítico $\alpha = 1$. Mas tal alteração não se manifesta quando o valor de k é diferente de zero.

Finalmente, no capítulo 5, estudamos as transições de fase quânticas (TFQ) para o hamiltoniano (2.33). Após uma breve revisão sobre TFQ, apresentamos vários métodos para sua caracterização. Como primeiro método, utilizamos o gap de energia para identificarmos o ponto crítico do sistema, $\alpha = 1$ no caso em que $k = 0$. Para o cenário em que tínhamos $k \neq 0$ observamos uma alteração muito mais suave no valor do gap de energia. Posteriormente, utilizamos a fidelidade como método de caracterização da TFQ. Esse método, oriundo da computação quântica, mostrou grande sensibilidade para assinalar o ponto crítico do sistema. De maneira similar ao gap de energia, indicou o ponto crítico do sistema em $\alpha = 1$ para $k = 0$; apresentando variações muito mais suaves no cenário $k \neq 0$. Tal diferença também ficou evidenciada na entropia de emaranhamento. Usando a entropia de emaranhamento, identificamos o ponto crítico do modelo através de uma grande variação do seu valor no ponto $\alpha = 1$. Essa variação abrupta do emaranhamento, mostra-se quase ausente para $k \neq 0$. Por fim, utilizamos a análise do comportamento das raízes das EAB como método de identificar a TFQ do sistema: basicamente analisamos o conjunto das raízes para o estado fundamental do hamiltoniano (2.33) e buscamos uma sinalização de mudança próxima ao ponto crítico. Encontramos uma distribuição de raízes de valor real que pareciam "descolar-se" da origem do eixo real quando cruzávamos o ponto $\alpha = 1$ com $k = 0$. Para confirmação das expectativas verificamos que tal comportamento não se repetia para $k \neq 0$, mostrando compatibilidade dos resultados obtidos entre todos os métodos apresentados. No final do capítulo discutimos a natureza física das transições de fase no condensado hetero-atômico molecular: para $k = 0$ pudemos notar claramente uma transição de fase do sistema em $\alpha = 1$, onde o condensado atinge um máximo de densidade de moléculas muito próximo de 1.

Finalizando, podemos dizer que a utilização de diferentes métodos mostrou uma grande consistência frente aos resultados obtidos. Conseguimos caracterizar o modelo através de sua análise clássica, que indicou possíveis candidatos a pontos críticos do sistema e a diferença de cenários dependente do valor de k . Posteriormente essas indicações se confirmaram através de diferentes métodos como a dinâmica quântica, o gap de energia, a fidelidade e o emaranhamento. Também mostramos para esse modelo que o comportamento das soluções das EAB também pode ser usado como um indicativo da TFQ.

6.2 Perspectivas para o futuro

Uma extensão interessante do trabalho aqui apresentado consistiria no estudo de modelos generalizados que pudessem englobar famílias de condensados moleculares maiores. Alguns resultados preliminares podem ser encontrados em [65, 66, 45].

Outra perspectiva interessante reside na aplicação dos métodos de caracterização das TFQ, em especial a análise do comportamento das raízes das EABs para outros modelos integráveis, como nos modelos hetero-atômicos moleculares [65, 66].

E uma última perspectiva reside na utilização da integrabilidade e construção algébrica do modelo para a obtenção dos fatores de forma do sistema. Com esta informação estaríamos aptos a estudar a dinâmica quântica fora de equilíbrio ("quenching"). Este tipo de análise foi feita recentemente para outros modelos integráveis, como o gás de bósons com interação do tipo delta e o modelo BCS [67].

6.3 Trabalhos publicados e em preparação

1. M. Duncan; A. Foerster; J. Links; E. Mattei; N. Oelkers and A. Tonel. Emergent quantum phases in a heteronuclear molecular Bose-Einstein condensate model, **Nuclear Physics B**, v. 3, (2007) 227-249.
2. G. Santos, A. Foerster, J. Links, E. Mattei, and S. R. Dahmen. Quantum phase transitions in an interacting atom-molecule boson model, **Phys. Rev. A**, **81**, (2010) 063621.
3. A. Foerster, D. R. R. Lima and E. C. Mattei
Quantum phase transitions from a Bethe ansatz perspective (em fase de redação/2010)

Apêndice A

Representação matricial

Neste apêndice vamos mostrar como construir a representação matricial do hamiltoniano (2.1) usando como base os vetores do espaço de Fock. Primeiro veremos que os termos de interação e de potenciais externos do hamiltoniano são diagonais, enquanto que os termos de tunelamento (interconversão) situam-se acima ou abaixo da diagonal principal, fazendo com que a representação matricial do hamiltoniano (2.1) seja uma matriz tridiagonal.

Para construir a representação matricial do hamiltoniano (2.1), que escrevemos abaixo,

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

devemos calcular os elementos de matriz de H , utilizando como base os vetores $|n_a, n_b, n_c\rangle$,

$$\langle n'_a, n'_b, n'_c | H | n_a, n_b, n_c \rangle, \quad (\text{A.2})$$

onde n_a , n_b e n_c indicam o número de átomos do tipo a , do tipo b e o número de moléculas c , respectivamente. O espaço de estados do hamiltoniano (2.1) tem dimensão $d = (N - J)/2 + 1$, onde $N = N_a + N_b + 2N_c$ é o número total de átomos e moléculas e $J = N_a - N_b$ é a diferença hetero-atômica. Para calcularmos os elementos de matriz necessitamos escrever a ação dos operadores, presentes no hamiltoniano, sobre os vetores do espaço de Fock. Os operadores criação a^\dagger e aniquilação a aplicados sobre um vetor $|n_a\rangle$ geram as seguintes relações

$$\begin{aligned} a^\dagger |n_a\rangle &= \sqrt{n_a + 1} |n_a + 1\rangle \\ a |n_a\rangle &= \sqrt{n_a} |n_a - 1\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Generalizando-se esta relação para os demais operadores moleculares e atômico-moleculares do hamiltoniano, podemos obter a ação dos termos de

interconversão sobre um vetor genérico $|n_a, n_b, n_c\rangle$

$$\begin{aligned}
 a^\dagger b^\dagger c |n_a, n_b, n_c\rangle &= \sqrt{n_c} a^\dagger b^\dagger |n_a, n_b, n_c - 1\rangle \\
 &= \sqrt{(n_b + 1)(n_c)} a^\dagger |n_a, n_b + 1, n_c - 1\rangle \\
 &= \sqrt{(n_a + 1)(n_b + 1)(n_c)} |n_a + 1, n_b + 1, n_c - 1\rangle \quad (\text{A.4})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 c^\dagger b a |n_a, n_b, n_c\rangle &= \sqrt{n_a} c^\dagger b |n_a - 1, n_b, n_c\rangle \\
 &= \sqrt{(n_a)(n_b)} c^\dagger |n_a - 1, n_b - 1, n_c\rangle \\
 &= \sqrt{(n_a)(n_b)(n_c + 1)} |n_a - 1, n_b - 1, n_c + 1\rangle. \quad (\text{A.5})
 \end{aligned}$$

Esses operadores são aplicados nos vetores de base $|n_a\rangle \otimes |n_b\rangle \otimes |n_c\rangle$ do espaço de Fock $H_a \otimes H_b \otimes H_c$, criado a partir do espaço vetorial de moléculas H_a com base $|n_a\rangle$, H_b com base $|n_b\rangle$ e o espaço molecular H_c com base $|n_c\rangle$.

Os vetores do espaço de Fock são autovetores dos operadores número, gerando os valores dos números de átomos e moléculas como seus autovalores

$$\begin{aligned}
 N_a |n_a, n_b, n_c\rangle &= a^\dagger a |n_a, n_b, n_c\rangle = n_a |n_a, n_b, n_c\rangle \\
 N_b |n_a, n_b, n_c\rangle &= b^\dagger b |n_a, n_b, n_c\rangle = n_b |n_a, n_b, n_c\rangle \\
 N_c |n_a, n_b, n_c\rangle &= c^\dagger c |n_a, n_b, n_c\rangle = n_c |n_a, n_b, n_c\rangle \quad (\text{A.6})
 \end{aligned}$$

Sendo assim os termos dependentes dos operadores número resultarão em termos diagonais na representação matricial. Estes operadores podem ser representados da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 U |n_a, n_b, n_c\rangle &= (U_{aa} N_a^2 + U_{bb} N_b^2 + U_{cc} N_c^2 + U_{ab} N_a N_b + U_{ac} N_a N_c + U_{bc} N_b N_c \\
 &\quad + \mu_a N_a + \mu_b N_b + \mu_c N_c) |n_a, n_b, n_c\rangle \\
 &= (U_{aa} n_a^2 + U_{bb} n_b^2 + U_{cc} n_c^2 + U_{ab} n_a n_b + U_{ac} n_a n_c + U_{bc} n_b n_c \\
 &\quad + \mu_a n_a + \mu_b n_b + \mu_c n_c) |n_a, n_b, n_c\rangle \\
 &= u |n_a, n_b, n_c\rangle. \quad (\text{A.7})
 \end{aligned}$$

Desta forma podemos juntar os termos diagonais e os termos de inconversão para estabelecermos a ação do hamiltoniano (2.1) sobre um vetor de base do espaço de Fock

$$\begin{aligned}
 H |n_a, n_b, n_c\rangle &= u |n_a, n_b, n_c\rangle \\
 &\quad + \Omega \sqrt{(n_a + 1)(n_b + 1)(n_c)} |n_a + 1, n_b + 1, n_c - 1\rangle \\
 &\quad + \Omega \sqrt{(n_a)(n_b)(n_c + 1)} |n_a - 1, n_b - 1, n_c + 1\rangle. \quad (\text{A.8})
 \end{aligned}$$

Para encontrarmos os elementos da matriz que representa o hamiltoniano, basta realizarmos o produto escalar $\langle n'_a, n'_b, n'_c | H |n_a, n_b, n_c\rangle$.

Agora, demonstraremos como obter estes elementos através de exemplos, mas para facilitarmos a notação e sem perde de nenhuma generalidade, realizaremos a representação matricial do hamiltoniano (2.33), que encerra a forma sem espalhamento do hamiltoniano (2.1). Desta maneira o operador U adquire uma forma simplificada e mais compacta $U \rightarrow \mu_c N_c$. Como primeiro exemplo usaremos $N = 4$ e $J = 0$.

A.1 N=4, J=0

Tendo o valor de $J = 0$, temos por consequência o mesmo número de átomos do tipo a e do tipo b . Dessa forma a dimensionalidade do hamiltoniano é $d = 3$. Utilizando as relações (A.4,A.5,A.6), podemos escrever a ação do hamiltoniano (2.33) sobre os vetores do espaço de Fock

$$H|2, 2, 0\rangle = 2\Omega|1, 1, 1\rangle, \quad (\text{A.9})$$

$$H|1, 1, 1\rangle = \mu|1, 1, 1\rangle + \Omega(2|2, 2, 0\rangle + \sqrt{2}|0, 0, 2\rangle), \quad (\text{A.10})$$

$$H|0, 0, 2\rangle = 2\mu|0, 0, 2\rangle + \sqrt{2}\Omega|1, 1, 1\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Agora, utilizando a propriedade de ortonormalidade dos vetores de base

$$\langle n'_a, n'_b, n'_c | n_a, n_b, n_c \rangle = \delta_{n'_a n_a} \delta_{n'_b n_b} \delta_{n'_c n_c}, \quad (\text{A.12})$$

realizaremos os produtos escalares para encontrarmos os elementos da matriz de representação do hamiltoniano (2.33)

$$\begin{aligned} \langle 2, 2, 0 | H | 2, 2, 0 \rangle &= 2\Omega \langle 2, 2, 0 | 1, 1, 1 \rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \langle 1, 1, 1 | H | 2, 2, 0 \rangle &= 2\Omega \langle 1, 1, 1 | 1, 1, 1 \rangle \\ &= 2\Omega, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} \langle 0, 0, 2 | H | 2, 2, 0 \rangle &= 2\Omega \langle 0, 0, 2 | 1, 1, 1 \rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \langle 2, 2, 0 | H | 1, 1, 1 \rangle &= \Omega(2\langle 2, 2, 0 | 2, 2, 0 \rangle + \sqrt{2}\langle 2, 2, 0 | 0, 0, 2 \rangle) \\ &\quad + \mu \langle 2, 2, 0 | 1, 1, 1 \rangle \\ &= 2\Omega, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned}
 \langle 1, 1, 1|H|1, 1, 1\rangle &= \Omega(2\langle 1, 1, 1|2, 2, 0\rangle + \sqrt{2}\langle 1, 1, 1|0, 0, 2\rangle) \\
 &\quad + \mu\langle 1, 1, 1|1, 1, 1\rangle \\
 &= \mu,
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 0, 0, 2|H|1, 1, 1\rangle &= \Omega(2\langle 0, 0, 2|2, 2, 0\rangle + \sqrt{2}\langle 0, 0, 2|0, 0, 2\rangle) \\
 &\quad + \mu\langle 0, 0, 2|1, 1, 1\rangle \\
 &= \sqrt{2}\Omega,
 \end{aligned} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2, 2, 0|H|0, 0, 2\rangle &= 2\mu\langle 2, 2, 0|0, 0, 2\rangle + \sqrt{2}\Omega\langle 2, 2, 0|1, 1, 1\rangle \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{A.19}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 1, 1, 1|H|0, 0, 2\rangle &= 2\mu\langle 1, 1, 1|0, 0, 2\rangle + \sqrt{2}\Omega\langle 1, 1, 1|1, 1, 1\rangle \\
 &= \sqrt{2}\Omega,
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 0, 0, 2|H|0, 0, 2\rangle &= 2\mu\langle 0, 0, 2|0, 0, 2\rangle + \sqrt{2}\Omega\langle 0, 0, 2|1, 1, 1\rangle \\
 &= 2\mu,
 \end{aligned} \tag{A.21}$$

onde por praticidade utilizamos $\mu_c = \mu$. Reunindo os resultados obtidos podemos construir a representação matricial, que fica da seguinte forma

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 2\Omega & 0 \\ 2\Omega & \mu & \sqrt{2}\Omega \\ 0 & \sqrt{2}\Omega & 2\mu \end{pmatrix}. \tag{A.22}$$

A.2 N=20, J=0

Como pudemos observar através do exemplo anterior, notamos que os elementos da matriz de representação obedecem uma certa sequência. Para o caso dos elementos da diagonal principal, os elementos variam unitariamente de forma crescente de zero até $N/2$, multiplicados pelo parâmetro μ

$$h_{ii} = (i - 1)\mu \quad i = 1, \dots, d. \tag{A.23}$$

onde $d = (N - J)/2 + 1$ é a dimensionalidade do hamiltoniano. A sequência crescente (A.23) é igual ao número de moléculas presentes no vetor de base correspondente ao elemento de matriz, devido a dependência em relação ao operador N_c . Os elementos fora da diagonal principal apresentam simetria

frente a mesma. Estes termos são os termos de interconversão, e obedecem a seguinte fórmula

$$h_{i,j+1} = h_{i+1,j} = \left(\frac{N}{2} + 1 - i \right) \sqrt{i} \Omega. \quad (\text{A.24})$$

Na relação (A.24) a parte depende de N corresponde aos autovalores dos operadores atômicos, onde o número de átomos diminui a medida que novas moléculas são criadas. Com esta relação e os termos da diagonal principal podemos montar a forma matricial para $N = 10$ e $J = 0$

$$\begin{pmatrix} 0 & 10\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10\Omega & \mu & 9\sqrt{2}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9\sqrt{2}\Omega & 2\mu & 8\sqrt{3}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8\sqrt{3}\Omega & 3\mu & 14\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 14\Omega & 4\mu & 6\sqrt{5}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6\sqrt{5}\Omega & 5\mu & 5\sqrt{6}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5\sqrt{6}\Omega & 6\mu & 4\sqrt{7}\Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4\sqrt{7}\Omega & 7\mu & 6\sqrt{2}\Omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6\sqrt{2}\Omega & 8\mu & 6\Omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6\Omega & 9\mu & \sqrt{10}\Omega \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{10}\Omega & 10\mu \end{pmatrix}. \quad (\text{A.25})$$

A.3 N=10, J=4

Para o caso em que temos $J \neq 0$ o número de estados possíveis diminui, pois com um número menor de átomos do tipo b , os átomos do tipo a restantes ficam impossibilitados de formar moléculas c . Sendo assim temos $d = 4$, e os seguintes vetores de base

$$\begin{aligned} & |7, 3, 0\rangle, |6, 2, 1\rangle \\ & |5, 1, 2\rangle, |4, 0, 3\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

A aplicação do hamiltoniano (2.33) sobre as bases tem os seguintes resultados

$$H|7, 3, 0\rangle = \sqrt{21}\Omega|6, 2, 1\rangle \quad (\text{A.27})$$

$$H|6, 2, 1\rangle = \mu|6, 2, 1\rangle + \Omega(\sqrt{21}|7, 3, 0\rangle + 2\sqrt{6}|5, 1, 2\rangle) \quad (\text{A.28})$$

$$H|5, 1, 2\rangle = 2\mu|5, 1, 2\rangle + \Omega(2\sqrt{6}|6, 2, 1\rangle + \sqrt{15}|4, 0, 3\rangle) \quad (\text{A.29})$$

$$H|4, 0, 3\rangle = 3\mu|4, 0, 3\rangle + \sqrt{15}\Omega|5, 1, 2\rangle \quad (\text{A.30})$$

Para a obtenção dos elementos de matriz realizaremos os produtos escalares, utilizando a propriedade de ortonormalidade dos vetores de base

$$\begin{aligned} \langle 7, 3, 0|H|7, 3, 0\rangle &= \sqrt{21}\Omega\langle 7, 3, 0|6, 2, 1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} \langle 6, 2, 1|H|7, 3, 0\rangle &= \sqrt{21}\Omega\langle 6, 2, 1|6, 2, 1\rangle \\ &= \sqrt{21}\Omega, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned} \langle 5, 1, 2|H|7, 3, 0\rangle &= \sqrt{21}\Omega\langle 5, 1, 2|6, 2, 1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

$$\begin{aligned} \langle 4, 0, 3|H|7, 3, 0\rangle &= \sqrt{21}\Omega\langle 4, 0, 3|6, 2, 1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

$$\begin{aligned} \langle 7, 3, 0|H|6, 2, 1\rangle &= \Omega(\sqrt{21}\langle 7, 3, 0|7, 3, 0\rangle + 2\sqrt{6}\langle 7, 3, 0|5, 1, 2\rangle) \\ &\quad + \mu\langle 7, 3, 0|6, 2, 1\rangle \\ &= \sqrt{21}\Omega, \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

$$\begin{aligned} \langle 6, 2, 1|H|6, 2, 1\rangle &= \Omega(\sqrt{21}\langle 6, 2, 1|7, 3, 0\rangle + 2\sqrt{6}\langle 6, 2, 1|5, 1, 2\rangle) \\ &\quad + \mu\langle 6, 2, 1|6, 2, 1\rangle \\ &= \mu, \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

$$\begin{aligned} \langle 5, 1, 2|H|6, 2, 1\rangle &= \Omega(\sqrt{21}\langle 5, 1, 2|7, 3, 0\rangle + 2\sqrt{6}\langle 5, 1, 2|5, 1, 2\rangle) \\ &\quad + \mu\langle 5, 1, 2|6, 2, 1\rangle \\ &= 2\sqrt{6}\Omega, \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

$$\begin{aligned} \langle 4, 0, 3|H|6, 2, 1\rangle &= \Omega(\sqrt{21}\langle 4, 0, 3|7, 3, 0\rangle + 2\sqrt{6}\langle 4, 0, 3|5, 1, 2\rangle) \\ &\quad + \mu\langle 4, 0, 3|6, 2, 1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

$$\begin{aligned} \langle 7, 3, 0|H|5, 1, 2\rangle &= \Omega(2\sqrt{6}\langle 7, 3, 0|6, 2, 1\rangle + \sqrt{15}\langle 7, 3, 0|4, 0, 3\rangle) \\ &\quad + 2\mu\langle 7, 3, 0|5, 1, 2\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

$$\begin{aligned}
 \langle 6, 2, 1|H|5, 1, 2\rangle &= \Omega(2\sqrt{6}\langle 6, 2, 1|6, 2, 1\rangle + \sqrt{15}\langle 6, 2, 1|4, 0, 3\rangle) \\
 &\quad + 2\mu\langle 6, 2, 1|5, 1, 2\rangle \\
 &= 2\sqrt{6}\Omega,
 \end{aligned} \tag{A.40}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 5, 1, 2|H|5, 1, 2\rangle &= \Omega(2\sqrt{6}\langle 5, 1, 2|6, 2, 1\rangle + \sqrt{15}\langle 5, 1, 2|4, 0, 3\rangle) \\
 &\quad + 2\mu\langle 5, 1, 2|5, 1, 2\rangle \\
 &= 2\mu,
 \end{aligned} \tag{A.41}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 4, 0, 3|H|5, 1, 2\rangle &= \Omega(2\sqrt{6}\langle 4, 0, 3|6, 2, 1\rangle + \sqrt{15}\langle 4, 0, 3|4, 0, 3\rangle) \\
 &\quad + 2\mu\langle 4, 0, 3|5, 1, 2\rangle \\
 &= \sqrt{15}\Omega,
 \end{aligned} \tag{A.42}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 7, 3, 0|H|4, 0, 3\rangle &= 3\mu\langle 7, 3, 0|4, 0, 3\rangle + \sqrt{15}\Omega\langle 7, 3, 0|5, 1, 2\rangle \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{A.43}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 6, 2, 1|H|4, 0, 3\rangle &= 3\mu\langle 6, 2, 1|4, 0, 3\rangle + \sqrt{15}\Omega\langle 6, 2, 1|5, 1, 2\rangle \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{A.44}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 5, 1, 2|H|4, 0, 3\rangle &= 3\mu\langle 5, 1, 2|4, 0, 3\rangle + \sqrt{15}\Omega\langle 5, 1, 2|5, 1, 2\rangle \\
 &= \sqrt{15}\Omega,
 \end{aligned} \tag{A.45}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 4, 0, 3|H|4, 0, 3\rangle &= 3\mu\langle 4, 0, 3|4, 0, 3\rangle + \sqrt{15}\Omega\langle 4, 0, 3|5, 1, 2\rangle \\
 &= 3\mu,
 \end{aligned} \tag{A.46}$$

Reunindo-se os elementos obtidos podemos montar a representação matricial para o caso $N = 10$ e $J = 4$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{21}\Omega & 0 & 0 \\ \sqrt{21}\Omega & \mu & 2\sqrt{6}\Omega & 0 \\ 0 & 2\sqrt{6}\Omega & 2\mu & \sqrt{15}\Omega \\ 0 & 0 & \sqrt{15}\Omega & 3\mu \end{pmatrix}. \tag{A.47}$$

A.4 N=24, J=8

A partir dos exemplos apresentados podemos estabelecer uma forma generalizada para a representação matricial do hamiltoniano (2.33). A relação que determina o valor dos elementos da diagonal principal fica inalterada com em função do valor de J . Apenas o seu valor máximo é reduzido pela dimensionalidade do hamiltoniano. Obtemos

$$\begin{aligned}
 h_{1,1} &= 0, & h_{2,2} &= \mu \\
 h_{3,3} &= 2\mu, & h_{4,4} &= 3\mu \\
 h_{5,5} &= 4\mu, & h_{6,6} &= 5\mu \\
 h_{7,7} &= 6\mu, & h_{8,8} &= 7\mu \\
 h_{9,9} &= 8\mu.
 \end{aligned}
 \tag{A.48}$$

Os elementos que representam a interconversão, e estão localizados logo acima e logo abaixo da diagonal principal, obedecem a seguinte relação

$$h_{i,j+1} = h_{i+1,j} = \Omega \sqrt{\left(\frac{N+J}{2} + 1 - i\right) \left(\frac{N-J}{2} + 1 - i\right)} (i). \tag{A.49}$$

Aplicando-se a relação (A.49), obtemos

$$\begin{aligned}
 h_{1,2} &= h_{2,1} = \sqrt{16}\sqrt{8}\sqrt{1}\Omega = 8\sqrt{2}\Omega \\
 h_{2,3} &= h_{3,2} = \sqrt{15}\sqrt{7}\sqrt{2}\Omega = \sqrt{210}\Omega \\
 h_{3,4} &= h_{4,3} = \sqrt{14}\sqrt{6}\sqrt{3}\Omega = 6\sqrt{7}\Omega \\
 h_{4,5} &= h_{5,4} = \sqrt{13}\sqrt{5}\sqrt{4}\Omega = 2\sqrt{65}\Omega \\
 h_{5,6} &= h_{6,5} = \sqrt{12}\sqrt{4}\sqrt{5}\Omega = 4\sqrt{15}\Omega \\
 h_{6,7} &= h_{7,6} = \sqrt{11}\sqrt{3}\sqrt{6}\Omega = 3\sqrt{22}\Omega \\
 h_{7,8} &= h_{8,7} = \sqrt{10}\sqrt{2}\sqrt{7}\Omega = 2\sqrt{35}\Omega \\
 h_{8,9} &= h_{9,8} = \sqrt{9}\sqrt{1}\sqrt{8}\Omega = 6\sqrt{2}\Omega.
 \end{aligned}$$

Reunindo os resultados obtidos, para os elementos da diagonal principal e os elementos de interconversão, podemos construir a representação matricial

$$\begin{pmatrix}
 0 & 8\sqrt{2}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 8\sqrt{2}\Omega & \mu & \sqrt{210}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & \sqrt{210}\Omega & 2\mu & 6\sqrt{7}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 6\sqrt{7}\Omega & 3\mu & 2\sqrt{65}\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{65}\Omega & 4\mu & 4\sqrt{15}\Omega & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 4\sqrt{15}\Omega & 5\mu & 3\sqrt{22}\Omega & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3\sqrt{22}\Omega & 6\mu & 2\sqrt{35}\Omega & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{35}\Omega & 7\mu & 6\sqrt{2}\Omega \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6\sqrt{2}\Omega & 8\mu
 \end{pmatrix}.$$

(A.50)

Apêndice B

Emaranhamento

A entropia de emaranhamento é usada como uma forma de medida do emaranhamento quântico, que se caracteriza, aproximadamente falando, a quanto dois sistemas não podem ser descritos separadamente. Quando nenhuma informação pode ser conhecida a partir de uma parte do sistema, então, esta parte está emaranhada ao máximo com o sistema. A fórmula da entropia de emaranhamento é dada por

$$E(\Psi) = -\text{Tr}\rho \log_2 \rho \quad (\text{B.1})$$

onde, ρ é chamada *matriz de densidade reduzida* obtida através do traço parcial sobre uma das partes. Por definição a entropia de emaranhamento é uma medida realizada sobre dois subsistemas, dessa maneira, tem aplicação natural para sistemas bipartites, mas para sistemas tripartites ou de composição mais complexa, a definição não é unívoca. Embora não haja uma única definição de emaranhamento para sistemas tripartites, podemos nos convencer que o modelo de condensado hetero-atômico molecular pode ser descrito de forma equivalente a um modelo bipartite. Sendo assim, mostraremos que as diferentes maneiras de se calcular o emaranhamento, para o modelo hetero-atômico molecular, produzem os mesmos resultados para um exemplo.

Para isto, utilizaremos a forma mais simplificada do hamiltoniano (2.1), eliminando os termos de interação e mantendo-se somente os termos de interconversão

$$H = \Omega(a^\dagger b^\dagger c + c^\dagger ba). \quad (\text{B.2})$$

Neste exemplo fixaremos o seguinte conjunto de valores:

$$\left. \begin{array}{l} N_a = 5 \\ N_b = 3 \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} N = 8 \\ J = 2 \end{array} \right. .$$

A partir destes valores montaremos uma base com a qual se possa representar os auto-estados do sistema. Naturalmente buscaremos representações no espaço de Fock e aparentemente a melhor escolha sejam vetores da forma $|N_a, N_b, N_c\rangle$. Para este exemplo o conjunto de vetores que forma a base é:

$$\text{Base} = \begin{cases} |5, 3, 0\rangle \\ |4, 2, 1\rangle \\ |3, 1, 2\rangle \\ |2, 0, 3\rangle \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Usando as relações dos operadores criação e aniquilação

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

podemos montar a matriz do hamiltoniano nesta base:

$$\begin{aligned} abc^\dagger|5, 3, 0\rangle &= \sqrt{5}\sqrt{3}\sqrt{1}|4, 2, 1\rangle \\ abc^\dagger|4, 2, 1\rangle &= \sqrt{4}\sqrt{2}\sqrt{2}|3, 1, 2\rangle \\ abc^\dagger|3, 1, 2\rangle &= \sqrt{3}\sqrt{1}\sqrt{3}|2, 0, 3\rangle \\ a^\dagger b^\dagger c|2, 0, 3\rangle &= \sqrt{3}\sqrt{1}\sqrt{3}|3, 1, 2\rangle \\ a^\dagger b^\dagger c|3, 1, 2\rangle &= \sqrt{4}\sqrt{2}\sqrt{2}|4, 2, 1\rangle \\ a^\dagger b^\dagger c|4, 2, 1\rangle &= \sqrt{5}\sqrt{3}\sqrt{1}|5, 3, 0\rangle \end{aligned}$$

Desta forma temos

$$H = \Omega \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{15} & 0 & 0 \\ \sqrt{15} & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

onde os autoestados do hamiltoniano serão dados pelos autovetores da matriz (B.5). Calculando-se os autovalores obtemos

$$\lambda = \pm 1.929\Omega, \pm 6.023\Omega. \quad (\text{B.6})$$

O estado fundamental é obtido através do menor dos autovalores, pois representa a menor energia. Sendo assim, por simplificação consideramos $\Omega = 1$, isto resulta no menor autovalor, -6.02 . O estado fundamental e os outros autovetores são dados por

$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0.416 \\ -0.647 \\ 0.572 \\ -0.285 \end{pmatrix} |\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} -0.572 \\ 0.285 \\ 0.416 \\ -0.647 \end{pmatrix} |\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} -0.572 \\ -0.285 \\ 0.416 \\ 0.647 \end{pmatrix} |\Psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0.416 \\ 0.647 \\ 0.572 \\ 0.285 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Conhecendo o autovetor do estado fundamental podemos calcular o emaranhamento deste estado, e para isso montaremos a matriz densidade do mesmo. Montaremos esta matriz escolhendo a base do espaço de Fock, desta maneira a matriz densidade fica escrita da seguinte forma

$$\rho_{i,j} = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{i,j=0}^{N_c} c_i c_j^* |k_+ - i, k_- - i\rangle\langle j, k_- - j, k_+ - j| \quad (\text{B.8})$$

Os vetores da base podem ser escritos de uma maneira alternativa, usando apenas um índice, onde $k_{\pm} = \frac{N \pm J}{2}$

$$\text{sendo assim} \quad \begin{aligned} k_+ - N_c &= \frac{N_a + N_b + 2N_c + N_a - N_b}{2} - N_c = N_a + N_c - N_c = N_a \\ k_- - N_c &= \frac{N_a + N_b + 2N_c - N_a + N_b}{2} - N_c = N_b + N_c - N_c = N_b \end{aligned}$$

Calculamos os termos da representação matricial do operador ρ

$$\begin{aligned} \rho_{1,1} &= (0.41)^2 |5, 3, 0\rangle\langle 5, 3, 0|, \quad \rho_{1,2} = (0.41)(-0.64) |5, 3, 0\rangle\langle 4, 2, 1| \\ \rho_{1,3} &= (0.41)(0.57) |5, 3, 0\rangle\langle 3, 1, 2|, \quad \rho_{1,4} = (0.41)(-0.28) |5, 3, 0\rangle\langle 2, 0, 3| \\ \rho_{2,1} &= (-0.64)(0.41) |4, 2, 1\rangle\langle 5, 3, 0|, \quad \rho_{2,2} = (-0.64)^2 |4, 2, 1\rangle\langle 4, 2, 1| \\ \rho_{2,3} &= (-0.64)(0.57) |4, 2, 1\rangle\langle 3, 1, 2|, \quad \rho_{2,4} = (-0.64)(-0.28) |4, 2, 1\rangle\langle 2, 0, 3| \\ \rho_{3,1} &= (0.57)(0.41) |3, 1, 2\rangle\langle 5, 3, 0|, \quad \rho_{3,2} = (0.57)(-0.64) |3, 1, 2\rangle\langle 4, 2, 1| \\ \rho_{3,3} &= (0.57)^2 |3, 1, 2\rangle\langle 3, 1, 2|, \quad \rho_{3,4} = (0.57)(-0.28) |3, 1, 2\rangle\langle 2, 0, 3| \\ \rho_{4,1} &= (-0.28)(0.41) |2, 0, 3\rangle\langle 5, 3, 0|, \quad \rho_{4,2} = (-0.28)(-0.64) |2, 0, 3\rangle\langle 4, 2, 1| \\ \rho_{4,3} &= (-0.28)(0.57) |2, 0, 3\rangle\langle 3, 1, 2|, \quad \rho_{4,4} = (-0.28)^2 |2, 0, 3\rangle\langle 2, 0, 3|. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Na forma matricial temos

$$\rho = \begin{pmatrix} 0.17 & -0.26 & 0.23 & 0.11 \\ -0.26 & 0.41 & -0.36 & 0.18 \\ 0.23 & -0.36 & 0.32 & -0.16 \\ 0.11 & 0.18 & -0.16 & 0.08 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

Uma vez obtido o operador matriz de densidade para o estado fundamental, podemos calcular o valor da entropia de emaranhamento. Mas por possuímos um sistema naturalmente constituído por três partes, dois tipos distintos de átomos e um tipo de molécula, podemos escolher diferentes maneiras de realizar o traço da matriz de densidade. A seguir mostrar as diferentes formas de se realizar o traço parcial.

B.1 Traço sobre o espaço de moléculas

Um das maneiras de realizarmos o traço parcial, é escolhendo o espaço dos átomos a , dos átomos b ou ainda o espaço das moléculas. Devido a esta escolha do traço, reescrevemos a base explicitamente como um produto de bases distintas, ou seja, as bases serão produtos dos vetores do espaço das moléculas com o espaço dos átomos

$$|N_a, N_b, N_c\rangle = |N_a, N_b\rangle \otimes |N_c\rangle = |N_a, N_b\rangle |N_c\rangle$$

O traço parcial sobre o espaço de moléculas é dado pela fórmula

$$\text{Tr}_c(\rho) = \sum_{n_c}^{N_c} \langle n_c | \rho | n_c \rangle, \quad (\text{B.11})$$

e aplicando sobre o operador matriz de densidade do estado fundamental, temos

$$\text{Tr}_c(\rho) = \sum_{n_c}^{N_c} \langle n_c | \rho | n_c \rangle = \sum_{n_c}^{N_c} \langle n_c | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | n_c \rangle \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} \langle 0_c | \rho | 0_c \rangle &= 0.17 |5_a, 3_b\rangle \langle 0_c | 0_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 0_c \rangle - 0.26 |5_a, 3_b\rangle \langle 0_c | 0_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 0_c \rangle \\ &+ 0.23 |5_a, 3_b\rangle \langle 0_c | 0_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 0_c \rangle + 0.11 |5_a, 3_b\rangle \langle 0_c | 0_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 0_c \rangle \\ &- 0.26 |4_a, 2_b\rangle \langle 0_c | 1_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 0_c \rangle + 0.41 |4_a, 2_b\rangle \langle 0_c | 1_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 0_c \rangle \\ &- 0.36 |4_a, 2_b\rangle \langle 0_c | 1_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 0_c \rangle + 0.18 |4_a, 2_b\rangle \langle 0_c | 1_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 0_c \rangle \\ &+ 0.23 |3_a, 1_b\rangle \langle 0_c | 2_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 0_c \rangle - 0.36 |3_a, 1_b\rangle \langle 0_c | 2_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 0_c \rangle \\ &+ 0.32 |3_a, 1_b\rangle \langle 0_c | 2_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 0_c \rangle - 0.16 |3_a, 1_b\rangle \langle 0_c | 2_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 0_c \rangle \\ &+ 0.11 |2_a, 0_b\rangle \langle 0_c | 3_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 0_c \rangle + 0.18 |2_a, 0_b\rangle \langle 0_c | 3_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 0_c \rangle \\ &- 0.16 |2_a, 0_b\rangle \langle 0_c | 3_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 0_c \rangle + 0.08 |2_a, 0_b\rangle \langle 0_c | 3_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 0_c \rangle \\ &= 0.17 |5_a, 3_b\rangle \langle 5_a, 3_b |, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} \langle 1_c | \rho | 1_c \rangle &= 0.17 |5_a, 3_b\rangle \langle 1_c | 0_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 1_c \rangle - 0.26 |5_a, 3_b\rangle \langle 1_c | 0_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 1_c \rangle \\ &+ 0.23 |5_a, 3_b\rangle \langle 1_c | 0_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 1_c \rangle + 0.11 |5_a, 3_b\rangle \langle 1_c | 0_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 1_c \rangle \\ &- 0.26 |4_a, 2_b\rangle \langle 1_c | 1_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 1_c \rangle + 0.41 |4_a, 2_b\rangle \langle 1_c | 1_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 1_c \rangle \\ &- 0.36 |4_a, 2_b\rangle \langle 1_c | 1_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 1_c \rangle + 0.18 |4_a, 2_b\rangle \langle 1_c | 1_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 1_c \rangle \\ &+ 0.23 |3_a, 1_b\rangle \langle 1_c | 2_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 1_c \rangle - 0.36 |3_a, 1_b\rangle \langle 1_c | 2_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 1_c \rangle \\ &+ 0.32 |3_a, 1_b\rangle \langle 1_c | 2_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 1_c \rangle - 0.16 |3_a, 1_b\rangle \langle 1_c | 2_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 1_c \rangle \\ &+ 0.11 |2_a, 0_b\rangle \langle 1_c | 3_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 1_c \rangle + 0.18 |2_a, 0_b\rangle \langle 1_c | 3_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 1_c \rangle \\ &- 0.16 |2_a, 0_b\rangle \langle 1_c | 3_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 1_c \rangle + 0.08 |2_a, 0_b\rangle \langle 1_c | 3_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 1_c \rangle \\ &= 0.41 |4_a, 2_b\rangle \langle 4_a, 2_b |, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2_c | \rho | 2_c \rangle &= 0.17 |5_a, 3_b\rangle \langle 2_c | 0_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 2_c \rangle - 0.26 |5_a, 3_b\rangle \langle 2_c | 0_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 2_c \rangle \\
 &+ 0.23 |5_a, 3_b\rangle \langle 2_c | 0_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 2_c \rangle + 0.11 |5_a, 3_b\rangle \langle 2_c | 0_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 2_c \rangle \\
 &- 0.26 |4_a, 2_b\rangle \langle 2_c | 1_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 2_c \rangle + 0.41 |4_a, 2_b\rangle \langle 2_c | 1_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 2_c \rangle \\
 &- 0.36 |4_a, 2_b\rangle \langle 2_c | 1_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 2_c \rangle + 0.18 |4_a, 2_b\rangle \langle 2_c | 1_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 2_c \rangle \\
 &+ 0.23 |3_a, 1_b\rangle \langle 2_c | 2_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 2_c \rangle - 0.36 |3_a, 1_b\rangle \langle 2_c | 2_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 2_c \rangle \\
 &+ 0.32 |3_a, 1_b\rangle \langle 2_c | 2_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 2_c \rangle - 0.16 |3_a, 1_b\rangle \langle 2_c | 2_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 2_c \rangle \\
 &+ 0.11 |2_a, 0_b\rangle \langle 2_c | 3_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 2_c \rangle + 0.18 |2_a, 0_b\rangle \langle 2_c | 3_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 2_c \rangle \\
 &- 0.16 |2_a, 0_b\rangle \langle 2_c | 3_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 2_c \rangle + 0.08 |2_a, 0_b\rangle \langle 2_c | 3_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 2_c \rangle \\
 &= 0.32 |3_a, 1_b\rangle \langle 3_a, 1_b|, \tag{B.15}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 3_c | \rho | 3_c \rangle &= 0.17 |5_a, 3_b\rangle \langle 3_c | 0_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 3_c \rangle - 0.26 |5_a, 3_b\rangle \langle 3_c | 0_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 3_c \rangle \\
 &+ 0.23 |5_a, 3_b\rangle \langle 3_c | 0_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 3_c \rangle + 0.11 |5_a, 3_b\rangle \langle 3_c | 0_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 3_c \rangle \\
 &- 0.26 |4_a, 2_b\rangle \langle 3_c | 1_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 3_c \rangle + 0.41 |4_a, 2_b\rangle \langle 3_c | 1_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 3_c \rangle \\
 &- 0.36 |4_a, 2_b\rangle \langle 3_c | 1_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 3_c \rangle + 0.18 |4_a, 2_b\rangle \langle 3_c | 1_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 3_c \rangle \\
 &+ 0.23 |3_a, 1_b\rangle \langle 3_c | 2_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 3_c \rangle - 0.36 |3_a, 1_b\rangle \langle 3_c | 2_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 3_c \rangle \\
 &+ 0.32 |3_a, 1_b\rangle \langle 3_c | 2_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 3_c \rangle - 0.16 |3_a, 1_b\rangle \langle 3_c | 2_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 3_c \rangle \\
 &+ 0.11 |2_a, 0_b\rangle \langle 3_c | 3_c \rangle \langle 5_a, 3_b | \langle 0_c | 3_c \rangle + 0.18 |2_a, 0_b\rangle \langle 3_c | 3_c \rangle \langle 4_a, 2_b | \langle 1_c | 3_c \rangle \\
 &- 0.16 |2_a, 0_b\rangle \langle 3_c | 3_c \rangle \langle 3_a, 1_b | \langle 2_c | 3_c \rangle + 0.08 |2_a, 0_b\rangle \langle 3_c | 3_c \rangle \langle 2_a, 0_b | \langle 3_c | 3_c \rangle \\
 &= 0.08 |2_a, 0_b\rangle \langle 2_a, 0_b|. \tag{B.16}
 \end{aligned}$$

Obtendo o resultado do traço parcial

$$\rho_{ab} = \begin{pmatrix} 0.17 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.41 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.32 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.08 \end{pmatrix}, \tag{B.17}$$

onde ρ_{ab} designa a matriz resultante do traço parcial sobre o espaço de moléculas, chamada matriz reduzida. A partir da matriz reduzida podemos

calcular a entropia de emaranhamento utilizando a fórmula (B.1)

$$\begin{aligned}
 E(\rho_{ab}) &= -\text{Tr}\{\rho_{ab} \log_2(\rho_{ab})\} \\
 &= -\sum_{a,b=0}^d \langle n_a, n_b | \rho_{ab} \log_2(\rho_{ab}) | n_a, n_b \rangle \\
 &= -\langle 5_a, 3_b | (\rho_{ab} \log_2(\rho_{ab})) | 5_a, 3_b \rangle - \langle 4_a, 2_b | (\rho_{ab} \log_2(\rho_{ab})) | 4_a, 2_b \rangle \\
 &\quad - \langle 3_a, 1_b | (\rho_{ab} \log_2(\rho_{ab})) | 3_a, 1_b \rangle - \langle 2_a, 0_b | (\rho_{ab} \log_2(\rho_{ab})) | 2_a, 0_b \rangle \\
 &= -0.17 \log_2(0.17) \langle 5_a, 3_b | 5_a, 3_b \rangle \\
 &\quad - 0.41 \log_2(0.41) \langle 4_a, 2_b | 4_a, 2_b \rangle \\
 &\quad - 0.32 \log_2(0.32) \langle 3_a, 1_b | 3_a, 1_b \rangle \\
 &\quad - 0.08 \log_2(0.08) \langle 2_a, 0_b | 2_a, 0_b \rangle \\
 &= -0.17 \log_2(0.17) - 0.41 \log_2(0.41) \\
 &\quad - 0.32 \log_2(0.32) - 0.08 \log_2(0.08) \\
 &= 1.785.
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

Esse é o valor obtido para a entropia de emaranhamento utilizando o traço parcial sobre o espaço de moléculas.

B.2 Traço sobre o espaço de átomos tipo a

Outra maneira de realizarmos o traço parcial é escolhendo o espaço dos átomos a . Devido a esta escolha do traço, reescrevemos a base explicitamente como um produto de bases distintas

$$|N_a, N_b, N_c\rangle = |N_a\rangle \otimes |N_b, N_c\rangle = |N_a\rangle |N_b, N_c\rangle$$

O traço parcial sobre o espaço dos átomos tipo a é dado pela fórmula

$$\text{Tr}_a(\rho) = \sum_{n_a}^{N_a} \langle n_a | \rho | n_a \rangle, \tag{B.19}$$

e aplicando sobre o operador matriz de densidade do estado fundamental, temos

$$\text{Tr}_a(\rho) = \sum_{n_a}^{N_a} \langle n_a | \rho | n_a \rangle = \sum_{n_a}^{N_a} \langle n_a | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | n_a \rangle \tag{B.20}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2_a | \rho | 2_a \rangle &= 0.17 \langle 2_a | 5_a \rangle | 3_b, 0_c \rangle \langle 5_a | 2_a \rangle \langle 3_b, 0_c | - 0.26 \langle 2_a | 5_a \rangle | 3_b, 0_c \rangle \langle 4_a | 2_a \rangle \langle 2_b, 1_c | \\
 &+ 0.23 \langle 2_a | 5_a \rangle | 3_b, 0_c \rangle \langle 3_a | 2_a \rangle \langle 1_b, 2_c | + 0.11 \langle 2_a | 5_a \rangle | 3_b, 0_c \rangle \langle 2_a | 2_a \rangle \langle 0_b, 3_c | \\
 &- 0.26 \langle 2_a | 4_a \rangle | 2_b, 1_c \rangle \langle 5_a | 2_a \rangle \langle 3_b, 0_c | + 0.41 \langle 2_a | 4_a \rangle | 2_b, 1_c \rangle \langle 4_a | 2_a \rangle \langle 2_b, 1_c | \\
 &- 0.36 \langle 2_a | 4_a \rangle | 2_b, 1_c \rangle \langle 3_a | 2_a \rangle \langle 1_b, 2_c | + 0.18 \langle 2_a | 4_a \rangle | 2_b, 1_c \rangle \langle 2_a | 2_a \rangle \langle 0_b, 3_c | \\
 &+ 0.23 \langle 2_a | 3_a \rangle | 1_b, 2_c \rangle \langle 5_a | 2_a \rangle \langle 3_b, 0_c | - 0.36 \langle 2_a | 3_a \rangle | 1_b, 2_c \rangle \langle 4_a | 2_a \rangle \langle 2_b, 1_c | \\
 &+ 0.32 \langle 2_a | 3_a \rangle | 1_b, 2_c \rangle \langle 3_a | 2_a \rangle \langle 1_b, 2_c | - 0.16 \langle 2_a | 3_a \rangle | 1_b, 2_c \rangle \langle 2_a | 2_a \rangle \langle 0_b, 3_c | \\
 &+ 0.11 \langle 2_a | 2_a \rangle | 0_b, 3_c \rangle \langle 5_a | 2_a \rangle \langle 3_b, 0_c | + 0.18 \langle 2_a | 2_a \rangle | 0_b, 3_c \rangle \langle 4_a | 2_a \rangle \langle 2_b, 1_c | \\
 &- 0.16 \langle 2_a | 2_a \rangle | 0_b, 3_c \rangle \langle 3_a | 2_a \rangle \langle 1_b, 2_c | + 0.08 \langle 2_a | 2_a \rangle | 0_b, 3_c \rangle \langle 2_a | 2_a \rangle \langle 0_b, 3_c | \\
 &= 0.08 | 0_b, 3_c \rangle \langle 0_b, 3_c |, \tag{B.24}
 \end{aligned}$$

Obtendo o resultado do traço parcial

$$\rho_{bc} = \begin{pmatrix} 0.17 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.41 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.32 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.08 \end{pmatrix}. \tag{B.25}$$

A partir da matriz reduzida podemos calcular a entropia de emaranhamento utilizando a fórmula (B.1)

$$\begin{aligned}
 E(\rho_{bc}) &= -\text{Tr}\{\rho_{bc} \log_2(\rho_{bc})\} \\
 &= -\sum_{b,c=0}^d \langle n_b, n_c | \rho_{bc} \log_2(\rho_{bc}) | n_b, n_c \rangle \\
 &= -\langle 3_b, 0_c | \left(\rho_{bc} \log_2(\rho_{bc}) \right) | 3_b, 0_c \rangle - \langle 2_b, 1_c | \left(\rho_{bc} \log_2(\rho_{bc}) \right) | 2_b, 1_c \rangle \\
 &\quad - \langle 1_b, 2_c | \left(\rho_{bc} \log_2(\rho_{bc}) \right) | 1_b, 2_c \rangle - \langle 0_b, 3_c | \left(\rho_{bc} \log_2(\rho_{bc}) \right) | 0_b, 3_c \rangle \\
 &= -0.17 \log_2(0.17) \langle 3_b, 0_c | 3_b, 0_c \rangle \\
 &\quad - 0.41 \log_2(0.41) \langle 2_b, 1_c | 2_b, 1_c \rangle \\
 &\quad - 0.32 \log_2(0.32) \langle 1_b, 2_c | 1_b, 2_c \rangle \\
 &\quad - 0.08 \log_2(0.08) \langle 0_b, 3_c | 0_b, 3_c \rangle \\
 &= -0.17 \log_2(0.17) - 0.41 \log_2(0.41) \\
 &\quad - 0.32 \log_2(0.32) - 0.08 \log_2(0.08) \\
 &= 1.785. \tag{B.26}
 \end{aligned}$$

Esse é o valor obtido para a entropia de emaranhamento utilizando o traço parcial sobre o espaço de átomos tipo a .

B.3 Traço sobre o espaço de átomos tipo b

A última maneira de realizarmos o traço parcial é escolhendo o espaço dos átomos b . Com esta escolha do traço, reescrevemos a base explicitamente como um produto de bases distintas

$$|N_a, N_b, N_c\rangle = |N_a, N_c\rangle \otimes |N_b\rangle = |N_a, N_c\rangle |N_b\rangle$$

O traço parcial sobre o espaço dos átomos tipo b é dado pela fórmula

$$\text{Tr}_b(\rho) = \sum_{n_b}^{N_b} \langle n_b | \rho | n_b \rangle, \quad (\text{B.27})$$

e aplicando sobre o operador matriz de densidade do estado fundamental, temos

$$\text{Tr}_b(\rho) = \sum_{n_b}^{N_b} \langle n_b | \rho | n_b \rangle = \sum_{n_b}^{N_b} \langle n_b | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | n_b \rangle \quad (\text{B.28})$$

$$\begin{aligned} \langle 3_b | \rho | 3_b \rangle &= 0.17 \langle 3_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 3_b | 3_b \rangle \langle 5_a, 0_c| - 0.26 \langle 3_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 2_b | 3_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &+ 0.23 \langle 3_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 1_b | 3_b \rangle \langle 3_a, 2_c| + 0.11 \langle 3_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 0_b | 3_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &- 0.26 \langle 3_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 3_b | 3_b \rangle \langle 5_a, 0_c| + 0.41 \langle 3_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 2_b | 3_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &- 0.36 \langle 3_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 1_b | 3_b \rangle \langle 3_a, 2_c| + 0.18 \langle 3_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 0_b | 3_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &+ 0.23 \langle 3_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 3_b | 3_b \rangle \langle 5_a, 0_c| - 0.36 \langle 3_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 2_b | 3_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &+ 0.32 \langle 3_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 1_b | 3_b \rangle \langle 3_a, 2_c| - 0.16 \langle 3_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 0_b | 3_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &+ 0.11 \langle 3_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 3_b | 3_b \rangle \langle 5_a, 0_c| + 0.18 \langle 3_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 2_b | 3_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &- 0.16 \langle 3_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 1_b | 3_b \rangle \langle 3_a, 2_c| + 0.08 \langle 3_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 0_b | 3_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &= 0.17 |5_a, 0_c\rangle \langle 5_a, 0_c|, \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

$$\begin{aligned} \langle 2_b | \rho | 2_b \rangle &= 0.17 \langle 2_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 3_b | 2_b \rangle \langle 5_a, 0_c| - 0.26 \langle 2_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 2_b | 2_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &+ 0.23 \langle 2_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 1_b | 2_b \rangle \langle 3_a, 2_c| + 0.11 \langle 2_b | 3_b \rangle |5_a, 0_c\rangle \langle 0_b | 2_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &- 0.26 \langle 2_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 3_b | 2_b \rangle \langle 5_a, 0_c| + 0.41 \langle 2_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 2_b | 2_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &- 0.36 \langle 2_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 1_b | 2_b \rangle \langle 3_a, 2_c| + 0.18 \langle 2_b | 2_b \rangle |4_a, 1_c\rangle \langle 0_b | 2_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &+ 0.23 \langle 2_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 3_b | 2_b \rangle \langle 5_a, 0_c| - 0.36 \langle 2_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 2_b | 2_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &+ 0.32 \langle 2_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 1_b | 2_b \rangle \langle 3_a, 2_c| - 0.16 \langle 2_b | 1_b \rangle |3_a, 2_c\rangle \langle 0_b | 2_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &+ 0.11 \langle 2_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 3_b | 2_b \rangle \langle 5_a, 0_c| + 0.18 \langle 2_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 2_b | 2_b \rangle \langle 4_a, 1_c| \\ &- 0.16 \langle 2_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 1_b | 2_b \rangle \langle 3_a, 2_c| + 0.08 \langle 2_b | 0_b \rangle |2_a, 3_c\rangle \langle 0_b | 2_b \rangle \langle 2_a, 3_c| \\ &= 0.41 |4_a, 1_c\rangle \langle 4_a, 1_c|, \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

$$\begin{aligned}
 \langle 1_b | \rho | 1_b \rangle &= 0.17 \langle 1_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 3_b | 1_b \rangle \langle 5_a, 0_c | - 0.26 \langle 1_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 2_b | 1_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &+ 0.23 \langle 1_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 1_b | 1_b \rangle \langle 3_a, 2_c | + 0.11 \langle 1_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 0_b | 1_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &- 0.26 \langle 1_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 3_b | 1_b \rangle \langle 5_a, 0_c | + 0.41 \langle 1_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 2_b | 1_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &- 0.36 \langle 1_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 1_b | 1_b \rangle \langle 3_a, 2_c | + 0.18 \langle 1_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 0_b | 1_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &+ 0.23 \langle 1_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 3_b | 1_b \rangle \langle 5_a, 0_c | - 0.36 \langle 1_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 2_b | 1_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &+ 0.32 \langle 1_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 1_b | 1_b \rangle \langle 3_a, 2_c | - 0.16 \langle 1_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 0_b | 1_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &+ 0.11 \langle 1_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 3_b | 1_b \rangle \langle 5_a, 0_c | + 0.18 \langle 1_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 2_b | 1_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &- 0.16 \langle 1_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 1_b | 1_b \rangle \langle 3_a, 2_c | + 0.08 \langle 1_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 0_b | 1_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &= 0.32 | 3_a, 2_c \rangle \langle 3_a, 2_c |, \tag{B.31}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 0_b | \rho | 0_b \rangle &= 0.17 \langle 0_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 3_b | 0_b \rangle \langle 5_a, 0_c | - 0.26 \langle 0_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 2_b | 0_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &+ 0.23 \langle 0_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 1_b | 0_b \rangle \langle 3_a, 2_c | + 0.11 \langle 0_b | 3_b \rangle | 5_a, 0_c \rangle \langle 0_b | 0_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &- 0.26 \langle 0_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 3_b | 0_b \rangle \langle 5_a, 0_c | + 0.41 \langle 0_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 2_b | 0_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &- 0.36 \langle 0_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 1_b | 0_b \rangle \langle 3_a, 2_c | + 0.18 \langle 0_b | 2_b \rangle | 4_a, 1_c \rangle \langle 0_b | 0_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &+ 0.23 \langle 0_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 3_b | 0_b \rangle \langle 5_a, 0_c | - 0.36 \langle 0_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 2_b | 0_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &+ 0.32 \langle 0_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 1_b | 0_b \rangle \langle 3_a, 2_c | - 0.16 \langle 0_b | 1_b \rangle | 3_a, 2_c \rangle \langle 0_b | 0_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &+ 0.11 \langle 0_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 3_b | 0_b \rangle \langle 5_a, 0_c | + 0.18 \langle 0_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 2_b | 0_b \rangle \langle 4_a, 1_c | \\
 &- 0.16 \langle 0_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 1_b | 0_b \rangle \langle 3_a, 2_c | + 0.08 \langle 0_b | 0_b \rangle | 2_a, 3_c \rangle \langle 0_b | 0_b \rangle \langle 2_a, 3_c | \\
 &= 0.08 | 2_a, 3_c \rangle \langle 2_a, 3_c |, \tag{B.32}
 \end{aligned}$$

Obtendo o resultado do traço parcial

$$\rho_{ac} = \begin{pmatrix} 0.17 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.41 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.32 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.08 \end{pmatrix}. \tag{B.33}$$

A partir da matriz reduzida podemos calcular a entropia de emaranhamento utilizando a fórmula (B.1)

$$\begin{aligned}
 E(\rho_{ac}) &= -\text{Tr}\{\rho_{ac} \log_2(\rho_{ac})\} \\
 &= -\sum_{a,c=0}^d \langle n_a, n_c | \rho_{ac} \log_2(\rho_{ac}) | n_a, n_c \rangle \\
 &= -\langle 5_a, 0_c | \left(\rho_{ac} \log_2(\rho_{ac}) \right) | 5_a, 0_c \rangle - \langle 4_a, 1_c | \left(\rho_{ac} \log_2(\rho_{ac}) \right) | 4_a, 1_c \rangle \\
 &\quad - \langle 3_a, 2_c | \left(\rho_{ac} \log_2(\rho_{ac}) \right) | 3_a, 2_c \rangle - \langle 2_a, 3_c | \left(\rho_{ac} \log_2(\rho_{ac}) \right) | 2_a, 3_c \rangle \\
 &= -0.17 \log_2(0.17) \langle 5_a, 0_c | 5_a, 0_c \rangle \\
 &\quad - 0.41 \log_2(0.41) \langle 4_a, 1_c | 4_a, 1_c \rangle \\
 &\quad - 0.32 \log_2(0.32) \langle 3_a, 2_c | 3_a, 2_c \rangle \\
 &\quad - 0.08 \log_2(0.08) \langle 2_a, 3_c | 2_a, 3_c \rangle \\
 &= -0.17 \log_2(0.17) - 0.41 \log_2(0.41) \\
 &\quad - 0.32 \log_2(0.32) - 0.08 \log_2(0.08) \\
 &= 1.785.
 \end{aligned} \tag{B.34}$$

Esse é o valor obtido para a entropia de emaranhamento utilizando o traço parcial sobre o espaço de átomos tipo b .

Podemos notar que o valor da entropia de emaranhamento é o mesmo para as diferentes formas de traço parcial escolhidas. Pode-se demonstrar que o cálculo da entropia de emaranhamento é igual quando calculamos o seu valor a partir dos coeficientes das bases

$$E(\Psi) = -\sum_{i=0}^d c_i^2 \log_2(c_i^2) \tag{B.35}$$

E estes coeficientes independem da forma com a qual é realizado o traço parcial, desta forma qualquer espaço que escolhermos para fazer o traço parcial obteremos o mesmo resultado.

Referências Bibliográficas

- [1] EINSTEIN, A. Quantentheorie de einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse*, Berlin, v. 22, p. 261-267, 1924.
- [2] EINSTEIN, A. Quantentheorie de einatomigen idealen Gases - Zweite Abhandlung *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse*, Berlin, v. 1, p. 3-14, 1925.
- [3] BOSE, S. N. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese *Zeitschrift für Physik*, Berlin, v. 26, p. 178-181, (1924).
- [4] ANDERSON, M. H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, Washington, v. 269, n. 7, p. 198-201, July 1995.
- [5] BRADLEY, C. C. et al. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 75, n. 9, 1687 4p., Aug. 1995.
- [6] DAVIES, K. B. et al. Bose-Einstein condensation in na gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 75, n. 22, 3969 5p., Nov. 1995.
- [7] CORNELL, E. Very cold indeed: the nanokelvin physics of Bose-Einstein condensation. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, **101**, 419, 1996.
- [8] STOOF, H. T. C.; BIJLSMA, M.; HOUBIERS, M. Theory of interacting quantum gases. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, **101**, 443, 1996.
- [9] CATALIOTTI, F. S. et al. Josephson arrays with Bose-Einstein condensates. *Science*, Washington, v. 293, n. 8, p. 843-846, Aug. 2001.

- [10] ALBIEZ, M. et al. Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction. *Physical Review Letters*, Melville, v. 95, n. 6, 010402 4p., July 2005.
- [11] GATI, R. et al. Realization of a single Josephson junction for Bose-Einstein condensates. *Applied Physics B*, Berlin, v. 82, n. 2, p. 207-210, Feb. 2006.
- [12] JOSEPHSON, B. D. Possible new effects in superconductive tunneling. *Physics Letters*, Amsterdam, v. 1, n. 7, p. 251-253, June 1962.
- [13] ANDERSON, P. W.; ROWELL, J. M. Probable observation of Josephson superconducting tunnelling effect. *Physical Review Letters*, New York, v. 10, n. 6, p. 230-232, Mar. 1963.
- [14] DONLEY, E. A. et al. Atom-molecule coherence in a Bose-Einstein condensate. *Nature*, London, v. 417, n. 5, p. 529-533, May 2002.
- [15] WEBER, C.; BARONTINI, G.; CATANI, J.; THALHAMMER, G.; INGUSCIO, M.; MINARDI, F. Association of ultracold double-species bosonic molecules. *Phys. Rev. A* **78** 061601(R), 2008.
- [16] HAIMBERGER, C.; KLEINERT, J.; BHATTACHARYA, M.; BIGELOW, N. P. Formation and detection of ultracold ground-state polar molecules. *Phys. Rev. A*, **70**, 021402, 2004.
- [17] WANG, D.; QI J.; STONE, M. F.; NIKOLAYEVA, O.; WANG, H.; HATTAWAY, B.; GENSEMER, S. D.; GOULD, P. L.; EYLER, E. E.; STWALLEY, W. C. Photoassociative Production and Trapping of Ultracold KRb Molecules. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 243005, 2004.
- [18] WANG, H.; STWALLEY, W. C. Ultracold photoassociative spectroscopy of heteronuclear alkali-metal diatomic molecules. *J. Chem. Phys.* **108**, 5767, 1998.
- [19] DEMILLE, D. Quantum Computation with Trapped Polar Molecules. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901, 2002.
- [20] KOZLOV, M. G.; LABZOWSKY, L. N. Parity violation effects in diatomics. *J. Phys. B* **28**, 1933, 1995.
- [21] BETHE, H. Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. *Zeitschrift für Physik A*, Berlin, v. 71, n. 3/4, p. 205-226, Mar. 1931.

- [22] YANG C. N. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. *Physical Review Letters*, New York, v. 19, n. 23, p. 1312-1315, Dec. 1967.
- [23] BAXTER, R. J. *Exactly solved models in statistical mechanics*. London: Academic Press, 1982.
- [24] TAKHTAJAN, L. A.; FADDEEV, L. D. The quantum method of the inverse problem and the Heisenberg XYZ model. *Russian Mathematical Surveys*, London, v. 34, n. 5, p. 11-68, Sept. 1979.
- [25] RICHARDSON, R. W. A restricted class of exact eigenstates of the pairing-force Hamiltonian. *Physics Letters*, Amsterdam, v. 3, n. 6, p. 277-279, Feb. 1963.
- [26] LEGGETT, A. J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: some fundamental concepts. *Review of Modern Physics*, Melville, v. 73, n. 2, p. 307-356, Apr. 2001.
- [27] LIPATOV, L. N. High energy asymptotics of multi-colour QCD and exactly solvable lattice models. *JETP Lett.*, v. 59, p. 596-599, 1994.; *Pisma Zh.Eksp.Teor.Fiz.*, v. 59, p. 571-574, 1994. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/hep-th/9311037>>. Acesso em: 20 abr. 2007.
- [28] KUNDU, A. Yang-Baxter algebra and generation of quantum integrable models. *Theoretical and Mathematical Physics*, New York, v. 151, n. 3, p. 831-842, June 2007.
- [29] ORTIZ, G. et al. Exactly-solvable models derived from a generalized Gaudin algebra. *Nuclear Physics B*, Amsterdam, v. 707, n. 3, p. 421-457, Feb. 2005.
- [30] 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*, London, v. 36, n. 19, p. R63-R104, May 2003.
- [31] FOERSTER, A.; LINKS, J.; ZHOU, H-Q. Exact solvability in contemporary physics. *Classical and Quantum Nonlinear Integrable Systems*. (I.O.P. Publishing Ltd.), 2003.
- [32] TONEL, A. P.; LINKS, J.; FOERSTER, A. Quantum dynamics of a model for two Josephson-coupled Bose-Einstein condensates. *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 1235, 2005.

- [33] LINKS, J.; FOERSTER A.; TONEL, A. P.; SANTOS, G. The two-site Bose-Hubbard model. *Annales Henri Poincaré*, **7**, 1591, 2006.
- [34] SANTOS, G. N.; TONEL, A. P.; FOERSTER, A.; LINKS, J. Classical and quantum dynamics of a model for atomic-molecular Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* **73**, 023609, 2006.
- [35] SANTOS, G.; FOERSTER, A.; LINKS, J.; MATTEI, E. C.; DAHMEN, S. R. Quantum phase transitions in an interacting atom-molecule boson model. *Phys. Rev. A*, **81**, 063621, 2010.
- [36] LINKS, J.; ZHOU, H.-Q.; MCKENZIE, R. H.; GOULD, M. D. Algebraic Bethe ansatz method for the exact calculation of energy spectra and form factors: applications to models of Bose-Einstein condensates and metallic nanograins. *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, R63, 2003.
- [37] SKLYANIN, E. K. *Quantum Inverse Scattering Method. Selected Topics*. Four lectures given at Nankai Institute of Mathematics, Tianjin, China, 5-13 April 1991.
- [38] *Progressos na solução algébrica de modelos integráveis bidimensionais*. Tese de doutorado de Cláudio Silva Melo UFSCAR, 2008.
- [39] KOREPIN, V. E.; BOGOLIUBOV, N. M.; IZERGIN, G. *Quantum inverse scattering method and correlation functions* (Cambridge University Press, 1993, Cambridge)
- [40] FADDEEV, L. D. Algebraic aspects of the Bethe Ansatz. *Int. J. Mod. Phys. A: Math. Gen.* **10** 13, 1995.
- [41] YANG, C. N.; GE, M. L. *Braid Group, Not Theory and Statistical Mechanics* Singapore, 1989.
- [42] KOHNO, T. *New Developments in the Theory of Knots* Singapore, 1990.
- [43] ZAMOLODCHIKOV, A. B.; ZAMOLODCHIKOV, A. B. Factorized S-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models. *Ann. Phys. NY* **120** 253, 1979.
- [44] FOERSTER, A.; KAROWSKI, M. Algebraic properties of the Bethe ansatz for an $\text{spl}(2,1)$ -supersymmetric t-J model. *Nuclear Physics B* **396**, 1993.
- [45] FOERSTER, A.; RAGOUCY, E. Exactly solvable models in atomic and molecular physics. *Nucl. Phys. B*, **777**, 373, 2007.

- [46] BEISERT, N.; STAUDACHER, M. The N=4 SYM integrable super spin chain. *Nucl. Phys. B*, **670**, 3, 2003.
- [47] IZERGIN, A. G.; KOREPIN, V. E. Pauli principle for one-dimensional bosons and the algebraic bethe ansatz. *Lett. Math. Phys.* **6** 283, 1982.
- [48] KUZNETSOV, V. B.; TSIGANOV, A. V. A special case of Neumann's system and the Kowalewski-Chaplygin-Goryachev top. *J. Phys. A: Math. Gen.* **22** L73, 1989.
- [49] WALLS, D. F.; BARAKAT, R. Quantum-Mechanical Amplification and Frequency Conversion with a Trilinear Hamiltonian. *Phys. Rev. A* **1**, 446, 1970.
- [50] WALLS, D. F.; TINDLE, C. T. Nonlinear quantum effects in optics. *J. Phys. A: Math. Gen.* **5**, 534, 1972.
- [51] JURCO, B. On quantum integrable models related to nonlinear quantum optics. An algebraic Bethe ansatz approach. *J. Math. Phys.* **30** 1739, 1989.
- [52] RYBIN, A.; KASTELEWICZ, G.; TIMONEN, J.; BOGOLIUBOV, N. The su(1,1) Tavis-Cummings model. *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** 4705, 1998.
- [53] ULYANOV, V. V.; ZASLAVSKII, O. B. New methods in the theory of quantum spin systems. *Phys. Rep.* **216** 179, 1992.
- [54] SACHDEV, S. *Quantum phase transitions*. New York: Cambridge University Press, 2001.
- [55] OSTERLOH, A. et al. Scalling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature*, London, v. 416, n. 4, p. 608-610, Apr. 2002.
- [56] SONDHI, S. L. et al. Continuous quantum phase transition. *Review of Modern Physics*, Woodbury, v. 69, n. 1, p. 315-333, Jan. 1997.
- [57] OELKERS, N.; LINKS, J. Ground-state properties of the attractive one-dimensional Bose-Hubbard model. *Physical Review B*, Melville, **75**, n. 3, 115119 15p., Mar. 2007.
- [58] BUONSANTE, P.; VEZZANI, A. Ground-state fidelity and bipartite entanglement in the Bose-Hubbard model. *Physical Review Letters*, Melville, **98**, n. 3, 110601 4p., Mar. 2007.

- [59] BENNETT, C. H.; BERNSTEIN, H. J.; POPESCU, S.; SCHUMACHER, B. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A*, **53**, 2046, 1996.
- [60] NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [61] ZHOU, H.-Q.; LINKS, J.; MCKENZIE, R. H. Exact solution, scaling behaviour and quantum dynamics of a model of an atom-molecule Bose-Einstein condensate. *International Journal of Modern Physics B*, Singapore, v. 17, n. 31/32, p. 5819-5828, Dec. 2003.
- [62] EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. "Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?", *Phys. Rev* **47**, 777 (1935). Reprinted in *Quantum Theory and Measurement* (J.A. Wheeler and W.Z. Zurek, eds, Princeton University Press, 1983).
- [63] HINES, A. P.; MCKENZIE, R. H.; MILBURN, G. J. Quantum entanglement and fixed-point bifurcations. *Phys. Rev. A* **71**, 042303, 2005.
- [64] TAKAHASHI, M. *Thermodynamics of one-dimensional solvable models* Cambridge, U. K. Cambridge University Press, 1999.
- [65] TONEL, A. P.; KUHN, C. C. N.; SANTOS, G.; FOERSTER, A.; RODITI, I.; SANTOS, Z. V. T. Classical and quantum analysis of heterotriatomic molecular Bose-Einstein condensate model. *Phys. Rev. A* **79**, 013624, 2009.
- [66] SANTOS, G.; FOERSTER, A.; RODITI, I.; SANTOS, Z. V. T.; TONEL, A. P. Exactly solvable models for triatomic-molecular Bose-Einstein Condensates. *Journal of Physics A, Mathematical and Theoretical*, **41**, 295003, 2008.
- [67] FARIBAUT, A.; CALABRESE, P.; CAUX, J. S. Bethe ansatz approach to quench dynamics in the Richardson model. *J. Math. Phys.*, **50**, 095212, 2009.
- [68] FARIBAUT, A.; CALABRESE, P.; CAUX, J. S. Quantum quenches from integrability: the fermionic pairing model. *J. Stat. Mech.*, P03018, 2009.