

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física Gleb Wataghin
Departamento de Física da Matéria Condensada

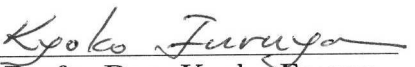
Dissertação de Mestrado

**Dinâmica Populacional de Condensados de Bose-Einstein
em um Potencial de Poço Triplo**

Thiago de Freitas Viscondi

Orientadora: Profa. Dra. Kyoko Furuya

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação devidamente corrigida e defendida por Thiago de Freitas Viscondi e aprovada pela comissão julgadora.


Profa. Dra. Kyoko Furuya

Dissertação apresentada ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Campinas, 17 de Fevereiro de 2009

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

V822d

Viscondi, Thiago de Freitas

Dinâmica populacional de condensados de Bose-Einstein em um potencial de poço triplo / Thiago de Freitas Viscondi. -- Campinas, SP : [s.n.], 2009.

Orientador: Kyoko Furuya.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Condensados de Bose-Einstein. 2. Aproximação semiclassica. 3. Estados coerentes. 4. Transição de fase quântica. I. Furuya, Kyoko. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin" III. Título.

(smcc/ifgw)

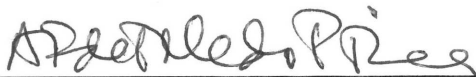
- **Título em inglês:** Population dynamics of a Bose-Einstein condensate in a triple-well potential
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
 - 1. Bose-Einstein condensates
 - 2. Semiclassical approximation
 - 3. Coherent states
 - 4. Quantum phase transition
- **Área de concentração:** Física Clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**
 - Profa. Kyoko Furuya
 - Prof. Antônio Fernando Ribeiro de Toledo Piza
 - Prof. Marcos César de Oliveira
- **Data da defesa:** 17.02.2009
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **THIAGO DE FREITAS VISCONDI** – RA **025270** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 17 / 02 / 2009.

COMISSÃO JULGADORA:



Profa. Dra. Kyoko Furuya – Presidenta da Comissão Julgadora
DFMC/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Antônio Fernando Ribeiro de Toledo Piza – IF/USP



Prof. Dr. Marcos César de Oliveira - DFMC/IFGW/UNICAMP

Achar as palavras certas para agradecer é tarefa difícil, pois gratidão é sentimento humilde, que aparece quando minhas dívidas ultrapassam o valor de uma vida. Obstinadamente ofereço estas poucas palavras, que procuram resumir uma montanha de recordações de pessoas extraordinárias.

Primeiramente, sou muito grato aos meus pais, Ronaldo e Rosana, pela existência, esperança, presença, amizade, valores, caminhos, exemplos, contra-exemplos, suporte e tudo mais.

Devo também aos meus irmãos, Gabriel e Lucas, meus melhores amigos e meus maiores orgulhos. Obrigado por manter minha infância viva e meus olhos no futuro.

Agradeço a Juliana Yukari, minha cúmplice nos grandes momentos de duas vidas, os quais criam dúvidas sobre a própria realidade, pois superam com larga vantagem nossos melhores sonhos.

A toda minha família, agradeço os momentos felizes, o socorro nos momentos de necessidade, a confiança incondicional e, principalmente, as demonstrações irrefutáveis de altruísmo.

Estes últimos seis anos de ensinamentos, paciência, trabalho e física, agradeço aos professores do IFGW. Agradecimentos especiais a minha orientadora, Kyoko Furuya, que me ensinou muito com suas ações e palavras, essenciais em minha formação profissional e pessoal.

Também deixo um muito obrigado a todos os amigos que encontrei e desencontrei neste meu breve percurso, durante os momentos de distração ou construção, nas épocas do colégio, graduação e mestrado.

Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, FAPESP, o financiamento deste projeto e de meus dois anos de mestrado, sob o processo 2006/05142-4.

Examinamos vários aspectos do modelo de um condensado de Bose-Einstein aprisionado em um potencial de três poços simetricamente dispostos, incluindo os efeitos geralmente negligenciados de interação entre partículas em modos locais distintos, que conhecemos como colisões cruzadas. Por intermédio de uma extensão do formalismo de pseudo-spins de Schwinger, aproveitamos a estrutura algébrica natural do sistema, de forma a construir o análogo clássico do modelo utilizando os estados coerentes próprios das representações totalmente simétricas do grupo $SU(3)$. Empregando esta aproximação semiclássica, estudamos os diferentes regimes dinâmicos populacionais presentes no sistema, que podem ser divididos em três grandes conjuntos, os quais denominamos como dinâmicas de condensados gêmeos, poço vazio e vórtice. Estes regimes estão relacionados ao comportamento dos pontos de equilíbrio do modelo, que apresentam bifurcações e alterações de estabilidade, ferramentas essenciais à compreensão dos fenômenos não lineares de tunelamento do condensado. A dinâmica de condensados gêmeos representa um subregime integrável do sistema, onde observamos a supressão do tunelamento bosônico, conhecida como auto-aprisionamento macroscópico. Os estados de vórtice são responsáveis por configurações de rotação do condensado na armadilha, ao passo que os estados de poço vazio exibem desocupação persistente em um dos modos locais. Todos os resultados análogos clássicos são comparados a cálculos quânticos exatos, no intuito de observar as origens da quebra de correspondência clássico-quântica, que quantificamos com uma medida de emaranhamento multipartite, conhecida como pureza generalizada. Também consideramos a transição de fase quântica presente no modelo para interações bosônicas atrativas, a qual associamos a uma mudança da dinâmica populacional do sistema, observada como uma fragmentação das representações do estado fundamental sobre o espaço de fase.

We examined several aspects of a Bose-Einstein condensate trapped in a symmetrically arranged triple-well potential, including the effects of the generally neglected interaction between particles in different local modes, known as cross-collisions. By means of an extension of the Schwinger's pseudo-spins formalism, we take advantage of the system's algebraic structure in order to obtain the classical analogue of the model, by using the coherent states of the fully symmetric representations of the $SU(3)$ group. Employing this semiclassical approximation, we studied the different dynamical regimes of the system, which can be divided into three large groups, which we call as twin-condensate, single depleted well and vortex dynamics. These dynamical regimes are related to the behavior of the fixed points of the model, which exhibit bifurcations and changes of stability, essential tools to the understanding of the nonlinear tunneling phenomena. The twin-condensate dynamics is an integrable subregime of the system, where we observe the suppression of bosonic tunneling, known as macroscopic self-trapping. The vortex states are responsible for the rotational configurations of the condensate in the trap, while the single well depleted states exhibit one persistent vacant local mode. All the classical analogue results are compared to exact quantum calculations, in order to observe the origins of the broken quantum-classical correspondence, which we quantified with a measure of multipartite entanglement, known as generalized purity. We also consider the quantum phase transition for attractive bosonic interactions, which we connect to a change in population dynamics of the system, observed as the phase space fragmentation of the ground state representations.

1	Introdução	1
2	Prelúdio	7
2.1	Modelo de Poço Duplo	7
2.1.1	Análogo Clássico ao Modelo de Dois Modos.	15
2.1.2	Análise Quântica do Modelo de Dois Modos.	26
2.1.3	Pureza Generalizada e Representação no Espaço de Fase.	29
2.1.4	Pureza de $su(2)$ e Transição de Fase Quântica.	35
2.2	Princípio Variacional Dependente do Tempo	39
3	Condensado em Poço Triplo	47
3.1	Modelo de um Condensado em Poço Triplo	47
3.2	Interpretação dos Geradores de $SU(3)$	56
4	Estados Coerentes	61
4.1	Estado Coerente para $SU(3)$	61
4.2	Resultados para os Estados Coerentes de $SU(3)$	72
4.3	Justificativa do Análogo Clássico	76
5	Análogo Clássico	83
5.1	Hamiltoniana do Análogo Clássico	83
5.2	Equações de Movimento	87
5.3	Pontos Fixos	90
5.3.1	Localização dos Pontos de Equilíbrio Reais	93
5.3.2	Pontos de Equilíbrio Reais na Presença de Colisões Cruzadas	99
5.3.3	Estados de Vórtice	103
5.4	Análise de Estabilidade	105
5.4.1	Estabilidade na Presença de Colisões Cruzadas	111
6	Análise do Modelo	117
6.1	Dinâmica de Condensados Gêmeos	118
6.1.1	Elementos de Matriz do Hamiltoniano	123

6.1.2	Análise do Sistema de Condensados Gêmeos	124
6.2	Dinâmica de Poço Vazio	142
6.3	Representações Quânticas para $SU(3)$	150
6.4	Equações de Movimento para as Seções de Poincaré	157
6.5	Dinâmica dos Estados de Vórtice	158
6.6	Transição de Fase Quântica	168
6.6.1	Análise do Espectro	177
7	Conclusão	189
8	Apêndices	193
8.1	Fundamentação	194
8.1.1	Espaço de Fock Bosônico	194
8.1.2	Simetrização de Tensores: Bases para $GL(n)$	202
8.1.3	Representações Totalmente Simétricas de $SU(3)$	207
8.1.4	Formalismo de Schwinger	211
8.2	Estados Coerentes de Mínima Incerteza	216
8.3	Integrabilidade e Graus de Liberdade Quânticos	227
8.4	Álgebras de Lie e Estrutura Simplética	232
8.4.1	Órbitas Adjuntas em $su(3)$	246
8.5	Pseudopotencial	249
	Bibliografia	258

2.1.1	Esboço dos estados localizados em cada mínimo do potencial.	9
2.1.2	Estrutura do espectro de partícula única.	10
2.1.3	Definição dos ângulos que parametrizam os estados coerentes de $SU(2)$	16
2.1.4	Trajeto�rias na esfera de Bloch para b�sons n�o interagentes.	21
2.1.5	Trajeto�rias no espa�o de fase para v�rios valores da taxa de autocol�s�o, mas ainda desconsiderando a col�s�o cruzada.	23
2.1.6	Trajeto�rias na esfera de Bloch para diferentes valores da taxa de col�s�o cruzada. . .	25
2.1.7	Compara��o da din�mica populacional entre os regimes de oscila��o de Josephson e auto-aprisionamento para aproxima��o cl�ssica.	26
2.1.8	Din�mica populacional nos regimes de oscila��o de Josephson e auto-aprisionamento para a solu��o qu�ntica exata.	27
2.1.9	Autovalores do Hamiltoniano para diferentes valores do par�metro de autocol�s�o, mas desconsiderando os efeitos de col�s�o cruzada.	28
2.1.10	Espectro de energia para v�rios valores da taxa de col�s�o cruzada.	29
2.1.11	Comportamento com o tempo da pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(2)}$ para os dois regimes din�micos do modelo de dois modos.	31
2.1.12	Evolu��o qu�ntica da distribui��o Q associada ao estado $ J, J\rangle_x$ para o regime de auto-aprisionamento.	33
2.1.13	Distribui��o Q associada ao estado $ J, J\rangle_x$ para o regime de Oscila��o Josephson em v�rios instantes de tempo.	34
2.1.14	Distribui��o Q para o estado de maior energia do espectro de $\hat{H}$ para v�rios valores dos par�metros κ e η	36
2.1.15	Pureza generalizada de $su(2)$ calculada no auto-estado de energia mais elevada em fun��o do par�metro de autocol�s�o normalizado e do n�mero de part�culas.	37
2.1.16	Derivada da pureza generalizada do auto-estado de maior energia em rela��o � taxa de autocol�s�o para v�rios valores do n�mero de part�culas.	38
2.1.17	Gr�fico de $\text{Ln}\left(\frac{N\kappa_c^q - N\kappa_c}{\Omega}\right)$ em fun��o de $\text{Ln}(N)$	38
3.1.1	Representa��o do potencial de tr�s po�os e localiza��es de seus tr�s m�nimos.	48
3.2.1	Interpreta��o vetorial dos operadores de momento linear J_x , J_y e J_z	58
5.3.1	Esquema da localiza��o dos pontos fixos reais do modelo de po�o triplo.	94

5.3.2	Pontos fixos em função do parâmetro χ sobre a reta $w_1 = w_2$, para $\text{Im}w_1 = \text{Im}w_2 = 0$.	96
5.3.3	Pontos fixos em função do parâmetro χ sobre a reta $w_2 = 1$, para $\text{Im}w_1 = 0$.	98
5.3.4	Comportamento dos parâmetros de bifurcação $\chi_{\pm}$ considerando colisões cruzadas.	101
5.3.5	Diagrama indicando o número de pontos de equilíbrio em função dos parâmetros de colisão sobre cada uma das retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$, $w_2 = 1$.	103
5.3.6	Valor da Hamiltoniana clássica $\mathcal{H}(\vec{w}, \vec{w}^*)$ calculada nos pontos de equilíbrio em função de χ e considerando $\mu = 0$.	106
5.4.1	Comportamento do parâmetro crítico $\chi_{2^{\pm}}$, que determina o caráter de estabilidade dos pontos fixos $2^{\pm}$, em função da taxa de colisões cruzadas.	113
5.4.2	Diagrama de estabilidade dos pontos fixos de vórtice em função dos parâmetros reduzidos de colisão.	115
5.4.3	Diagrama de estabilidade dos pontos fixos de poço vazio em função dos parâmetros reduzidos de colisão.	115
6.1.1	Órbitas clássicas do sistema de condensados gêmeos sobre a esfera de Bloch para vários valores positivos do parâmetro de autocolisão χ , mas desconsiderando as colisões cruzadas.	126
6.1.2	Projeções cilíndricas das trajetórias do sistema de condensados gêmeos para $\chi > 0$ e $\mu = 0$.	128
6.1.3	Seções de Poincaré exibindo a dinâmica nas proximidades dos pontos fixos 2^+ e 3^+ para $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = 3$ e $\mu = 0$.	129
6.1.4	Trajетórias sobre o espaço de fase generalizado de condensados gêmeos no regime de interações atrativas e na presença de colisões cruzadas.	130
6.1.5	Dinâmica populacional clássica e de fase para trajetórias iniciadas no pólo sul da esfera de Bloch para os dois conjuntos de parâmetros já encontrados na figura 6.1.4.	131
6.1.6	Em comparação com a figura 6.1.5, exibimos em (a) a dinâmica populacional quântica do estado $ 0, 0, N\rangle$. Em (b) mostramos a evolução da pureza generalizada do sistema.	132
6.1.7	Representação Q_{CG} nos estados coerentes de $SU(2)$ em vários instantes de tempo para estado inicial $ 0, 0, N\rangle$ evoluído sob Hamiltoniano de parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$.	134
6.1.8	Distribuição Husimi em vários instantes de tempo para estado inicial $ 0, 0, N\rangle$ durante a evolução sob Hamiltoniano de parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$.	135
6.1.9	Trajетórias clássicas do sistema de condensados gêmeos sobre o espaço de fase generalizado para diversos valores negativos do parâmetro de autocolisão, mas para colisões cruzadas desprezadas.	136
6.1.10	Projeções cilíndricas da esfera de Bloch para dois conjuntos de parâmetros já encontrados na figura 6.1.9.	137
6.1.11	Dinâmica do sistema de condensados gêmeos no regime de colisões repulsivas e considerando as colisões cruzadas.	138
6.1.12	Considerando os dois conjuntos de parâmetros utilizados na figura 6.1.11, exibimos em (a) e (b), respectivamente, a dinâmica populacional e de fase para condição inicial localizada no pólo norte da esfera de Bloch.	139
6.1.13	Em comparação com os resultados da figura 6.1.12, mostramos em (a) a dinâmica populacional quântica exata e em (b) a evolução de $\mathcal{P}_{su(3)}$.	139

6.1.14	Representação Q_{CG} nos estados coerentes de $SU(2)$ para o estado inicial $ N; w_1 = w_2 \rightarrow -\infty\rangle$ evoluído no tempo sob Hamiltoniano de parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	140
6.1.15	Representações instantâneas do estado $ N; w_1 = w_2 \rightarrow -\infty\rangle$ propagado no tempo para os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{15}$	141
6.2.1	Seções de Poincaré em $\phi_2 = 0$ que contêm o ponto fixo de poço vazio para o regime de colisões atrativas.	143
6.2.2	Seções de Poincaré em $\phi_2 = 0$ que contêm o ponto fixo de poço vazio para o regime de colisões repulsivas.	144
6.2.3	Dinâmica de populacional para trajetórias próximas ao ponto fixo de poço vazio considerando colisões atrativas.	144
6.2.4	Dinâmica populacional de trajetórias próximas ao ponto de equilíbrio de poço vazio para colisões repulsivas.	145
6.2.5	Dinâmica de fase das trajetórias cuja evolução populacional observamos na figura 6.2.4.	146
6.2.6	Dinâmica populacional quântica exata para mesmas condições iniciais e parâmetros da figura 6.2.3.	147
6.2.7	Resultados quânticos exatos das médias dos operadores de população nos três modos locais para mesmas condições iniciais e parâmetros da figura 6.2.4.	148
6.2.8	Evolução da pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(3)}$ para as quatro condições iniciais consideradas nas figuras 6.2.6 e 6.2.7.	149
6.5.1	As seções de Poincaré em $p_2 = -\sqrt{\frac{N}{2}}$ exibem a dinâmica próxima ao ponto fixo de vórtice localizado em $w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}}$ e $w_2 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}$. Os parâmetros de colisão no gráfico à esquerda são $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, enquanto à direita são $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	159
6.5.2	Dinâmica próxima ao estado de vórtice $w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}}$ e $w_2 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}$ representada por uma seção de Poincaré em $p_2 = -\sqrt{\frac{N}{2}}$ para parâmetros de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	160
6.5.3	À esquerda exibimos a dinâmica populacional semiclássica de uma órbita próxima ao estado de vórtice para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, enquanto à direita mostramos o comportamento das diferenças de fases entre os condensados na mesma trajetória.	161
6.5.4	O gráfico à esquerda (direita) mostra a dinâmica semiclássica populacional (de fase) para uma órbita próxima ao estado de vórtice, para parâmetros $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	162
6.5.5	No gráfico (a) exibimos a dinâmica populacional clássica para uma condição inicial próxima ao ponto fixo de vórtice. Em (b) vemos a dinâmica das diferenças de fase na mesma trajetória, na qual as taxas de colisão são dadas por $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	162
6.5.6	À esquerda (direita) temos a média clássica (quântica) do operador de rotação do condensado J_S para as três condições iniciais e conjuntos de parâmetros utilizados nas figuras 6.5.3-6.5.5.	163
6.5.7	Nos gráficos (a)-(c) mostramos a dinâmica populacional quântica para as mesmas condições iniciais e conjuntos de parâmetros utilizados nas figuras 6.5.3-6.5.5, respectivamente. Em (d) exibimos a evolução de $\mathcal{P}_{su(3)}$ para as três condições iniciais estudadas em (a)-(c), representadas pelas curvas azul sólida, verde tracejada e vermelha pontilhada, nesta ordem.	164
6.5.8	Distribuição $Q_J(J_1, J_2)$ mostrando alguns instantes de interesse na evolução dos mesmos estados iniciais utilizados nas figuras 6.5.7.b e 6.5.7.c.	166

6.5.9	Função semiclássica de fase Φ nos mesmos estados e instantes de interesse representados no espaço de populações da figura 6.5.8.	167
6.6.1	Distribuição Husimi no espaço de população para o estado fundamental do Hamiltoniano (3.2.20) para vários valores dos parâmetros de colisão.	170
6.6.2	Função semiclássica de fase do estado fundamental do Hamiltoniano (3.2.20) para vários valores dos parâmetros de colisão.	171
6.6.3	À esquerda exibimos a pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(3)}$ do estado fundamental em função de χ para vários valores de N . A derivada $\frac{d\mathcal{P}_{su(3)}}{d\chi}$ em função de χ é mostrada à direita.	173
6.6.4	Gráfico dos valores de $\text{Ln}(\chi_c^q - \chi_c)$, extraídos das cinco curvas da figura 6.6.3.b, em função de $\text{Ln}N$	174
6.6.5	No painel superior (inferior) temos as curvas para a pureza $\mathcal{P}_{su(3)}$, a fidelidade $\mathcal{F}$ em relação ao estado coerente $ N; w_1 = w_2 = 1\rangle$ e a média normalizada do operador de tunelamento P_S calculadas todas no estado fundamental do modelo em função de $\chi > 0$ ($\log_{10}(-\chi)$, $\chi < 0$).	175
6.6.6	O gráfico à esquerda (direita) mostra a distribuição Q_J (função semiclássica de fase) do estado fundamental para os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -10^4$ e $\mu = 0$	177
6.6.7	Fidelidade dos auto-estados de $\hat{H}$ em relação aos estados coerentes centrados nos pontos fixos da dinâmica semiclássica do modelo. O parâmetro de autocolisão em cada painel é dado por: (a) $\chi = 1, 5$, (b) $\chi = 3$, (c) $\chi = -6$ e (d) $\chi = -8$	178
6.6.8	O gráfico à esquerda (direita) mostra a representação Husimi populacional (função semiclássica de fase) do estado estacionário de maior fidelidade em relação ao estado coerente $ 2^\pm; w_1 = w_2\rangle$, para $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -8$ e $\mu = 0$	180
6.6.9	Comparação da distribuição Q_J e da função semiclássica de fase entre o estado coerente $ 4^\pm; w_1 = w_2\rangle$ e seu estado mais fiel no espectro de energia, obtido com os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -8$ e $\mu = 0$	181
6.6.10	Fidelidade dos estados estacionários do sistema em relação aos estados coerentes centrados nos pontos de equilíbrio clássicos. O painel (a) apresenta os resultados para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, enquanto o painel (b) para $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	182
6.6.11	Comparação das representações no espaço de fase entre a superposição simétrica dos estados de vórtice e seus estados estacionários associados de máxima fidelidade para $\chi = \pm 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	183
6.6.12	Comparação das representações no espaço de fase entre a superposição antissimétrica dos estados de poço vazio e seus estados estacionários associados mais fiéis para $\chi = \pm 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$	184
6.6.13	Autovalores de $\hat{H}$ em função do parâmetro de autocolisão χ , considerando $\mu = 0$. . .	186
6.6.14	À esquerda exibimos a diferença entre os dois níveis de energia mais baixos do modelo em função do parâmetro de autocolisão, para vários valores de N . À direita mostramos o comportamento da derivada de ΔE em relação a χ	188

4.1.1	Raízes para a álgebra gerada por (4.1.11), juntamente com seus respectivos vetores e sua combinação linear em raízes simples positivas.	66
4.1.2	Operadores de levantamento e abaixamento dos estado em $\mathbb{B}_N$	66
5.3.1	Classificação dos pontos fixos sobre a reta $w_1 = w_2$ de acordo com o comportamento assintótico em $ \chi \rightarrow \infty$	97
5.3.2	Comparação dos pontos fixos sobre $w_2 = 1$, mostrados na figura 5.3.3, aos seus equivalentes na tabela 5.3.1.	99
5.4.1	Possibilidades de autovalores da matriz A para um sistema Hamiltoniano.	107
5.4.2	Estabilidade dos pontos de equilíbrio das classes $2^\pm$, $3^\pm$ e $4^\pm$, cuja localização é dependente das taxas de colisão bosônicas.	111
6.6.1	Valores de χ para os mínimos de $\frac{d\Delta E}{d\chi}$. O erro numérico estimado em $\chi_c^{av}(N)$ é $\Delta\chi_c^{av} = 0,003$	187
8.4.1	Tipos de órbitas em $su(3)$	248

Muita vezes utilizamos as palavras “macroscópico” e “clássico” como sinônimas, relegando os fenômenos puramente quânticos ao mundo microscópico. Entretanto, a física ensina repetidamente que não devemos tomar nossa percepção cotidiana da natureza como verdade absoluta.

Se pararmos para pensar, logo observamos que acontecimentos fundamentalmente contra-intuitivos permeiam toda nossa realidade. Por exemplo, quando puxamos uma maçaneta, é incrível notar como todos aqueles átomos da porta se movem quase simultaneamente, conservando suas distâncias relativas, embora apenas uma pequena porção de partículas interaja diretamente com nossas mãos.

Da mesma forma como a humanidade desacreditou no conceito milenar de uma Terra plana residente no centro do universo, bastaram pouco mais de setenta anos para que a comunidade científica aceitasse definitivamente a idéia de uma ocupação finita de um único estado quântico.

Em 1924, adicionando mais uma quebra de paradigma ao seu currículo, Einstein propõe, alicerçado nos trabalhos de Bose, a condensação de partículas massivas no estado fundamental de um sistema, considerando temperaturas suficientemente baixas. No entanto, as primeiras observações deste fenômeno [AEM⁺95, BSTH95, DMA⁺95], reconhecido como condensação de Bose-Einstein [Leg01, Bur96, PS02], somente ocorreram em 1995.

A ampliação sem precedentes dos efeitos puramente quânticos, causada pelo elevado número de partículas ocupantes de um mesmo estado, aniquila todas as nossas pretensões de associar ao mundo macroscópico somente os fenômenos clássicos^{1.1}. Porém, os físicos teóricos e experimentais estão fascinados com as novas possibilidades de observação e aplicação proporcionadas pela condensação.

Excetuadas no conteúdo das previsões einsteinianas, as interações entre os bósons desempenham um papel fundamental no processo de condensação. Contudo, neste trabalho estamos mais interessados nos efeitos provocados pelas colisões interparticulares na dinâmica do condensado, após seu estabelecimento.

Mais de uma década passada desde as primeiras experiências bem sucedidas, atualmente já nos deparamos com métodos bastante eficientes de criação e controle de condensados. Por exemplo, empregando técnicas de condensação sobre “microchips”, podemos obter diversas configurações de potenciais de aprisionamento [Rei02].

Justificando seu título, esta dissertação expõe vários aspectos da dinâmica de um condensado em

^{1.1}Excluindo as teorias relativísticas de nosso “panorama teórico”, pois estas escapam demasiadamente do enfoque desta dissertação.

uma armadilha de três poços, dispostos simetricamente. Consideramos abordagens semiclássicas e quânticas ao problema, em regimes de espalhamento repulsivo e atrativo.

O primeiro capítulo deste trabalho é dedicado à introdução dos conceitos fundamentais utilizados no estudo da dinâmica populacional de um condensado de Bose-Einstein em poço triplo [NHMM00, MJ06, LFYL07, SAZ07, FP01, FP03, BFP03, BFP]. Na primeira seção realizamos uma análise auto-suficiente de um condensado em poço duplo, de maneira a apresentar suavemente a terminologia e os métodos presentes no restante da tese, mas excluindo um exame mais profundo das ferramentas matemáticas empregadas. Os modelos de dois e três modos apresentam muitos fenômenos marcantes em comum, como a transição de fase quântica associada à supressão de tunelamento bosônico ou as representações de regimes integráveis sobre a esfera de Bloch.

No final do capítulo 2 discutimos o princípio variacional dependente do tempo (PVDT) [SK81], que fundamenta a aproximação semiclássica conhecida como análogo clássico, peça fundamental na construção da análise de nosso modelo. Uma porção significativa da linguagem e notação presente no restante do texto também é apresentada nesta seção, principalmente os termos referentes à mecânica clássica, cujo formalismo utilizamos no estudo de efeitos puramente quânticos.

Uma dedução minuciosa de modelo de três modos locais é realizada no capítulo 3, onde também observamos as diferentes possibilidades de interação entre os bósons condensados. As colisões entre partículas localizadas em um mesmo poço do potencial são denominadas autocolisões, responsáveis pelos termos de interação mais relevantes no Hamiltoniano do sistema. Colisões entre bósons provenientes de modos locais distintos são bem menos frequentes, devido às hipóteses de validade do modelo, que supõem mínimos de potencial significativamente afastados. Apesar de usualmente descartadas na literatura existente sobre este tema, as colisões cruzadas podem produzir efeitos consideráveis na dinâmica do condensado, devido à alteração efetiva da taxa de tunelamento no caso de um elevado número de partículas aprisionadas.

Em seguida aplicamos uma extensão do formalismo de pseudo-spins de Schwinger [Sch65], reescrevendo o Hamiltoniano do modelo em termos dos geradores do grupo $SU(3)$. Estes operadores podem ser interpretados como os observáveis básicos do condensado, que manifestam sua distribuição de posição, momento linear e momento angular. O potencial de aprisionamento estudado possui três mínimos simetricamente dispostos em forma de anel, indicando a possível existência de configurações rotacionais do condensado em torno do eixo de simetria da armadilha.

A estrutura algébrica natural do modelo é aproveitada no capítulo 4, onde introduzimos o conceito de estados coerentes generalizados [ZFG90, Per86]. Primeiramente, examinamos os elementos necessários à construção de um estado coerente com propriedades físicas úteis, tomando como inspiração inicial os consagrados estados coerentes do oscilador harmônico. Então, prosseguimos com a obtenção dos estados coerentes “mais próximos aos clássicos” das representações totalmente simétricas de $SU(3)$ [Dao04, MS00], adequados ao tratamento de problemas de três modos bosônicos dotados de conservação do número total de partículas.

Deduzindo fórmulas BCH (Baker-Campbell-Hausdorff) [Hal03], encontramos a expansão dos estados coerentes de $SU(3)$ na base usual do espaço de Fock [NO98]. Também mostramos algumas propriedades importantes dos estados coerentes, como a resolução diagonal da identidade e as fórmulas para as médias dos observáveis do sistema.

Na última seção do capítulo 4, justificamos a escolha do estado coerente como função teste para o PVDT, método conhecido como análogo clássico [ZFYW89, ZFY90, AFLN92, FNP98, AFNP99, AFNP01]. Esta aproximação semiclássica possui várias características interessantes, que demonstramos no decorrer do texto. Por exemplo, mostramos que o método análogo clássico reproduz os resultados quânticos exatos para Hamiltonianos lineares nos geradores de $SU(3)$, pois dois estados

coerentes arbitrários sempre estão relacionados por uma transformação deste grupo. Neste contexto, obtemos a solução analítica exata da equação de Schrödinger para o modelo de três modos acoplados, desconsiderando os efeitos de interação bosônica e supondo condição inicial coerente.

O análogo clássico também é exato no limite macroscópico [Yaf82], que mostramos corresponder também ao limite clássico do sistema, onde as médias de produtos de operadores nos estados coerentes são fatoradas.

Ao final da seção 4.3, propomos uma maneira de quantificar a qualidade de nossa aproximação semiclássica, utilizando a grandeza conhecida como pureza generalizada associada à álgebra $su(3)$ [SOB⁺04, BKO03, BKO⁺04]. O método análogo clássico consiste em “obrigar” o estado a evoluir “sem perder sua forma”; ou seja, a permanecer sempre como um estado coerente. A pureza generalizada nos permite acompanhar o processo de perda de coerência em uma evolução quântica exata, pois é uma grandeza decrescente com o “alargamento” das representações do estado sobre o espaço de fase, o qual simboliza o aumento das incertezas e correlações nas medidas dos observáveis fundamentais do sistema. Quanto mais incoerente é a evolução quântica de um estado, menor é a qualidade da aproximação análoga clássica.

A Hamiltoniana análoga clássica do modelo é obtida no capítulo 5, onde empregamos algumas das ferramentas da mecânica clássica no estudo dos fenômenos puramente quânticos relacionados à dinâmica de tunelamento de bósons condensados. Na primeira seção introduzimos uma reparametrização do espaço de fase em variáveis canônicas de ângulo e ação, cuja interpretação física é bastante intuitiva. As coordenadas de ação representam as ocupações médias nos modos locais da armadilha, ao passo que as variáveis angulares são as diferenças entre as fases coletivas dos condensados localizados em cada poço. Então, reobtemos os resultados semiclássicos da célebre regra de substituição de Heisenberg, que sugere a troca dos operadores de criação e aniquilação bosônicos por uma forma polar associada ao número de excitação e sua fase conjugada.

Nas seções seguintes examinamos as equações de movimento semiclássicas do modelo, resultantes da aplicação do PVDT. Inicialmente encontramos a localização dos pontos de equilíbrio do sistema, divididos naturalmente entre os pontos fixos reais e os estados de vórtice.

Se os condensados localizados em dois poços distintos apresentam acordo ou oposição de fase, então encontramos os pontos de equilíbrio reais, mas apenas sob a condição de igualdade populacional entre os dois modos em fase, chamados de condensados gêmeos, ou no caso de desocupação total de um poço, conhecido como estado de poço vazio. Diferentemente das configurações irrotacionais dos pontos fixos reais, os estados de vórtice apresentam momento angular persistente em torno do eixo de simetria do potencial de aprisionamento, fenômeno não exibido em cadeias lineares de condensados acoplados.

Podemos associar diferentes regimes dinâmicos populacionais às órbitas regulares encontradas nas proximidades dos pontos de equilíbrio estável do modelo, neste intuito analisamos o caráter de estabilidade de cada ponto fixo em função das taxas de colisão bosônicas.

Os resultados obtidos com os métodos da mecânica clássica são empregados no capítulo conclusivo de nosso trabalho, que podemos dividir em quatro grandes tópicos: condensados gêmeos, estados de poço vazio, estados de vórtice e transição de fase.

Na primeira seção do capítulo 6, mostramos que a dinâmica semiclássica do modelo de poço triplo possui um subregime integrável, no qual dois modos locais permanecem em estados clássicos idênticos durante toda a evolução temporal, o que justifica denominá-los como condensados gêmeos. Também demonstramos que o subespaço de fase associado ao regime de condensados gêmeos é uma superfície esférica, cuja parametrização leva um subconjunto dos estados coerentes de $SU(3)$ em um conjunto completo de estados coerentes do subgrupo $SU(2)$. Portanto, a estrutura algébrica da dinâmica de condensados gêmeos é a mesma do modelo de dois poços, de maneira que podemos reaproveitar muitas

ferramentas utilizadas na seção 2.1, principalmente as representações clássicas e quânticas sobre a esfera de Bloch.

As órbitas regulares presentes no subregime de condensados gêmeos também exibem fenômenos populacionais bastante similares aos encontrados no modelo de dois modos, pois vemos que as trajetórias sobre a esfera de Bloch dividem-se entre os regimes de oscilação Josephson (OJ) e de auto-aprisionamento macroscópico (AAM), caracterizados respectivamente pela forte presença e supressão do tunelamento bosônico entre os poços da armadilha.

A dinâmica próxima aos pontos fixos estáveis de poço vazio exibe uma intensa desocupação em um dos modos locais, enquanto os outros dois poços dividem igualmente as partículas aprisionadas, excetuando pequenas flutuações populacionais. Os estados de poço vazio simbolizam uma nova possibilidade de supressão do tunelamento, na qual os dois modos populados permanecem em fase oposta, diferentemente do regime de AAM.

O último regime populacional estudado está relacionado aos estados de vórtice, caracterizados não somente por médias populacionais idênticas nos três poços de potencial, mas principalmente pela rotação persistente do condensado em torno do eixo de simetria da armadilha. Este fenômeno não é encontrado nas dinâmicas de condensados gêmeos e poço vazio, referentes aos chamados pontos fixos reais.

Grande parte dos resultados semiclássicos exibidos neste trabalho são comparados a cálculos quânticos exatos, pois pretendemos identificar as origens da quebra de correspondência quantitativa entre as duas abordagens. Além da utilização da pureza generalizada como medida de coerência do estado, também analisamos as representações quânticas de estados sobre o espaço de fase, empregando novamente os estados coerentes de $SU(3)$.

Devido a aspectos de ordem prática, projetamos as representações de estados nos subespaços populacional e configuracional, cujas coordenadas canônicas são as médias ocupacionais e as diferenças de fase coletiva, respectivamente. Utilizando estas distribuições quânticas podemos visualizar a delocalização de um estado sobre o espaço de fase, característica intimamente relacionada à coerência do sistema.

Devotamos a seção 6.6 ao estudo da transição de fase quântica existente no modelo de três modos para interações bosônicas atrativas. Entre os resultados desta análise está a utilização da pureza generalizada como medida “sinalizadora” da transição de fase para número finito de partículas aprisionadas, lembrando que podemos caracterizar formalmente a transição apenas no limite macroscópico.

Nossos resultados clássicos e quânticos indicam que o aumento da taxa de colisão entre bósons de um mesmo modo local suprime o tunelamento no sistema. A transição de fase quântica reflete este comportamento do modelo, pois manifesta a alteração das características do estado fundamental entre os regimes de OJ e AAM. As representações quânticas sobre o espaço de fase também exprimem esta modificação da dinâmica, exibida na forma de uma fragmentação das distribuições nos subespaços populacional e configuracional.

Também mostramos que o limite clássico-macroscópico exato da energia por partícula do estado fundamental pode ser obtido diretamente da aproximação análoga clássica. Neste contexto, a transição de fase corresponde a uma mudança do mínimo global da Hamiltoniana, provocada pelo aparecimento de três novos pontos fixos oriundos de bifurcações.

Finalmente, na subseção 6.6.1 analisamos a presença dos diferentes regimes dinâmicos em meio aos estados estacionários do Hamiltoniano do modelo. Calculando a fidelidade dos auto-estados de energia em relação aos estados coerentes centrados em cada um dos pontos de equilíbrio, somos capazes de associar determinadas regiões do espectro às diversas possibilidades de dinâmica regular e caótica presentes no sistema.

O capítulo 8 apresenta uma compilação de vários tópicos teóricos fundamentais, que contribuem ao entendimento mais aprofundado dos resultados exibidos neste trabalho. A leitura destes apêndices não é necessária à compreensão do corpo principal do texto, mas é indicada no caso de pouca familiaridade com algum tema presente nos capítulos anteriores. Enfim, o objetivo do último capítulo é aumentar a auto-suficiência desta dissertação.

Na seção 8.1, fazemos uma revisão da teoria introdutória de muitas partículas, com orientação evidente ao estudo de bósons idênticos. Então, somando estes resultados a elementos da teoria de grupos, estendemos o formalismo de pseudo-spins de Schwinger às representações totalmente simétricas de $SU(3)$.

A pureza generalizada é discutida profundamente na seção 8.2, onde demonstramos que os estados coerentes são os únicos que maximizam esta grandeza, sob certas hipóteses. Também apresentamos os conceitos de incerteza total da álgebra e emaranhamento independente da escolha de subsistemas.

Empregando o método análogo clássico, podemos determinar os correspondentes quânticos de várias concepções próprias da mecânica clássica. Na seção 8.3, exibimos definições consistentes de graus de liberdade, integrabilidade e caos para sistemas puramente quânticos.

Toda seção 8.4 é dedicada a demonstrar que os parênteses de Poisson, definidos de maneira natural no contexto do PVDT, podem reproduzir as relações de comutação de uma álgebra, se utilizamos seus estados coerentes associados como parametrização do espaço de fase generalizado.

O pseudopotencial de interação entre pares de partículas pouco energéticas é examinado na seção 8.5, na qual fazemos uma dedução completa desta aproximação e discutimos suas várias hipóteses, essenciais ao modelo de poço triplo.

Este capítulo é uma iniciação às principais idéias abordadas neste trabalho, pois aqui introduzimos grande parte dos conceitos e métodos utilizados no tratamento da dinâmica de um condensado de Bose-Einstein em um potencial de poço triplo.

Na seção 2.1 encontramos uma análise auto-suficiente da dinâmica de um condensado em poço duplo, que representa um exercício preparatório ao problema significantemente mais complexo de três modos. Portanto, apresentamos uma boa oportunidade para a assimilação da linguagem empregada no restante do texto, sem uma discussão onerosa dos fundamentos matemáticos utilizados.

Embora já exista uma vasta literatura teórica e experimental sobre o assunto [AGF⁺05, Hin05, KT02, dCdO, MCWW97, PW98, dC06], acrescentamos alguns novos resultados ao estudo do modelo de dois modos, em especial os cálculos referentes à presença de colisões cruzadas e à aplicação da pureza generalizada.

O tema da seção 2.2 é o princípio variacional dependente do tempo [SK81]. Esta ferramenta teórica merece maior atenção, pois é essencial na construção do método de aproximação análogo clássico, peça fundamental de nossos resultados. Nesta seção também introduzimos parte considerável da notação e terminologia empregada nos capítulos seguintes.

2.1 Modelo de Poço Duplo

O modelo do condensado em poço duplo é bastante conhecido na literatura teórica e experimental, como exemplo temos [AGF⁺05, dC06, dCdO, KT02, MCWW97]. Este modelo é bastante mais simples que o análogo em poço triplo que estudaremos adiante, mas muitas das características importantes na dinâmica de condensados acoplados já estão presentes. Devido à integrabilidade e unidimensionalidade efetiva deste modelo, a análise de sua dinâmica é bastante simplificada; no entanto, muitos dos métodos utilizados no estudo do modelo de três modos são úteis também aqui, de maneira que o estudo do caso de poço duplo é uma excelente primeira abordagem a toda uma família de problemas envolvendo condensados em potenciais de múltiplos poços.

De maneira geral, a dedução do modelo para o condensado em poço duplo é bastante parecida com o poço triplo, por isto vamos fazê-la de forma breve neste capítulo, enfatizando os pontos em que encontraremos diferenças no futuro.

Suponha um potencial de aprisionamento $V(\vec{r})$ com dois mínimos globais equivalentes. Por simplicidade, assumimos que o potencial seja harmônico simples de frequência ω nas direções y e z cartesianas, enquanto que na direção x o potencial apresente os dois mínimos simétricos característicos do modelo. Para uma partícula de massa m , podemos descrever o potencial por:

$$V(\vec{r}) = \frac{b}{q_0^2}(x^2 - q_0^2)^2 + \frac{m\omega^2}{2}(y^2 + z^2). \quad (2.1.1)$$

Sem perda de generalidade, escolhemos potencial zero nos mínimos. O parâmetro q_0 é a distância de cada mínimo à origem e bq_0^2 é altura da barreira de potencial entre os dois mínimos. Por conveniência, fazemos a seguinte escolha do parâmetro de ajuste b :

$$b = \frac{m\omega^2}{8}. \quad (2.1.2)$$

Com esta escolha, a aproximação harmônica do potencial em torno de cada um de seus mínimos torna-se um potencial harmônico tridimensional isotrópico. Denotando as posições dos mínimos por $\vec{r}_\pm = \pm q_0 \hat{x}$, as aproximações quadráticas são facilmente encontradas como:

$$V_\pm^{(2)}(\vec{r}) = \frac{m\omega^2}{2} [(x \mp q_0)^2 + y^2 + z^2]. \quad (2.1.3)$$

Se a distância $2q_0$ entre os mínimos for grande suficiente, podemos supor que $V_\pm(\vec{r})$ é uma boa aproximação do potencial de aprisionamento para os estados de energias mais baixas; ou seja, para uma partícula de baixa energia temos dois poços praticamente independentes. O estado fundamental de cada poço considerado independentemente é bastante conhecido:

$$u_\pm(\vec{r}) = \langle \vec{r} | u_\pm \rangle = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{4}} d^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{[(x \mp q_0)^2 + y^2 + z^2]}{2d^2}}. \quad (2.1.4)$$

Na última equação, d é a “largura” da gaussiana em cada uma das três dimensões espaciais, definida como:

$$d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (2.1.5)$$

Note que $|u_\pm\rangle$ satisfaz a equação $H_\pm|u_\pm\rangle = E|u_\pm\rangle$, onde $H_\pm = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_\pm^{(2)}(\vec{r})$ é o Hamiltoniano de partícula única em poço independente e $E = \frac{\hbar\omega}{2}$ é a sua energia fundamental.

Para $q_0 \gg d$, os dois estados $u_\pm(\vec{r})$ são praticamente ortogonais, de forma que sobreposição entre as funções de onda localizadas cai exponencialmente com o quadrado da razão $\frac{q_0}{d}$.

$$\varepsilon \equiv \langle u_+ | u_- \rangle = e^{-\frac{q_0^2}{d^2}} \ll 1. \quad (2.1.6)$$

Um esboço para potencial de poço duplo e as duas funções localizadas em cada mínimo, com sobreposição ε , é dado na figura 2.1.1.

Para uma única partícula sem spin, o Hamiltoniano completo do sistema é dado por:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8q_0^2}(x^2 - q_0^2)^2 + \frac{m\omega}{2}(y^2 + z^2). \quad (2.1.7)$$

Os estados $|u_\pm\rangle$ não são auto-estados de H , mas supondo que estes estados são praticamente ortogonais, $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} + \varepsilon(1 - \delta_{ij})$ para $i, j = \pm$, e que podemos modificar a altura da barreira de

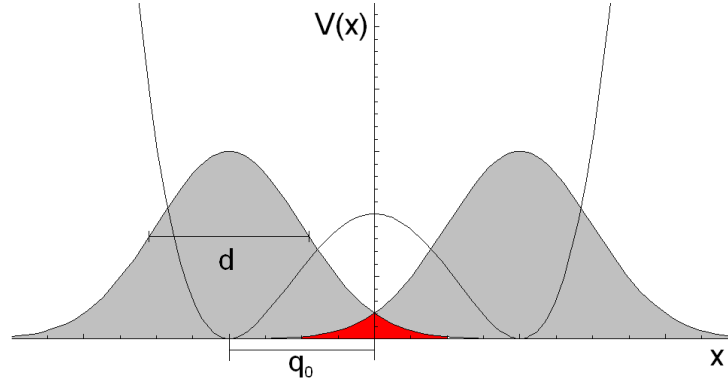


Figura 2.1.1: Estados fundamentais das aproximações harmônicas em torno de cada mínimo. Assumimos que a sobreposição destas funções é pequena para a validade do modelo.

potencial, ajustando a frequência ω e conseqüentemente o parâmetro b , de forma que os dois níveis mais baixos de energia para o Hamiltoniano (2.1.7), denotados por $|1\rangle$ e $|2\rangle$, sejam os únicos com energia menor que bq_0^2 e estejam distantes dos demais níveis de energia do espectro, como na figura 2.1.2, temos então que $|1\rangle$ e $|2\rangle$ são aproximadamente combinações lineares de $|u_{\pm}\rangle$. A pequena diferença entre H e um sistema de dois poços independentes gera o acoplamento entre os estados $|u_{\pm}\rangle$, estes de mínima energia nas aproximações harmônicas.

Agora, definimos o parâmetro de acoplamento g e a correção de energia Δ :

$$\begin{aligned} g &\equiv \langle u_{\mp} | \left(V(\vec{r}) - V_{\pm}^{(2)}(\vec{r}) \right) | u_{\pm} \rangle, \\ \Delta &\equiv \langle u_{\pm} | \left(V(\vec{r}) - V_{\pm}^{(2)}(\vec{r}) \right) | u_{\pm} \rangle; \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Então, podemos escrever os elementos de matriz do Hamiltoniano completo de partícula única:

$$\begin{aligned} \langle u_j | H | u_i \rangle &= \langle u_j | \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V_i^{(2)}(\vec{r}) \right) | u_i \rangle + \langle u_j | \left(V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r}) \right) | u_i \rangle \\ &= E [\delta_{ij} + \varepsilon(1 - \delta_{ij})] + \Delta \delta_{ij} + g(1 - \delta_{ij}) \\ &\equiv E' \delta_{ij} + \frac{\Omega}{2} (1 - \delta_{ij}), \quad \text{para } i, j = \pm. \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

Na equação (2.1.9) definimos também a energia $E' = E + \Delta$ dos estados $|u_{\pm}\rangle$, corrigida devido aos termos anarmônicos do potencial, e a taxa de tunelamento $\Omega = 2(g + \varepsilon E)$.

A representação aproximada do bloco de H no subespaço de interesse, gerado pela base praticamente ortogonal de estados $|u_{\pm}\rangle$ quando supomos $\varepsilon \ll 1$, já pode ser escrita:

$$H \doteq \left(\begin{array}{cc|c} E' & \frac{\Omega}{2} & 0 \\ \frac{\Omega}{2} & E' & 0 \\ \hline 0 & 0 & \ddots \end{array} \right). \quad (2.1.10)$$

Diagonalizando este bloco podemos obter os estados fundamentais $|1\rangle$ e $|2\rangle$, em termos de combinações lineares de $|u_{\pm}\rangle$, e suas auto-energias correspondentes, levando-se em conta aproximações até a primeira ordem em ε .

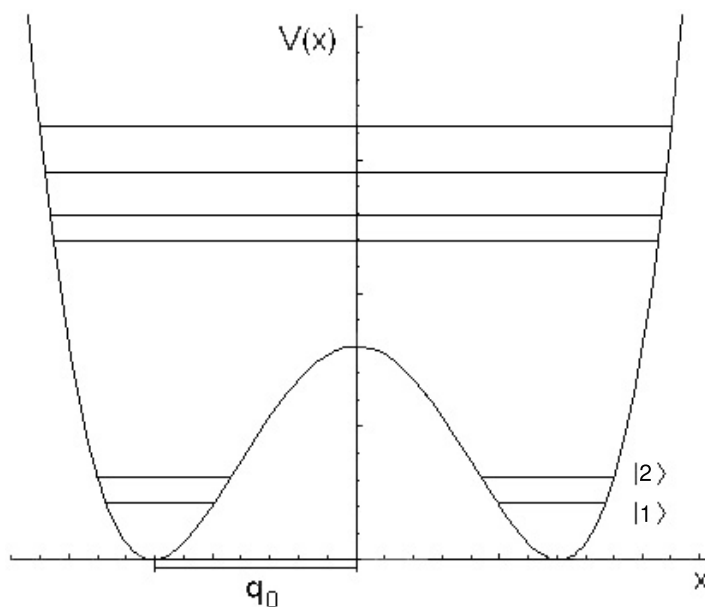


Figura 2.1.2: Estrutura do espectro de partícula única. Consideramos apenas os dois estados fundamentais com energia inferior a barreira de potencial entre os poços, enquanto os demais níveis de energia se encontram bem afastados.

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_+\rangle - |u_-\rangle), \quad E_1 = E' - \frac{\Omega}{2}; \\
 |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_+\rangle + |u_-\rangle), \quad E_2 = E' + \frac{\Omega}{2}.
 \end{aligned}
 \tag{2.1.11}$$

Vemos que a separação entre os dois níveis é Ω , em primeira ordem de aproximação.

Agora consideremos a situação para N partículas. Como tratamos de um CBE de partículas sem spin, esperamos que o sistema esteja muito próximo de seu estado fundamental, dada a baixíssima temperatura. Logo, os dois estados de mais baixa energia, que consideramos afastados dos demais e quase degenerados, são praticamente os únicos populados pelos bósons. Supomos ainda que a interação entre as partículas não seja forte o suficiente para alterar significativamente a estrutura de níveis de energia de partícula única.

Utilizando a linguagem da segunda quantização, podemos escrever o Hamiltoniano de muitas partículas $\hat{H}$ utilizando as equações (8.1.41') e (8.1.48), juntamente com o Hamiltoniano de partícula única (2.1.7). O potencial de interação entre as partículas $\mathcal{V}(\vec{r}; \vec{r}') = V_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ é aproximado por um pseudopotencial do tipo esfera-dura, segundo o apêndice 8.5. Já o operador de campo $\hat{\psi}$ pode ser expandido em uma base arbitrária segundo a equação (8.1.42). No entanto, por hipótese apenas os dois estados de menor energia estão populados e as funções $u_{\pm}(\vec{r})$ são aproximadamente ortonormais e formam uma base de funções no subespaço considerado, de maneira que podemos aproximar o operador de campo por apenas dois modos:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) \cong u_+(\vec{r})d_+ + u_-(\vec{r})d_-;
 \tag{2.1.12}$$

onde $d_{\pm}$ é o operador de aniquilação bosônico no estado $|u_{\pm}\rangle$, que segue as relações de comutação canônicas (8.1.22), (8.1.24) e (8.1.30).

Substituindo a aproximação de dois modos (2.1.12) na expressão para $\hat{H}$, juntamente com a expressão para o pseudopotencial, e notando que as funções $u_{\pm}(\vec{r})$ são reais, obtemos:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \int d^3r u_i(\vec{r}) H(\vec{r}) u_j(\vec{r}) d_i^\dagger d_j + \frac{V_0}{2} \sum_{i,j,k,l} \int d^3r u_i(\vec{r}) u_j(\vec{r}) u_k(\vec{r}) u_l(\vec{r}) d_i^\dagger d_j^\dagger d_k d_l; \quad (2.1.13)$$

na qual $i, j, k, l = \pm$. Agora, utilizando a equação (2.1.9) para os elementos de matriz do Hamiltoniano de partícula única, reescrevemos (2.1.13) como:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E' \sum_i d_i^\dagger d_i + \frac{\Omega}{2} \sum_{i \neq j} d_i^\dagger d_j + \frac{V_0}{2} \sum_i \int d^3r u_i^4(\vec{r}) d_i^{\dagger 2} d_i^2 \\ & + \frac{V_0}{2} \sum_{i \neq j} \int d^3r u_i^2(\vec{r}) u_j^2(\vec{r}) d_i^{\dagger 2} d_j^2 + V_0 \sum_{i \neq j} \int d^3r u_i^3(\vec{r}) u_j(\vec{r}) d_i^{\dagger 2} d_i d_j \\ & + V_0 \sum_{i \neq j} \int d^3r u_i^2(\vec{r}) u_j^2(\vec{r}) d_i^\dagger d_i d_j^\dagger d_j + V_0 \sum_{i \neq j} \int d^3r u_i^3(\vec{r}) u_j(\vec{r}) d_j^\dagger d_i^\dagger d_i^2. \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

Definimos então os parâmetros de colisão do sistema, para $i, j = \pm$ e $i \neq j$, lembrando que os dois poços são equivalentes devido à simetria de reflexão no plano $x = 0$:

$$\kappa \equiv \frac{V_0}{2} \int d^3r u_i^4(\vec{r}); \quad (2.1.15.a)$$

$$\eta \equiv \frac{V_0}{2} \int d^3r u_i^2(\vec{r}) u_j^2(\vec{r}); \quad (2.1.15.b)$$

$$\Lambda \equiv \frac{V_0}{2} \int d^3r u_i^3(\vec{r}) u_j(\vec{r}). \quad (2.1.15.c)$$

O parâmetro κ é denominado taxa de autocolisão, pois depende da função de onda de apenas um dos poços por meio da integral do módulo à quarta desta função. Os parâmetros η e Λ são chamados de taxas de colisão cruzada, pois dependem da sobreposição das funções de onda localizadas em poços distintos. Como esta sobreposição é bem pequena por hipótese, $\varepsilon \ll 1$, esperamos que estes parâmetros representem uma aproximação de ordem superior para as interações no sistema.

Podemos calcular o valor dos parâmetros de colisão em função de parâmetros dos potenciais de aprisionamento e de interação. Utilizando (2.1.4), calculamos as integrais das definições (2.1.15.a)-(2.1.15.c):

$$\kappa = \frac{V_0}{2^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} d^3}; \quad (2.1.15.a')$$

$$\eta = \kappa e^{-\frac{2q_0^2}{d^2}} = \kappa \varepsilon^2; \quad (2.1.15.b')$$

$$\Lambda = \kappa e^{-\frac{3q_0^2}{2d^2}} = \kappa \varepsilon^{\frac{3}{2}}. \quad (2.1.15.c')$$

Destas últimas equações vemos que apenas dois dos três parâmetros de colisão são independentes. Desta forma, escolhemos por conveniência κ e η como independentes, enquanto Λ é dado por:

$$\Lambda = \sqrt[4]{\eta^3 \kappa}. \quad (2.1.15.c'')$$

Então, com as definições de parâmetros de colisão, podemos reescrever (2.1.14) como:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E' \hat{N} + \frac{\Omega}{2} (d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+) + \kappa (d_+^{\dagger 2} d_+^2 + d_-^{\dagger 2} d_-^2) \\ & + \eta (d_+^{\dagger 2} d_-^2 + d_-^{\dagger 2} d_+^2) + 2\Lambda (d_+^{\dagger 2} d_+ d_- + d_-^{\dagger 2} d_- d_+) \\ & + 4\eta d_+^\dagger d_+ d_-^\dagger d_- + 2\Lambda (d_+^\dagger d_-^\dagger d_-^2 + d_-^\dagger d_+^\dagger d_+^2), \end{aligned} \quad (2.1.16)$$

onde $\hat{N} \equiv d_+^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_-$ é o operador do número total de partículas do sistema. Já que todos os termos de $\hat{H}$ conservam o número de partículas, o que implica na relação facilmente verificável $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$, podemos trabalhar apenas dentro de representações dos operadores do sistema nas quais $\hat{N}$ é N vezes o operador identidade. Segue da equação de Schrödinger que termos do Hamiltoniano dependentes apenas de operadores constantes não alteram a dinâmica do sistema, pois contribuem somente com uma fase global à evolução do estado, sem nenhum conteúdo físico. Portanto, como o número de partículas do sistema é constante e igual a N , podemos desprezar termos que só dependem do operador $\hat{N}$ e de outras constantes.

Utilizando as relações de comutação canônicas entre os operadores de criação e aniquilação podemos mostrar as seguintes identidades:

$$\begin{aligned} (d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+)^2 &= d_+^{\dagger 2} d_-^2 + d_-^{\dagger 2} d_+^2 + \hat{N} + 2d_+^\dagger d_+ d_-^\dagger d_-; \\ \hat{N}(\hat{N} - 2) &= d_+^{\dagger 2} d_+^2 + d_-^{\dagger 2} d_-^2 + 2d_+^\dagger d_+ d_-^\dagger d_- - \hat{N}; \\ d_+^{\dagger 2} d_-^2 + d_-^{\dagger 2} d_+^2 + 4d_+^\dagger d_+ d_-^\dagger d_- &= (d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+)^2 - d_+^{\dagger 2} d_+^2 - d_-^{\dagger 2} d_-^2 + \hat{N}(\hat{N} - 2); \\ (\hat{N} - 1)(d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+) &= d_+^{\dagger 2} d_+ d_- + d_-^{\dagger 2} d_- d_+ + d_+^\dagger d_-^\dagger d_-^2 + d_-^\dagger d_+^\dagger d_+^2. \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

Com as identidades (2.1.17) podemos deixar (2.1.16) em uma forma mais compacta e de mais fácil interpretação. Também descartando os termos constantes e substituindo $\hat{N}$ por seu autovalor completamente degenerado N , temos:

$$\hat{H} = \left[2\Lambda(N - 1) + \frac{\Omega}{2} \right] (d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+) + (\kappa - \eta)(d_+^{\dagger 2} d_+^2 + d_-^{\dagger 2} d_-^2) + \eta(d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+)^2. \quad (2.1.18)$$

Temos agora apenas três termos de interesse no Hamiltoniano. O primeiro termo de (2.1.18) é bilinear nos operadores de aniquilação e criação, de forma que cada operador bilinear constituinte aniquila uma partícula em um dos poços e a recria em outro, o que nos sugere prontamente denominar este termo como o operador de tunelamento. Se escolhermos um sistema de unidades tal que $\hbar = 1$, vemos que $\frac{\Omega}{2}$ é a frequência de tunelamento quando desconsideramos os parâmetros de colisão cruzada. Notando que o pré-fator do operador de tunelamento contém $2\Lambda(N - 1)$ além de $\frac{\Omega}{2}$, encontramos aqui também o maior motivo de não desprezarmos as taxas de colisão cruzada em nosso modelo. Mesmo que a grandeza dos parâmetros de colisão cruzada seja muito inferior à magnitude dos outros parâmetros, $\Lambda \ll \Omega, \kappa$, o fator $2\Lambda(N - 1)$ ainda pode ser significativo, pois o número de partículas pode ser muito

grande. A condição $N \gg 1$ geralmente é satisfeita nos experimentos típicos com condensados, nos quais o número de partículas varia de algumas centenas à ordem de 10^{10} [Leg01].

O segundo termo de (2.1.18) é denominado de termo de autocolisão, pois envolve produtos biquadráticos dos operadores de criação e aniquilação com origem na interação entre partículas localizadas no mesmo sítio, de maneira que cada um destes produtos envolve operadores relativos a apenas um poço da armadilha. Vemos que a taxa de autocolisão efetiva é $\kappa - \eta$, insignificamente menor que o esperado se desconsideramos a colisão cruzada.

O último termo no Hamiltoniano existe somente quando consideramos colisões cruzadas e representa a interação entre partículas localizadas em sítios distintos. Mesmo que o efeito deste último termo seja bem pequeno, vamos considerar por consistência todos os termos oriundos da colisão cruzada e assim analisar seus efeitos na dinâmica do sistema.

Neste ponto, trocamos a representação dos operadores geradores do grupo dinâmico do sistema^{2.1}, utilizando os operadores de quasi-spin de Schwinger [Sch65, Sak94]. Assim substituímos a álgebra dos operadores de aniquilação e criação em dois modos pela também já familiar álgebra geradora de $SU(2)$. Então, definimos os três operadores da base de $su(2)$:

$$J_x \equiv \frac{d_-^\dagger d_- - d_+^\dagger d_+}{2}; \quad (2.1.19.a)$$

$$J_y \equiv i \frac{d_-^\dagger d_+ - d_+^\dagger d_-}{2}; \quad (2.1.19.b)$$

$$J_z \equiv \frac{d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+}{2}. \quad (2.1.19.c)$$

Estes operadores satisfazem a consagrada relação de comutação de momento angular ou da álgebra $su(2)$:

$$[J_j, J_k] = i\varepsilon_{jkl}J_l; \quad j, k, l = x, y, z. \quad (2.1.20)$$

Os operadores J_i , que geram as transformações infinitesimais do grupo $SU(2)$ sobre o sistema, não têm aqui a conotação de operadores de momento angular, mas uma interpretação apropriada ainda pode ser encontrada de maneira simples. O gerador J_x , por exemplo, fornece a metade da diferença de população entre os condensados localizados nos dois poços, já que $\hat{n}_\pm = d_\pm^\dagger d_\pm$ é o operador de número de partículas do condensado localizadas no poço de mínimo $\vec{r}_\pm$. Logo, J_x é bastante interessante como indicador da distribuição espacial do condensado. Vemos diretamente, em comparação com o Hamiltoniano (2.1.18), que J_z é proporcional ao operador responsável pelo tunelamento entre os dois poços.

Agora, uma interpretação ainda mais adequada dos operadores da base de $su(2)$ pode ser encontrada utilizando a teoria quântica de muitas partículas. Na equação (8.1.41) do apêndice, temos que um operador de um corpo aditivo O pode ser escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação. Considerando a aproximação de dois modos, reescrevemos este resultado:

$$\hat{O} = \sum_{i,j=\pm} \langle u_i | O | u_j \rangle d_i^\dagger d_j. \quad (2.1.21)$$

^{2.1}O conceito de grupo dinâmico é abordado na seção 8.3.

Podemos calcular facilmente os elementos de matriz do operador de posição de partícula única x entre as funções localizadas (2.1.4):

$$\langle u_j | x | u_k \rangle = k q_0 \delta_{jk}; \quad j, k = \pm. \quad (2.1.22)$$

Substituindo estes elementos de matriz em (2.1.21), encontramos o operador de distribuição de posição do condensado:

$$\hat{x} = -2q_0 J_x. \quad (2.1.23)$$

Na linguagem da segunda quantização, vemos que o operador de posição ao longo do eixo x é proporcional a J_x , como esperado. Uma interpretação semelhante para operador de momento linear de partícula única p_x pode ser encontrada. Neste escopo calculamos os seguintes elementos de matriz:

$$\langle u_j | p_x | u_k \rangle = -ik \frac{q_0}{d^2} \varepsilon (1 - \delta_{jk}); \quad j, k = \pm. \quad (2.1.24)$$

Novamente utilizando (2.1.21), encontramos o operador de distribuição de momento linear do condensado:

$$\hat{p}_x = -\frac{2q_0 \varepsilon}{d^2} J_y. \quad (2.1.25)$$

Logo, J_y é proporcional ao operador de momento linear do condensado na direção x . Outro operador interessante é o Casimir quadrático $\vec{J}^2$, cujos autovalores rotulam as representações irredutíveis de $SU(2)$. Podemos verificar facilmente que:

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{\hat{N}}{2} \left(\frac{\hat{N}}{2} + 1 \right). \quad (2.1.26)$$

Portanto, o número de partículas N especifica unicamente uma representação irredutível de $SU(2)$ e, como o número de partículas é constante, vemos que a dinâmica do sistema se restringe ao espaço de estados em que age apenas a representação irredutível de $SU(2)$ com $J = \frac{N}{2}$.

Conhecidas as interpretações dos operadores da base de $su(2)$, usamos as relações canônicas de comutação bosônicas, juntamente com uma das identidades de (2.1.17) e a definição dos operadores de Schwinger de $SU(2)$, para mostrar a seguinte igualdade:

$$4J_x^2 + \hat{N}(\hat{N} - 2) = 2(d_+^{\dagger 2} d_+^2 + d_-^{\dagger 2} d_-^2). \quad (2.1.27)$$

Com esta identidade podemos reescrever mais uma vez o Hamiltoniano do sistema, desconsiderando termos constantes:

$$\hat{H} = [4\Lambda(N - 1) + \Omega] J_z + 2(\kappa - \eta) J_x^2 + 4\eta J_z^2. \quad (2.1.28)$$

Este Hamiltoniano é ideal para a construção de um análogo clássico ao sistema com apenas um grau de liberdade, assunto da próxima subseção. Esta expressão também facilita a análise da dinâmica quântica do modelo que fazemos, de maneira geral, numericamente. Daqui em diante, no estudo do modelo, vamos considerar apenas a região de parâmetros tal que $\Omega, \kappa > 0$, seguindo o que foi feito nos trabalhos [dCdO, MCWW97].

2.1.1 Análogo Clássico ao Modelo de Dois Modos.

Para obtermos a Hamiltoniana análoga clássica do sistema $\mathcal{H}(\theta, \phi)$, fazemos a média de (2.1.28) nos chamados estados coerentes de momento angular ou atômicos, associados à álgebra $su(2)$.

$$\mathcal{H}(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | \hat{H} | \theta, \phi \rangle. \quad (2.1.29)$$

Para uma extensa discussão sobre os estados coerentes de momento angular, em comparação com os estados coerentes do oscilador harmônico, veja [ACGT72]. Aqui mostramos apenas os resultados necessários destes estados e deixamos uma discussão mais extensa apenas para os estados coerentes de $su(3)$, presentes nos próximos capítulos de nosso trabalho.

Os estados coerentes de momento angular são obtidos aplicando-se uma rotação em três dimensões ao estado de momento angular de menor projeção no eixo cartesiano z , cuja notação usual é $|J, M = -J\rangle$. Este procedimento é análogo ao utilizado na definição do estado coerente do oscilador harmônico, que é obtido a partir de um deslocamento no espaço de fase do estado do oscilador com zero quantum de energia ou estado de vácuo.

De agora em diante, vamos utilizar em nossa análise a base bastante familiar que diagonaliza simultaneamente os operadores $\vec{J}^2$ e J_z , definida por:

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |J, M\rangle &= J(J+1) |J, M\rangle, \quad J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots; \\ J_z |J, M\rangle &= M |J, M\rangle, \quad M = -J, -J+1, \dots, J-1, J. \end{aligned} \quad (2.1.30)$$

Note que escolhemos o sistema de unidades tal que $\hbar = 1$. Também devemos lembrar que para um número de partículas constante apenas a representação com $J = \frac{N}{2}$ está envolvida no problema. Para obter o estado coerente atômico $|\theta, \phi\rangle$, aplicamos a $|J, -J\rangle$ uma rotação R descrita pelos ângulos θ e ϕ , por sua vez representados na figura 2.1.3. A rotação de θ é feita em torno do eixo $\hat{n}$, versor normal ao plano de rotação do estado:

$$|\theta, \phi\rangle = R(\theta, \phi) |J, -J\rangle = e^{-i\theta \vec{J} \cdot \hat{n}} |J, -J\rangle = e^{-i\theta (J_x \sin \phi - J_y \cos \phi)} |J, -J\rangle. \quad (2.1.31)$$

Após alguma álgebra, pode-se mostrar que (2.1.31) fornece uma expansão útil do estado coerente nos estados $|J, M\rangle$ de (2.1.30):

$$|\theta, \phi\rangle \equiv |\tau\rangle = \sum_{M=-J}^J \sqrt{\binom{2J}{M+J}} \frac{\tau^{M+J}}{(1+|\tau|^2)^J} |J, M\rangle. \quad (2.1.32)$$

Em (2.1.32), definimos $\tau \equiv e^{-i\phi} \tan \frac{\theta}{2}$. Este número complexo pode ser usado como rótulo do estado coerente em vez do par de ângulos na esfera, pois os dois conjuntos se correspondem biunivocamente, exceto em $\theta = 0$ e $\theta = \pi$, onde ϕ é indeterminado. Contudo, esta exceção não gera grandes complicações.

Com a expansão (2.1.32) em mãos, podemos calcular a média (2.1.29). Como passos intermediários precisamos calcular $\langle \tau | J_z | \tau \rangle$, $\langle \tau | J_z^2 | \tau \rangle$ e $\langle \tau | J_x^2 | \tau \rangle$. Utilizando identidades binomiais e (2.1.30), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \tau | J_z | \tau \rangle &= -J \frac{1-|\tau|^2}{1+|\tau|^2}; \\ \langle \tau | J_z^2 | \tau \rangle &= J^2 - 2J \frac{(2J-1)|\tau|^2}{(1+|\tau|^2)^2}. \end{aligned} \quad (2.1.33)$$

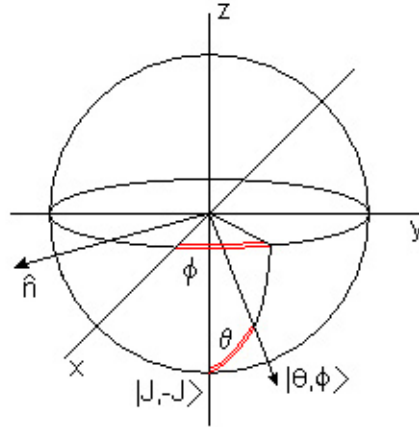


Figura 2.1.3: Esquema de rotação do estado de momento angular de menor projeção no eixo z , denotado por $|J, -J\rangle$. Os ângulos de rotação são indicados pela cor diferenciada na figura. Note que a definição destes ângulos é semelhante aos ângulos em coordenadas esféricas, mas nossa origem do ângulo θ é situada no semi-eixo z negativo, diferentemente do usual.

Para calcular $\langle \tau | J_x^2 | \tau \rangle$ precisamos lembrar primeiro da definição dos operadores de abaixamento e levantamento $J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$, usuais quando tratamos do grupo $SU(2)^{2.2}$. Os operadores $J_{\pm}$ são facilmente aplicados nos estados $|J, M\rangle$:

$$J_{\pm} |J, M\rangle = \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} |J, M \pm 1\rangle. \quad (2.1.34)$$

Da definição dos operadores $J_{\pm}$ e de $\vec{J}^2$ temos que $J_x^2 = \frac{J_+^2 + J_-^2 + \vec{J}^2 - J_z^2}{4}$, então basta calcular as médias nos estados coerentes de cada um destes termos para obtermos a última média desejada. Usando (2.1.34) podemos calcular as médias dos operadores J_+^2 e J_-^2 , novamente utilizando identidades binomiais. A média de $\vec{J}^2$ pode ser calculada facilmente utilizando (2.1.30), enquanto a média de J_z^2 já foi obtida em (2.1.33). Somando todos estes termos:

$$\langle \tau | J_x^2 | \tau \rangle = \frac{J(2J-1)}{2(1+|\tau|^2)^2} (\tau + \tau^*)^2 + \frac{J}{2}. \quad (2.1.35)$$

Por fim, substituindo as médias (2.1.33) e (2.1.35) em (2.1.29), encontramos a Hamiltoniana semi-clássica nas variáveis dinâmicas τ e τ^* . Também descartando termos constantes, que não alteram a dinâmica do sistema, obtemos:

$$\mathcal{H}(\tau, \tau^*) = -J\Omega' \frac{1 - \tau^* \tau}{1 + \tau^* \tau} + (\kappa - \eta) \frac{J(2J-1)}{(1 + \tau^* \tau)^2} (\tau^* + \tau)^2 - 8\eta \frac{J(2J-1)\tau^* \tau}{(1 + \tau^* \tau)^2}, \quad (2.1.36)$$

onde devemos lembrar que $J = \frac{N}{2}$. Por simplicidade, definimos também a taxa de tunelamento efetiva:

$$\frac{\Omega'}{2} \equiv \frac{\Omega}{2} + 2\Lambda(N-1). \quad (2.1.37)$$

Por completeza, utilizando a relação $\tau = e^{-i\phi} \tan \frac{\theta}{2}$ em (2.1.36), podemos também encontrar a energia do sistema em termos das variáveis angulares:

^{2.2}Formalmente, os operadores $J_{\pm}$, juntamente com J_z , formam uma base para a álgebra complexificada $su^*(2) = sl(2)$, geradora do grupo $SL(2)$.

$$\frac{\mathcal{H}(\theta, \phi)}{J} = -\Omega' \cos \theta + (2J - 1) \sin^2 \theta [(\kappa - \eta) \cos^2 \phi - 2\eta]. \quad (2.1.36')$$

As equações de movimento para as variáveis angulares θ e ϕ na esfera ou para as variáveis complexas τ e τ^* , consideradas independentemente, podem ser deduzidas do princípio variacional dependente do tempo. Mas, neste ponto, é conveniente uma transformação para variáveis canônicas de coordenada e momento, de maneira que as equações de movimento assumem a forma usual das equações de Hamilton. A transformação para as variáveis canônicas q e p é dada por:

$$\tau = \frac{q + ip}{\sqrt{4J - q^2 - p^2}}. \quad (2.1.38)$$

Note que o espaço de fase permitido a q e p é limitado, já que $|\tau|^2 \rightarrow \infty$ quando $q^2 + p^2 \rightarrow 4J$; ou seja, o espaço de fase é um círculo de raio $2\sqrt{J}$ nestas variáveis. Aplicando a transformação em (2.1.36), temos a Hamiltoniana em variáveis canônicas:

$$\mathcal{H} = \Omega' \frac{(q^2 + p^2 - 2J)}{2} + \frac{(\kappa - \eta)(2J - 1)}{4J} q^2 (4J - q^2 - p^2) + \frac{\eta(2J - 1)}{2J} (q^2 + p^2)(q^2 + p^2 - 4J). \quad (2.1.39)$$

Agora podemos escrever facilmente as equações canônicas de movimento, utilizando as equações canônicas de Hamilton.

$$\begin{cases} \dot{q} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}; \\ \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \end{cases} \quad (2.1.40)$$

Calculando as derivadas de (2.1.39) segundo (2.1.40), obtemos as equações de movimento clássicas do sistema:

$$\begin{cases} \dot{q} &= \Omega' p - (\kappa - \eta) \frac{(2J-1)}{2J} q^2 p + \eta \frac{(2J-1)}{J} p (2q^2 + 2p^2 - 4J); \\ \dot{p} &= -\Omega' q - (\kappa - \eta) \frac{(2J-1)}{2J} q (4J - 2q^2 - p^2) - \eta \frac{(2J-1)}{J} q (2q^2 + 2p^2 - 4J). \end{cases} \quad (2.1.41)$$

Até aqui, as Hamiltonianas e as equações de movimento mantiveram uma estrutura de três termos: o primeiro termo de tunelamento, o segundo de autocolisão e o terceiro devido somente à colisão cruzada entre os condensados localizados.

Buscamos agora os pontos de equilíbrio do sistema Hamiltoniano (2.1.41). Impondo $\dot{q} = \dot{p} = 0$, encontramos quatro conjuntos de pontos fixos:

$$q = p = 0, \text{ solução trivial}; \quad (2.1.42.a)$$

$$q = \pm \sqrt{\frac{R^2(k-n) + \frac{\Omega'}{2}}{2(k-n)}} \text{ e } p = 0; \quad (2.1.42.b)$$

$$q = 0 \text{ e } p = \pm \sqrt{\frac{R^2 n - \frac{\Omega'}{2}}{2n}}; \quad (2.1.42.c)$$

$$q = \pm \sqrt{\frac{R^2 n + \frac{\Omega'}{2}}{k}} \text{ e } p = \pm \sqrt{\frac{R^2(k-n) - \frac{\Omega'}{2}}{k}}, \text{ com quatro possíveis escolhas dos sinais.} \quad (2.1.42.d)$$

Por simplicidade, nas últimas equações definimos os parâmetros auxiliares $k \equiv (\kappa - \eta) \frac{2J-1}{4J}$, $n \equiv \eta \frac{(2J-1)}{2J}$ e $R \equiv 2\sqrt{J}$. Note que R é o raio do espaço de fase nas variáveis q e p .

Os pontos de equilíbrio do sistema ficam mais claros se visualizados na esfera de raio unitário da figura 2.1.3, conhecida também como esfera de Bloch nestas circunstâncias. Recordando de $\tau = e^{-i\phi} \tan \frac{\theta}{2}$ e da transformação (2.1.38), podemos escrever a relação inversa entre as variáveis canônicas e os ângulos θ e ϕ :

$$\begin{aligned}\theta &= 2 \arctan(|\tau|) = 2 \arctan\left(\sqrt{\frac{q^2+p^2}{R^2-q^2-p^2}}\right), \quad \theta \in [0, \pi]; \\ \phi &= -\arctan\left(\frac{i(\tau^*-\tau)}{\tau^*+\tau}\right) = -\arctan\left(\frac{p}{q}\right), \quad \phi \in [0, 2\pi).\end{aligned}\tag{2.1.43}$$

A vantagem da visualização na esfera de Bloch é que as médias dos operadores J_x , J_y e J_z são simplesmente as projeções do estado coerente, representado por um ponto na superfície da esfera, em cada um dos eixos coordenados, a menos de um fator de normalização J . Ou seja, calculando as médias $\langle \tau | J_x | \tau \rangle$, $\langle \tau | J_y | \tau \rangle$ e $\langle \tau | J_z | \tau \rangle$, de maneira análoga ao que já foi feito em (2.1.33) e (2.1.35), e então substituindo a definição de τ em termos dos ângulos sobre a superfície esférica, obtemos:

$$\begin{aligned}\langle \tau | J_x | \tau \rangle &= \frac{J}{1+|\tau|^2}(\tau^* + \tau) = J \cos \phi \sin \theta; \\ \langle \tau | J_y | \tau \rangle &= -i \frac{J}{1+|\tau|^2}(\tau^* - \tau) = J \sin \phi \sin \theta; \\ \langle \tau | J_z | \tau \rangle &= -J \frac{(1-|\tau|^2)}{(1+|\tau|^2)} = -J \cos \theta.\end{aligned}\tag{2.1.44}$$

Assim vemos que as médias dos três geradores de $SU(2)$ são facilmente especificadas pelos ângulos θ e ϕ , de forma semelhante à relação entre as coordenadas esféricas e cartesianas de um ponto cuja distância à origem é J , exceto pelo sinal contrário em J_z , que decorre da diferença entre as definições de θ das coordenadas esféricas e do estado coerente, de acordo com a figura 2.1.3.

Agora, utilizando (2.1.43), encontramos as localizações dos pontos fixos (2.1.42.a)-(2.1.42.d) na esfera de Bloch, dados a seguir na mesma ordem:

$$\theta = 0, \phi \text{ indeterminado}; \tag{2.1.42.a'}$$

$$\theta = 2 \arctan\left(\sqrt{\frac{R^2(k-n) + \frac{\Omega'}{2}}{R^2(k-n) - \frac{\Omega'}{2}}}\right), \phi = \begin{cases} 0, & \text{para } q > 0 \\ \pi, & \text{para } q < 0 \end{cases}; \tag{2.1.42.b'}$$

$$\theta = 2 \arctan\left(\sqrt{\frac{R^2n - \frac{\Omega'}{2}}{R^2n + \frac{\Omega'}{2}}}\right), \phi = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & \text{para } p < 0 \\ -\frac{\pi}{2}, & \text{para } p > 0 \end{cases}; \tag{2.1.42.c'}$$

$$\theta = \pi, \phi = \begin{cases} +\arctan\left(\sqrt{\frac{R^2(k-n) - \frac{\Omega'}{2}}{R^2n + \frac{\Omega'}{2}}}\right), & \text{para } qp < 0 \\ -\arctan\left(\sqrt{\frac{R^2(k-n) - \frac{\Omega'}{2}}{R^2n + \frac{\Omega'}{2}}}\right), & \text{para } qp > 0 \end{cases}. \tag{2.1.42.d'}$$

Comparando as equações (2.1.42.a)-(2.1.42.d) com (2.1.42.a')-(2.1.42.d') obtemos várias informações úteis. Primeiramente, vemos em (2.1.42.b') que θ fica indefinido (o argumento da arcotangente fica imaginário) se $\frac{\Omega'}{2} > R^2(k-n)$. Já esperávamos este comportamento de (2.1.42.b), pois quando $\frac{\Omega'}{2} > R^2(k-n)$ temos que $q^2 > R^2$ e o ponto de equilíbrio está fora do espaço de fase. Em (2.1.42.c'), vemos que θ é indefinido se $\frac{\Omega'}{2} > R^2n$, o que também era esperado de (2.1.42.c), pois neste caso o momento p assume valores imaginários. Por fim, note que os quatro pontos fixos do conjunto (2.1.42.d) representam o mesmo ponto $\theta = \pi$ na esfera de Bloch. Para estes pontos, a possível indeterminação em ϕ quando $\frac{\Omega'}{2} > R^2(k-n)$ não é relevante, pois nos pólos somente o ângulo θ é suficiente na descrição do estado. Logo, vemos também que a borda do espaço de fase $q^2 + p^2 = R^2$ representa apenas um estado com $\theta = \pi$ e ϕ indeterminado sobre a esfera. Desta forma, concluímos que não é necessário descartar os pontos fixos de (2.1.42.d) quando $\frac{\Omega'}{2} > R^2n$ e p se torna imaginário, pois estes quatro pontos representam o único estado bem determinado por $\theta = \pi$, para todos valores dos parâmetros.

Como próximo passo na análise do problema clássico, vamos estudar a estabilidade do sistema de equações de movimento nas proximidades de cada ponto de equilíbrio [dA95]. Para este fim, precisamos calcular nos pontos fixos os autovalores de:

$$A \equiv \mathbb{J}\mathbb{H} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q^2} & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p \partial q} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p \partial q} & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p^2} \end{pmatrix}. \quad (2.1.45)$$

As segundas derivadas de $\mathcal{H}$ são facilmente calculadas para substituição em $\mathbb{H}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q^2} &= \Omega' + 2k(R^2 - 6q^2 - p^2) + 2n(6q^2 + 2p^2 - R^2); \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p \partial q} &= 4(2n - k)pq; \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p^2} &= \Omega' - 2kq^2 + 2n(2q^2 + 6p^2 - R^2). \end{aligned} \quad (2.1.46)$$

Como lidamos com um sistema Hamiltoniano de apenas um grau de liberdade, temos apenas três possibilidades para a dupla de autovalores λ de (2.1.45):

- I. São ambos nulos, $\lambda = 0$.
- II. Formam um par de números puramente imaginários complexo conjugados, $\lambda = \pm i\alpha$ com $\alpha \in \mathbb{R}$.
- III. Par de números reais de mesmo valor absoluto e sinais opostos, $\lambda = \pm\alpha$ com $\alpha \in \mathbb{R}$.

Se os autovalores são puramente imaginários o ponto fixo é estável, no caso contrário é instável.

Como consideramos até aqui que os efeitos de autocolisão são muito mais fortes que os de colisão cruzada, pois $\kappa \gg \eta$, na seguinte análise de estabilidade consideramos sempre que $k > n$. Então, calculando os autovalores de (2.1.45) em cada ponto fixo enumerado em (2.1.42.a)-(2.1.42.d), temos os seguintes autovalores e condições de estabilidade:

- No ponto fixo (2.1.42.a), A tem autovalores:

$$\lambda = \pm 2\sqrt{\left(R^2n - \frac{\Omega'}{2}\right) \left[\frac{\Omega'}{2} + R^2(k-n)\right]}. \quad (2.1.47.a)$$

Logo, o ponto é instável se $\frac{\Omega'}{2} \leq R^2 n \leq \frac{\Omega'}{2} + R^2 k$. A condição $R^2 n \leq \frac{\Omega'}{2} + R^2 k$ sempre é satisfeita, já que $k > n$. A condição $\frac{\Omega'}{2} \leq R^2 n$ é equivalente a $(2\Lambda(N-1) + \frac{\Omega}{2}) \leq 2\eta(N-1)$, como por hipótese $\Omega \gg \eta$ e $\Lambda > \eta$, temos que esta segunda condição geralmente não é satisfeita e este ponto fixo é estável para todo domínio aplicável de parâmetros.

- O par de pontos de equilíbrio (2.1.42.b) somente está definido se $R^2(k-n) \geq \frac{\Omega'}{2}$. Para este conjunto temos os seguintes autovalores de (2.1.45):

$$\lambda = \pm 2 \sqrt{\frac{k}{(k-n)} \left[\frac{\Omega'}{2} - R^2(k-n) \right] [R^2(k-n) + 2\Omega']}. \quad (2.1.47.b)$$

Portanto, estes pontos são estáveis se $R^2(k-n) > \frac{\Omega'}{2}$. Ou seja, estes dois pontos de equilíbrio são estáveis em toda região de parâmetros onde estão definidos, exceto na curva crítica $R^2(k-n) = \frac{\Omega'}{2}$, onde eles estão localizados em $\theta = \pi$, juntamente com o ponto de (2.1.42.d).

- O outro par de pontos de equilíbrio (2.1.42.c) somente existe quando $\frac{\Omega'}{2} \leq R^2 n$, caso contrário a variável de momento p assume valor imaginário puro. Como vimos anteriormente, esta condição geralmente não é satisfeita, devido às hipóteses do modelo que levam a $\Omega \gg \eta$. Mesmo que de maneira geral este ponto não exista em nosso problema físico, por completeza calculamos os autovalores de A nestes pontos fixos:

$$\lambda = \pm 2 \sqrt{R^2 \left(\frac{\Omega'}{2} - R^2 n \right)}. \quad (2.1.47.c)$$

Então, estes pontos são estáveis se $\frac{\Omega'}{2} < R^2 n$; ou seja, em todo seu domínio de existência exceto no caso em que $p = 0$, quando recaímos no ponto fixo trivial. Contudo, devido às hipóteses do modelo, o domínio de parâmetros em que este ponto existe e é estável não é de nosso interesse.

- Por fim, para o quarteto (2.1.42.d), que representa o único ponto $\theta = \pi$ na esfera de Bloch, temos os autovalores:

$$\lambda = \pm \frac{4}{k} \sqrt{(8n^2 - 8kn + k^2) \left(\frac{\Omega'}{2} + R^2 n \right) \left[R^2(k-n) - \frac{\Omega'}{2} \right]}. \quad (2.1.47.d)$$

Desta forma, este último grupo de pontos fixos é instável se $R^2(k-n) \geq \frac{\Omega'}{2}$, justamente a condição contrária de estabilidade do par (2.1.42.b). Então, quando os dois pontos de equilíbrio (2.1.42.b) partem estáveis de $\theta = \pi$ em $R^2(k-n) = \frac{\Omega'}{2}$, o ponto fixo de (2.1.42.d) se torna instável, caracterizando uma bifurcação.

Vemos então que a relação de estabilidade mais importante que obtivemos é $R^2(k-n) > \frac{\Omega'}{2}$, equivalente a $(\kappa - 3\eta)(N-1) > 2\Lambda(N-1) + \frac{\Omega}{2}$, pois quando esta condição é satisfeita o segundo conjunto de pontos fixos é estável, enquanto o quarto conjunto é instável, resultando em uma transição característica do sistema. Resumindo, a curva crítica que descreve a relação entre os parâmetros do sistema para que ocorra uma bifurcação no ponto $\theta = \pi$ do espaço de fase generalizado é dada por:

$$(\kappa - 3\eta)(N-1) = 2\Lambda(N-1) + \frac{\Omega}{2}. \quad (2.1.48)$$

Se os efeitos das colisões cruzadas fossem desconsiderados, a condição de bifurcação seria apenas $\kappa = \frac{\Omega}{2(N-1)}$. Como geralmente $N \gg 1$, podemos aproximar a condição sem colisão cruzada por $\kappa = \frac{\Omega}{2N}$.

A mudança de comportamento dos pontos fixos com a variação dos parâmetros do potencial de aprisionamento, principalmente o surgimento de uma bifurcação, pode ser uma marca da mudança de regime dinâmico do sistema como um todo. Verificamos esta afirmação analisando a evolução temporal do sistema por meio de soluções numéricas das equações de movimento (2.1.41) para diferentes valores dos parâmetros κ e η , mas conservando N e Ω fixos. Encontrados os valores de $p(t)$ e $q(t)$ em uma determinada trajetória, podemos visualizá-la na esfera de Bloch utilizando as transformações inversas (2.1.43).

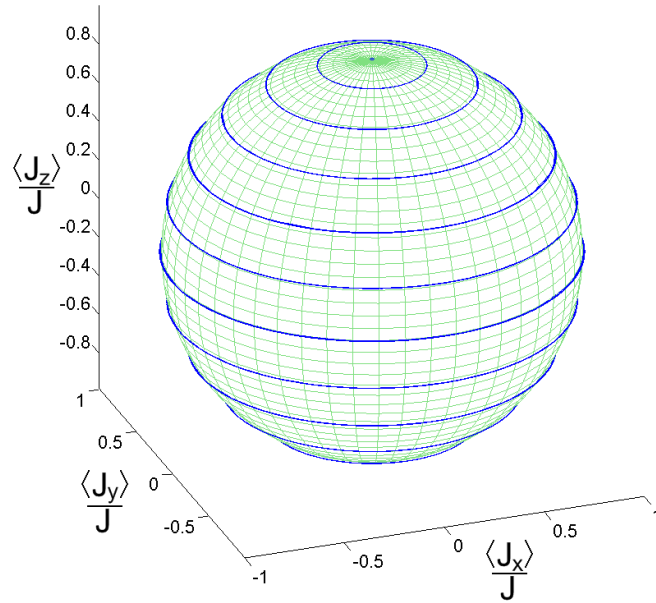


Figura 2.1.4: Trajetórias do sistema na esfera de Bloch para caso de partículas não interagentes. Aqui $N = 100$ e $\kappa = \eta = 0$.

Na figura 2.1.4 temos trajetórias sobre a esfera de Bloch para várias condições iniciais no caso em que “desligamos” as interações entre as $N = 100$ partículas, fazendo $\kappa = \eta = 0$. Escolhemos o sistema de unidades tal que $\Omega = 1$ e $\hbar = 1$, o que equivale a tomar Ω como a unidade de frequência. Vemos que todas as trajetórias são circulares e contidas em planos com $\langle J_z \rangle$ constante. O fato da média de J_z não variar dentro de uma trajetória sem interações entre as partículas é óbvio de (2.1.28). Se $\kappa = \eta = 0$, então $\hat{H}$ é proporcional a J_z e conseqüentemente $[\hat{H}, J_z] = 0$. Portanto, o valor médio $\langle \tau | J_z | \tau \rangle$ é uma constante do movimento proporcional a energia conservada no sistema.

Também na figura 2.1.4, vemos que os valores médios de J_x e J_y oscilam harmonicamente entre os valores máximos permitidos pela imposição $\langle J_z \rangle = \text{constante}$. Segundo (2.1.23), J_x é proporcional ao operador de distribuição de posição do condensado na representação de campo, também interpretado como o balanço populacional entre os poços, de maneira que sua média é positiva (negativa) se poço em $\vec{r}_-$ ($\vec{r}_+$) estiver mais populado. Portanto, as trajetórias encontradas sobre a esfera de Bloch indicam que as partículas do condensado tunelam a barreira de potencial coerentemente, fazendo com que a população dos dois poços varie de maneira harmônica. Este fenômeno de tunelamento, em que os dois poços trocam constantemente uma porção de seus bósons sem que exista um poço preferencial, é denominado **oscilação de Josephson** e representa um dos regimes dinâmicos possíveis para um CBE

em poço duplo.

Já na figura 2.1.5, analisamos os efeitos de autocolisão no condensado; ou seja, consideramos a colisão entre partículas situadas em um mesmo poço, mas ainda desprezamos os efeitos de colisão entre partículas localizadas em poços distintos. Nestes gráficos mantivemos $N = 100$ e unidade de tempo tal que $\Omega = 1$. No caso em que $\eta = 0$ e $N \gg 1$, a bifurcação ocorre em $\theta = \pi$ quando $\kappa = \frac{1}{2N}$, por este motivo mostramos na figura 2.1.5 gráficos com valores de κ inferiores e superiores a este valor crítico.

No gráfico 2.1.5.a temos um valor consideravelmente inferior ao crítico, $\kappa = \frac{0,5}{2N}$. Neste gráfico as trajetórias do sistema já não respeitam mais a condição de $\langle J_z \rangle$ constante, como esperado, pois J_z não é mais proporcional ao Hamiltoniano. As órbitas também são mais alongadas na direção de $\langle J_x \rangle$ em comparação ao caso sem interação, no entanto cada uma delas ainda apresenta o regime de oscilação de Josephson, pois os bósons do condensado continuam a oscilar entre os dois poços sem preferência por um deles e independentemente das condições iniciais. No gráfico 2.1.5.b, aumentamos o valor da taxa de colisão de maneira que este fosse próximo e inferior ao valor crítico, $\kappa = \frac{0,9}{2N}$. As órbitas estão ainda mais alongadas na direção de $\langle J_x \rangle$ e a variação em $\langle J_z \rangle$ dentro de uma trajetória é maior que no caso anterior. Permanece claro que o pólo norte da esfera é um ponto fixo estável do sistema.

O gráfico 2.1.5.c possui trajetórias do sistema para a taxa de autocolisão assumindo seu valor crítico $\kappa = \frac{1}{2N}$. Novamente as órbitas se alongam na direção de J_x e praticamente se degeneram em uma reta quando bem próximas a $\theta = \pi$, de maneira que não podemos precisar visualmente se há ali um ponto de equilíbrio estável. Quando passamos ligeiramente do ponto crítico, como em 2.1.5.d com $\kappa = \frac{1,1}{2N}$, algo de novo acontece. Como esperado da análise dos pontos fixos, o ponto $\theta = \pi$ não é mais estável e dele claramente surge uma separatriz no espaço de fase. Também observamos dois novos pontos de equilíbrio estáveis que descem do pólo norte ao longo dos meridianos $\phi = 0$ e $\phi = \pi$, caracterizando a bifurcação do sistema. Podemos ver que um novo tipo de órbita aparece em torno dos dois novos pontos fixos, dependendo da condição inicial da trajetória. Nestas órbitas a população de um poço se mantém sempre superior a do outro poço, em média. Apenas uma pequena porção dos bósons tunelam através da barreira de potencial, enquanto a maioria permanece fixa em seu sítio inicial. Estas novas trajetórias representam a segunda espécie de regime dinâmico presente no modelo de dois modos, conhecida como **auto-aprisionamento macroscópico**. O regime do sistema é bastante dependente de suas condições iniciais, pois para esta escolha de parâmetros apenas condições muito próximas ao pólo norte e aos dois novos pontos de estabilidade podem resultar no regime de auto-aprisionamento, enquanto as demais condições iniciais continuam a oferecer órbitas de oscilação de Josephson.

Quando aumentamos ainda mais o parâmetro de autocolisão, como nos gráficos 2.1.5.e e 2.1.5.f com $\kappa = \frac{1,5}{2N}$ e $\kappa = \frac{1}{N}$ respectivamente, vemos que maior área do espaço de fase é tomada pelas órbitas de auto-aprisionamento e que os pontos fixos em $\phi = 0$ e $\phi = \pi$ continuam em direção do equador como previsto pela fórmula $\theta = 2 \arctan \left(\sqrt{\frac{R^2(k-n) + \frac{\Omega'}{2}}{R^2(k-n) - \frac{\Omega'}{2}}} \right)$.

Não é difícil ver na Hamiltoniana (2.1.36') que, antes da bifurcação, o ponto de equilíbrio estável $\theta = \pi$ representa o estado de máxima energia do sistema:

$$\frac{\mathcal{H}(\theta = \pi, \phi)}{J} = \Omega'. \quad (2.1.49)$$

Após a bifurcação, os dois pontos fixos emergentes tornam-se os novos máximos globais de energia, enquanto (2.1.49) passa a representar a energia da separatriz que divide espaço em dois tipos de regiões. As regiões delimitadas pela separatriz, que possuem um dos máximos de energia do sistema, estão associadas ao regime de auto-aprisionamento, enquanto o restante do espaço de fase, que inclui o

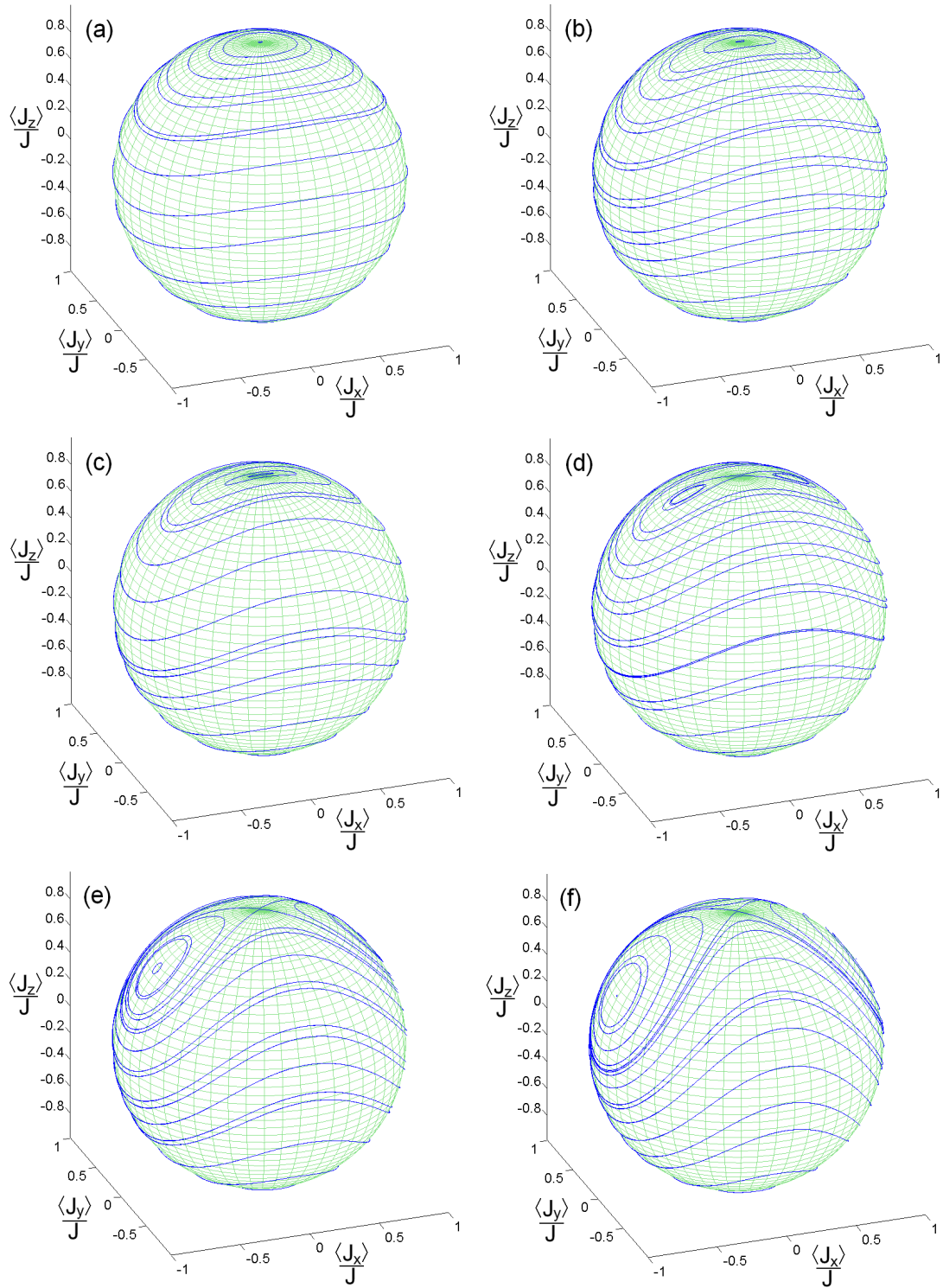


Figura 2.1.5: Trajetórias na esfera de Bloch para vários valores de autocolisão, mas ainda desconsiderando a colisão cruzada. Em todos os gráficos $N = 100$ e $\eta = 0$. Os parâmetros de autocolisão são dados por: (a) $\kappa = \frac{0,5}{2N}$, (b) $\kappa = \frac{0,9}{2N}$, (c) $\kappa = \frac{1}{2N}$, (d) $\kappa = \frac{1,1}{2N}$, (e) $\kappa = \frac{1,5}{2N}$ e (f) $\kappa = \frac{1}{N}$.

estado de mínima energia $\theta = 0$, apresenta apenas trajetórias do regime de oscilação Josephson.

Podemos facilmente distinguir as órbitas de auto-aprisionamento das órbitas de oscilação Josephson, notando que as primeiras possuem energia maior que a separatriz, enquanto as últimas representam estados de energia inferior a Ω' . Portanto, dado um estado inicial (θ_0, ϕ_0) sobre a esfera de Bloch, podemos afirmar que ele pertence a uma trajetória auto-aprisionada se:

$$\frac{\mathcal{H}(\theta_0, \phi_0)}{J} > \Omega' \rightarrow \frac{[(\kappa - \eta) \cos^2 \phi_0 - 2\eta] \sin^2 \theta_0}{1 + \cos \theta_0} > \frac{\Omega'}{N - 1}. \quad (2.1.50)$$

Por exemplo, o estado $(\theta_0, \phi_0) = (\frac{\pi}{2}, 0)$, onde todas partículas estão em um mesmo sítio, possui a condição de auto-aprisionamento:

$$\kappa > \frac{\Omega}{N - 1} + 4\Lambda + 3\eta. \quad (2.1.51)$$

Esta condição se reduz a $\kappa(N - 1) > \Omega$ quando $\eta = 0$, exatamente o dobro do valor necessário de $\kappa(N - 1)$ para o aparecimento da bifurcação, no caso em que desconsideramos as colisões cruzadas^{2,3}.

Quando consideramos os efeitos da colisão cruzada, esperamos que a taxa de tunelamento efetiva da barreira de potencial aumente com a taxa de colisão cruzada, já que o tunelamento efetivo cresce com η de acordo com (2.1.15.c'') e (2.1.37). Este aumento não é desprezível, pois dentro da taxa de tunelamento efetiva o parâmetro de colisão cruzada é multiplicado por N e, por hipótese, o número de partículas é elevado. Embora o termo de autocolisão seja efetivamente diminuído com o aumento de η , como podemos ver no segundo termo de (2.1.28), devemos lembrar que por hipótese $\eta \ll \kappa$, logo esta redução é muito pequena em relação ao aumento da taxa de tunelamento. A colisão cruzada tem o efeito de suprimir o auto-aprisionamento com a facilitação do tunelamento da barreira por meio da taxa efetiva Ω' . O efeito da diminuição da autocolisão efetiva é o mesmo, mas em proporção bem menor.

A figura 2.1.6 confirma as expectativas quanto à colisão cruzada. Nos três gráficos desta figura temos $N = 100$ e $\kappa = \frac{1}{N}$. O valor de κ foi escolhido para permitir comparação com o gráfico 2.1.5.f, no qual a área do espaço de fase com órbitas de auto-aprisionamento é significativo. No gráfico 2.1.6.a temos $\eta = \frac{\kappa}{100}$ e a região da superfície esférica em regime auto-aprisionamento em relação ao gráfico 2.1.5.f já é bem reduzida.

Nos gráficos 2.1.6.b e 2.1.6.c aumentamos o parâmetro de colisão cruzada para $\eta = \frac{\kappa}{40}$ e $\eta = \frac{\kappa}{10}$ respectivamente, tomando cuidado para que este ainda seja consideravelmente menor que κ . No gráfico 2.1.6.b o regime de oscilação de Josephson é ainda mais favorecido que no gráfico 2.1.6.a. A colisão cruzada no gráfico 2.1.6.c é tão importante na dinâmica do sistema que chega a suprimir totalmente a formação de órbitas de auto-aprisionamento.

No intuito de compararmos o cálculo semiclássico com a análise quântica exata do sistema presente na próxima seção, contemplemos uma situação particular. Considerando a condição inicial $\theta_0 = \frac{\pi}{2}$ e $\phi_0 = 0$, que corresponde a todos bósons colocados em um mesmo poço inicialmente, vamos acompanhar apenas a média de J_x , proporcional à posição do condensado, para valores de parâmetros representantes dos dois regimes dinâmicos do modelo. Para $N = 100$, $\Omega = 1$, $\kappa = \frac{2}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{100}$ esperamos que o sistema apresente dinâmica populacional de auto-aprisionamento, segundo a equação (2.1.51). No entanto, para $\eta = \frac{\kappa}{10}$ e mesmos valores do caso anterior para os outros parâmetros, a fórmula (2.1.51) prevê regime de oscilação Josephson.

^{2,3}Este é o valor específico de transição de regime dinâmico encontrado de maneira muito mais trabalhosa em [MCWW97].

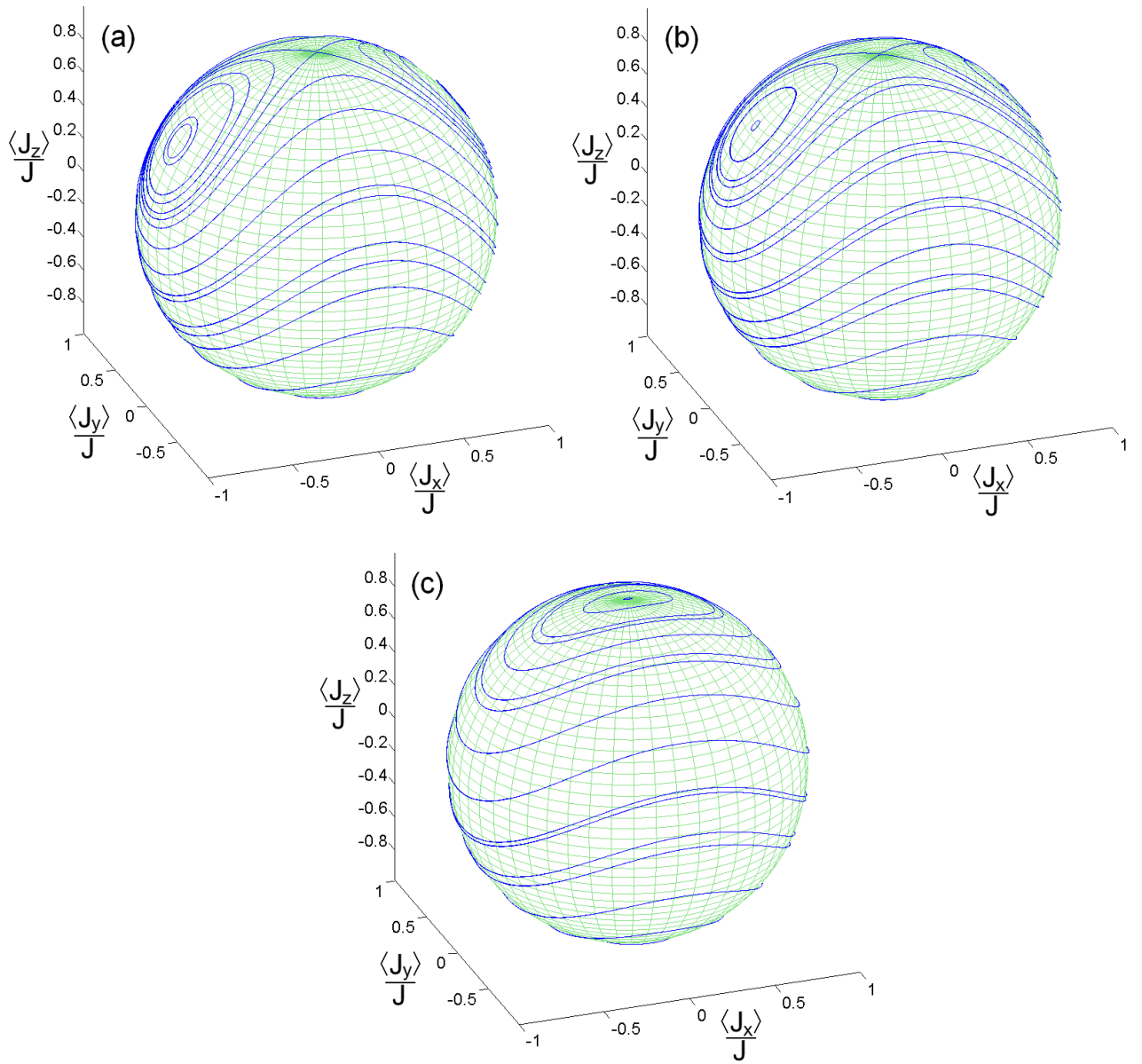


Figura 2.1.6: Trajetórias na esfera de Bloch no caso com colisão cruzada. Em todos os gráficos $N = 100$ e $\kappa = \frac{1}{N}$. Os valores do parâmetro de colisão cruzada são: (a) $\eta = \frac{\kappa}{100}$, (b) $\eta = \frac{\kappa}{40}$ e (c) $\eta = \frac{\kappa}{10}$.

Na figura 2.1.7.a temos, como esperado, o arquétipo de uma órbita de auto-aprisionamento, pois apenas uma pequena fração dos bósons oscila entre os diferentes sítios do potencial, enquanto grande parte fica retida em seu poço inicial. Já no gráfico 2.1.7.b, o efeito da colisão cruzada é forte suficiente para suprimir o auto-aprisionamento e temos o regime de oscilação Josephson. Vemos que todas as partículas do condensado tunelam coerentemente entre os dois poços, invertendo a condição inicial do sistema e retornando a ela periodicamente.

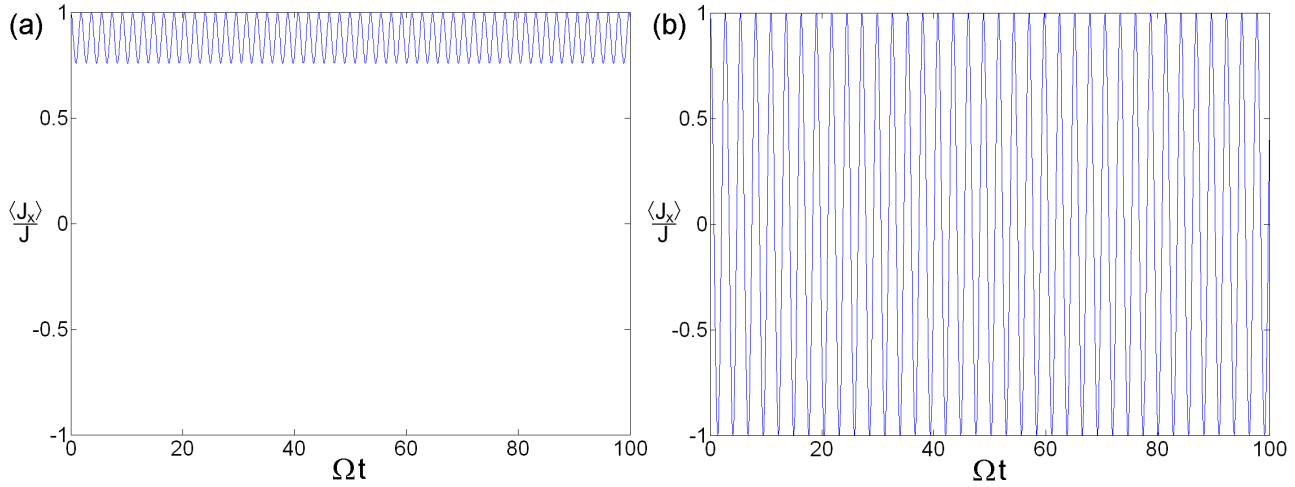


Figura 2.1.7: Comparação entre os regimes de oscilação de Josephson e auto-aprisionamento para condição inicial $\theta_0 = \frac{\pi}{2}$ e $\phi_0 = 0$, correspondente a todos bósons colocados inicialmente em um dos poços. Em ambos os gráficos $N = 100$ e $\kappa = \frac{2}{N}$. No gráfico (a) $\eta = \frac{\kappa}{100}$ e em (b) $\eta = \frac{\kappa}{10}$. Novamente, a unidade de tempo é tal que $\Omega = 1$.

2.1.2 Análise Quântica do Modelo de Dois Modos.

Na base usual de um espaço que carrega uma representação irredutível de $SU(2)$, na qual também definimos a ação dos geradores de sua álgebra em (2.1.30) e (2.1.34), podemos construir a representação matricial do Hamiltoniano (2.1.28). O operador Casimir quadrático $\vec{J}^2$ de $SU(2)$ especifica univocamente, por meio do autovalor $J(J+1)$, uma representação irredutível do grupo. Uma base do espaço em que age esta representação é definida em (2.1.30). Em (2.1.26) podemos ver que $J = \frac{N}{2}$, de forma que a representação irredutível é também especificada univocamente pelo número de partículas N do condensado. Como todos os termos do Hamiltoniano conservam o número de partículas e, conseqüentemente, $\vec{J}^2$ também é uma constante do movimento, temos que a dinâmica do sistema fica restrita a apenas uma representação irredutível de $SU(2)$. Em outras palavras, como $\vec{J}^2$ e $\hat{H}$ comutam, o Hamiltoniano do modelo não tem elementos de matriz entre estados com diferentes valores de J . Então, com o número de partículas fixo, reduzimos bastante a dimensão do espaço de Hilbert acessível ao sistema, pois não precisamos considerar os estados para todas as infinitas representações de $SU(2)$, já que $\hat{H}$ não acopla estados de diferentes valores J . Precisamos considerar apenas os $2J+1 = N+1$ estados com diferentes valores de M , dado o número de partículas.

Aplicando o Hamiltoniano (2.1.28) nos usualmente conhecidos estados de momento angular bem definido, utilizando também as equações (2.1.30), (2.1.34) e a relação de ortonormalidade $\langle J', M' | J, M \rangle = \delta_{J',J} \delta_{M',M}$, obtemos facilmente os elementos de matriz desejados, lembrando que $J_x = \frac{J_+ + J_-}{2}$:

$$\begin{aligned} \langle J', M' | \hat{H} | J, M \rangle = & \left[\Omega' M + (\kappa - \eta)(J(J+1) - M^2) + 4\eta M^2 \right] \delta_{J',J} \delta_{M',M} \\ & + \frac{(\kappa - \eta)}{2} \sqrt{(J-M-1)(J-M)(J+M+1)(J+M+2)} \delta_{J',J} \delta_{M',M+2} \\ & + \frac{(\kappa - \eta)}{2} \sqrt{(J+M-1)(J+M)(J-M+1)(J-M+2)} \delta_{J',J} \delta_{M',M-2}. \end{aligned} \quad (2.1.52)$$

O estado $|\theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0\rangle = |J, J\rangle_x$, tal que $J_x |J, J\rangle_x = J |J, J\rangle_x$, corresponde ao auto-estado de J_x em que todas as partículas se encontram em um único poço, como podemos ver diretamente de

(2.1.19.a), lembrando que $J = \frac{N}{2}$ e que $\hat{n}_{\pm} = d_{\pm}^{\dagger} d_{\pm}$ é o operador de número de partículas em um dos poços. Com os elementos matriz (2.1.52) construímos a representação matricial de $\hat{H}$ que, por sua vez, pode ser diagonalizada numericamente. Usando esta diagonalização podemos evoluir temporalmente qualquer estado desejado. Então, fazendo a média normalizada de J_x em $|J, J\rangle_x$, propagada no tempo, obtivemos a figura 2.1.8. Esta figura deve ser analisada em comparação a figura 2.1.7, por isso usamos os mesmos parâmetros $N = 100$, $\Omega = 1$ e $\kappa = \frac{2}{N}$, além de $\eta = \frac{\kappa}{100}$ para o gráfico 2.1.8.a e $\eta = \frac{\kappa}{10}$ para o gráfico 2.1.8.b.

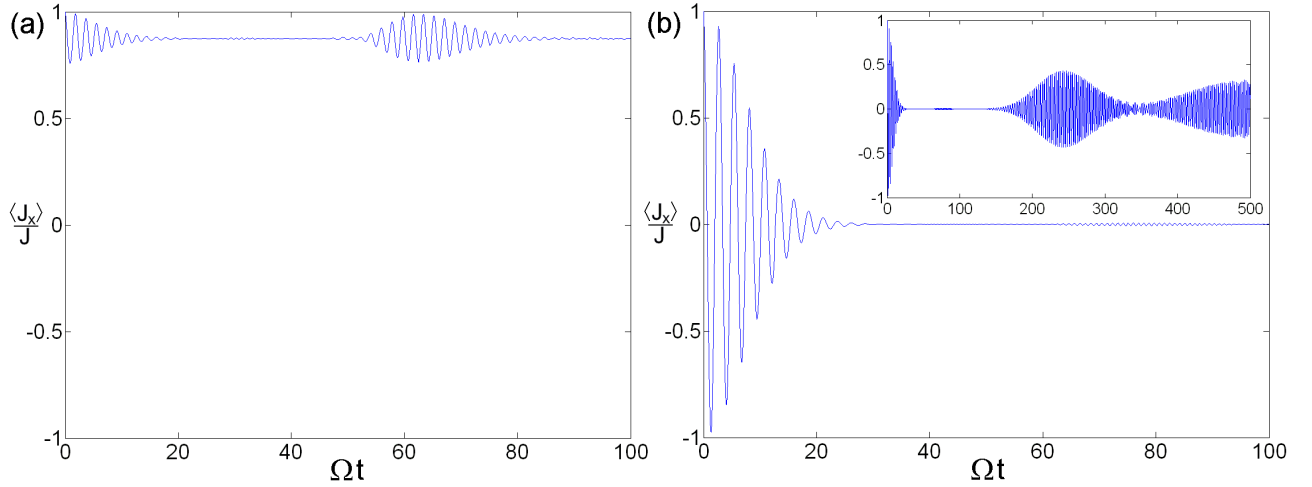


Figura 2.1.8: Média de J_x normalizada por $\frac{N}{2}$ e evoluída no tempo para sistema inicialmente no auto-estado de J_x de autovalor J , que correspondente a todos bósons colocados inicialmente em um dos poços. Em ambos os gráficos $N = 100$ e $\kappa = \frac{2}{N}$. No gráfico (a) $\eta = \frac{\kappa}{100}$ e em (b) $\eta = \frac{\kappa}{10}$. Novamente, unidade de tempo é escolhida tal que $\Omega = 1$.

Vemos que entre as figuras de simulação quântica e clássica há muitas semelhanças. Tanto o gráfico 2.1.8.a quanto o gráfico 2.1.7.a apresentam corretamente o regime de aprisionamento, pois os parâmetros estão acima do valor crítico. Já em 2.1.7.b e 2.1.8.b o regime de oscilação de Josephson surge favorecido pelo efeito das colisões cruzadas. As oscilações de $\langle J_x \rangle$ são bastante semelhantes nas simulações clássicas e quânticas de mesmos parâmetros, exceto por uma “modulação” da oscilação presente no caso quântico. Esta modulação tem o princípio de superposição como sua origem fundamental; ou seja, é causada pela interferência destrutiva entre as fases relativas dos vários coeficientes do estado considerado quando expandido em uma determinada base. Esta interferência destrutiva leva ao **colapso** da oscilação, como vemos nos gráficos 2.1.8.a e 2.1.8.b, que conseqüentemente é um fenômeno puramente quântico e não pode ser encontrado classicamente.

Da mesma forma que acontece o colapso das oscilações, existe também o fenômeno de **ressurgimento**. No gráfico 2.1.8.a e no detalhe do gráfico 2.1.8.b vemos que as oscilações voltam a existir determinado tempo após sua extinção. Note também que o tempo de colapso varia fortemente com os parâmetros.

Concluimos que o método clássico de análise apresenta acordo qualitativo, representa bem os diferentes regimes dinâmicos no domínio correto de parâmetros, e quantitativo, exceto por uma modulação da oscilação, com as simulações quânticas. Embora as simulações clássicas sejam mais eficientes em pontos como o tempo de processamento na máquina e a possibilidade de utilizarmos todos os métodos analíticos no espaço de fase, pagamos o preço de desprezar as flutuações puramente quânticas.

É interessante notar as marcas da transição entre os regimes dinâmicos no espectro discreto de

energia do sistema. Na figura 2.1.9 temos o espectro de energias para vários valores do parâmetro κ e colisão cruzada “desligada”. Também empregamos os já familiares valores $N = 100$ e $\Omega = 1$.

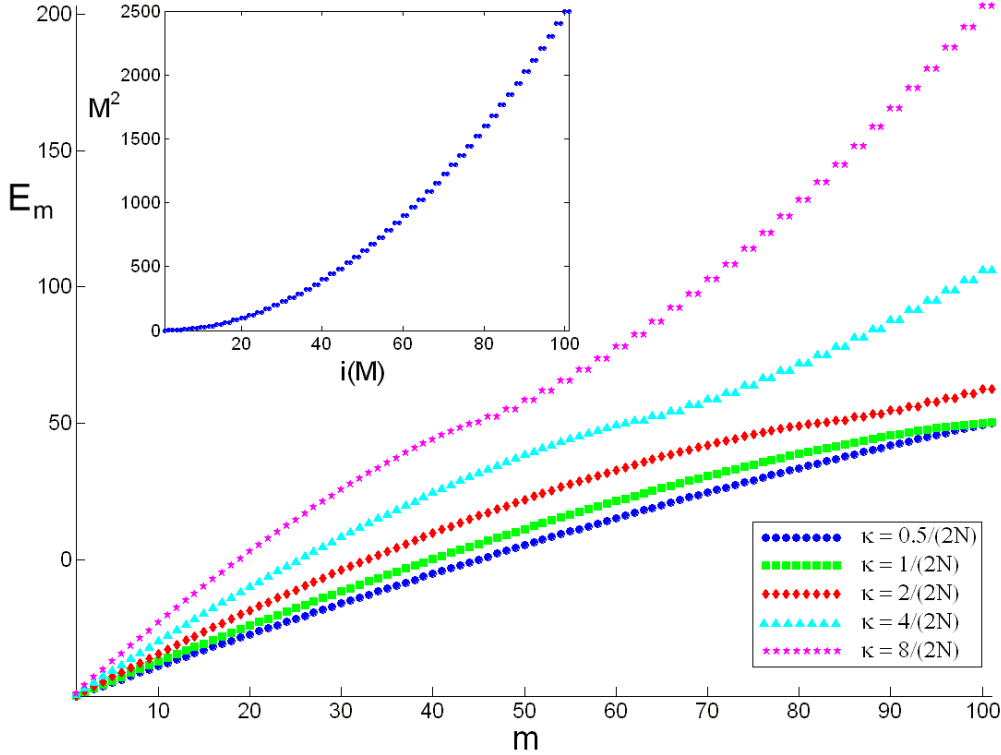


Figura 2.1.9: Espectro de energia para o caso sem colisão cruzada. Com $N = 100$, $\Omega = 1$ e $\eta = 0$, temos gráficos dos autovalores do Hamiltoniano em ordem crescente de energia para vários valores de κ , inferiores e superiores ao valor crítico aproximado $\kappa = \frac{\Omega}{2N}$. Em detalhe temos o gráfico dos autovalores M^2 de J_x^2 , cujos auto-estados correspondentes são colocados em ordem crescente de M^2 pelo índice $i(M)$, para comparação com estrutura de níveis formada nos espectros de energia para os maiores valores de κ .

Se imaginarmos como curvas contínuas os espectros apresentados no gráfico 2.1.9, notamos a presença de um ponto de inflexão naquelas que o parâmetro de autocolisão está acima do valor crítico $\kappa = \frac{1}{2N}$. Esta mudança de curvatura acontece em regiões de energia mais baixa do espectro quanto maior o valor de κ . Em outras palavras, o ponto de inflexão “desce” o espectro à medida que a presença de estados estacionários com dinâmica de auto-aprisionamento aumenta. Para o valor subcrítico $\kappa = \frac{0.5}{2N}$ não há ponto de inflexão, enquanto no espectro de valor crítico de autocolisão o ponto de inflexão pode estar situado exatamente no estado de maior energia e por isso não vemos a inflexão na curva.

A estrutura de níveis de energia também é diferente acima e abaixo do ponto de inflexão. Acima dele, vemos o aparecimento de dubletos; ou melhor, pares de níveis de energia quase degenerados. Podemos interpretar estes dubletos analisando o Hamiltoniano (2.1.28). À medida que o valor de κ aumenta, os auto-estados de energia se assemelham cada vez mais a auto-estados de J_x^2 , que é o operador proporcional ao termo de autocolisão. Os autovalores de J_x^2 são duplamente degenerados em $M^2 = J^2, (J-1)^2, (J-2)^2, \dots, 1$ se J inteiro ou em $M^2 = J^2, (J-1)^2, (J-2)^2, \dots, (\frac{1}{2})^2$ se J semi-inteiro; ou seja, o autovalor é degenerado exceto quando assume o valor nulo. Se o termo de tunelamento é mais importante, os auto-estados de $\hat{H}$ se assemelham mais aos de J_z , operador

proporcional ao termo de tunelamento. Não há degenerescência entre os auto-estados de J_z , cujos autovalores correspondentes são $M = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$.

Logo, com maior peso do termo de autocolisão, a parte superior do espectro exibe uma estrutura parecida com de auto-estados de J_x^2 . Este fato deve estar intimamente ligado a dinâmica de auto-aprisionamento, pois os auto-estados de J_x^2 são os mesmos auto-estados de balanço populacional de J_x , o que explica a atitude preferencial do sistema por um dos poços, dependendo das condições iniciais. Note que colocamos os valores de M^2 em detalhe na figura 2.1.9 para comparação.

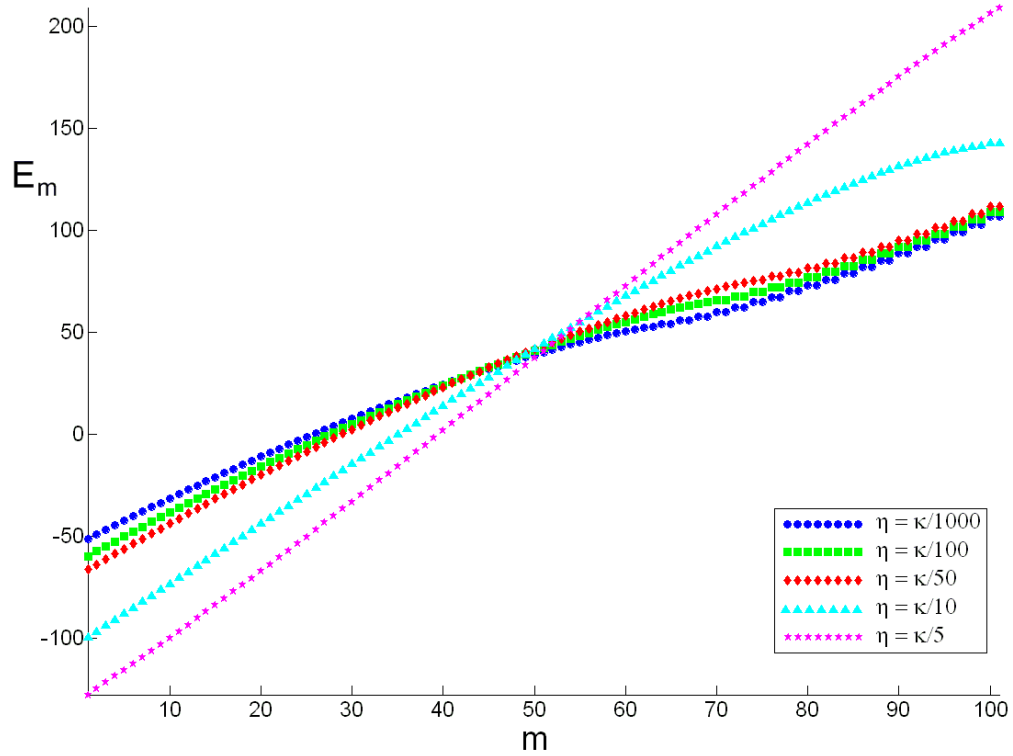


Figura 2.1.10: Espectros de energia considerando colisões cruzadas, mas ainda preservamos fixos $N = 100$, $\Omega = 1$ e $\kappa = \frac{2}{N}$. Os gráficos para vários valores de η mostram a supressão do regime de auto-aprisionamento.

Na figura 2.1.10, temos os espectros de energia para vários valores dos parâmetros de colisão cruzada, fixando $N = 100$, $\Omega = 1$ e $\kappa = \frac{2}{N}$. Então, à medida que o parâmetro η cresce, o ponto de inflexão “sobe” o espectro, sinal da supressão do auto-aprisionamento. A taxa de tunelamento efetiva cresce com a colisão cruzada, tornando o termo proporcional a J_z preponderante no Hamiltoniano e eliminando do espectro traços da estrutura semelhante ao espectro de J_x^2 .

2.1.3 Pureza Generalizada e Representação no Espaço de Fase.

As dinâmicas quântica e semiclássica do modelo são bastante semelhantes qualitativamente, como mostram as figuras 2.1.7 e 2.1.8, pois o regime do sistema coincide nestas duas abordagens ao problema. No entanto, vemos que quantitativamente o acordo entre os métodos não é ideal. A sequência de colapsos e ressurgimentos das oscilações na simulação quântica não é observada no análogo clássico, o que gera em um tempo relativamente curto a quebra da correspondência clássico-quântica.

Esta quebra de correspondência se deve à **decoerência**^{2.4} introduzida por flutuações quânticas ou, em outras palavras, ao quanto a dinâmica quântica “afasta” o estado do sistema de um estado coerente. Quando utilizamos a aproximação análoga clássica, restringimos a evolução do estado ao subespaço não linear formado somente pelos estados coerentes de $SU(2)$. Esta evolução é exata, dado que o estado inicial é coerente, apenas no limite macroscópico $N \rightarrow \infty$. Contudo, o subespaço do análogo clássico não é suficiente para abarcar a dinâmica completa do sistema quando levamos em conta os efeitos de correlações puramente quânticas existentes para N finito^{2.5}.

Quando abrimos mão do princípio de superposição linear, obrigamos a função de onda do sistema a evoluir sem “perder a forma”, de maneira que o estado sempre permanece bem localizado no espaço de fase. Neste ponto de vista, os estados coerentes são os mais próximos aos estados clássicos, pois estes são representados por pontos no espaço de fase clássico, enquanto aqueles convergem a uma distribuição pontual no limite $N \rightarrow \infty$. A delocalização da função de onda, que aqui chamamos de decoerência, é a responsável pelo desacordo quantitativo entre a dinâmica clássica e quântica, causando nesta última os fenômenos de colapso e ressurgimento.

Para uma análise completa da decoerência ou da **qualidade da aproximação semiclássica** é necessária uma boa medida quantitativa da “distância” de um determinado estado puro ao subespaço de estados coerentes, os quais compõem o espaço de fase clássico. Felizmente, para as álgebras semi-simples, conjunto que inclui $su(2)$, esta medida existe e é conhecida como **incerteza total associada a álgebra** $(\Delta A)^2$, introduzida no apêndice 8.2 e em [DF77, Del77]. No entanto, quando a dinâmica completa do sistema se restringe a um espaço que carrega uma representação irredutível de $SU(2)$, lembrando que em nosso modelo esta condição é satisfeita devido à conservação do número de partículas, há uma medida mais simples derivada de $(\Delta A)^2$, chamada de **pureza generalizada da álgebra** $\mathcal{P}_{su(2)}$ [Kly, SOB⁺04, BKO03, BKO⁺04]. Segundo (8.2.53), a pureza de $su(2)$ é definida por:

$$\mathcal{P}_{su(2)}(|\psi\rangle) = \frac{1}{J^2} (\langle\psi|J_x|\psi\rangle^2 + \langle\psi|J_y|\psi\rangle^2 + \langle\psi|J_z|\psi\rangle^2). \quad (2.1.53)$$

Entre outros motivos, a pureza é considerada uma boa medida porque é invariante por uma transformação do grupo $SU(2)$ no estado $|\psi\rangle$; ou seja:

$$\mathcal{P}_{su(2)}(U|\psi\rangle) = \mathcal{P}_{su(2)}(|\psi\rangle), \text{ para } U \in SU(2). \quad (2.1.54)$$

Portanto, todos estados conectados por uma transformação de $SU(2)$ possuem o mesmo valor de pureza. Contudo, a propriedade mais interessante de $\mathcal{P}_{su(2)}(|\psi\rangle)$, no intuito de analisar quantitativamente a correspondência entre o análogo clássico e a dinâmica quântica exata, é que esta medida tem valor máximo e igual a um se, e somente se, o estado é do tipo (2.1.31); ou seja, se $|\psi\rangle$ é um **estado coerente mais próximo ao clássico**. À medida que o estado se distancia da coerência, se delocalizando no espaço de fase, a pureza generalizada decresce monotonicamente até zero. Logo, $\mathcal{P}_{su(2)}$ é uma excelente medida de coerência para sistemas com Hamiltonianos escritos em termos dos geradores de $SU(2)$.

^{2.4}No contexto do método de aproximação análogo clássico, o termo “decoerência” é utilizado no sentido de “afastamento da situação clássica”. Esta conotação é distinta da usual, quando o caráter clássico de um sistema é devido à decoerência introduzida pelo seu acoplamento com o ambiente [ZP96]. Porém, a pureza generalizada também pode ser escrita como o traço de um operador densidade reduzido ao quadrado, resultado mostrado na seção 8.2, justificando o uso da palavra decoerência.

^{2.5}Há uma exceção a esta regra, pois o análogo clássico também é exato quando o Hamiltoniano do sistema é linear no geradores do grupo dinâmico. Portanto, em nosso caso, a aproximação semiclássica seria exata se o Hamiltoniano quântico fosse linear em J_x , J_y e J_z . A dinâmica de nosso modelo não é linear, excetuando o regime pouco interessante de partículas não interagentes, $\kappa = 0$, como vemos em (2.1.28).

No entanto, é importante notar que a pureza generalizada só tem estas propriedades bem definidas para estados puros e, somente neste caso, ela é uma medida das correlações quânticas existentes em um estado sobre o espaço de fase clássico.

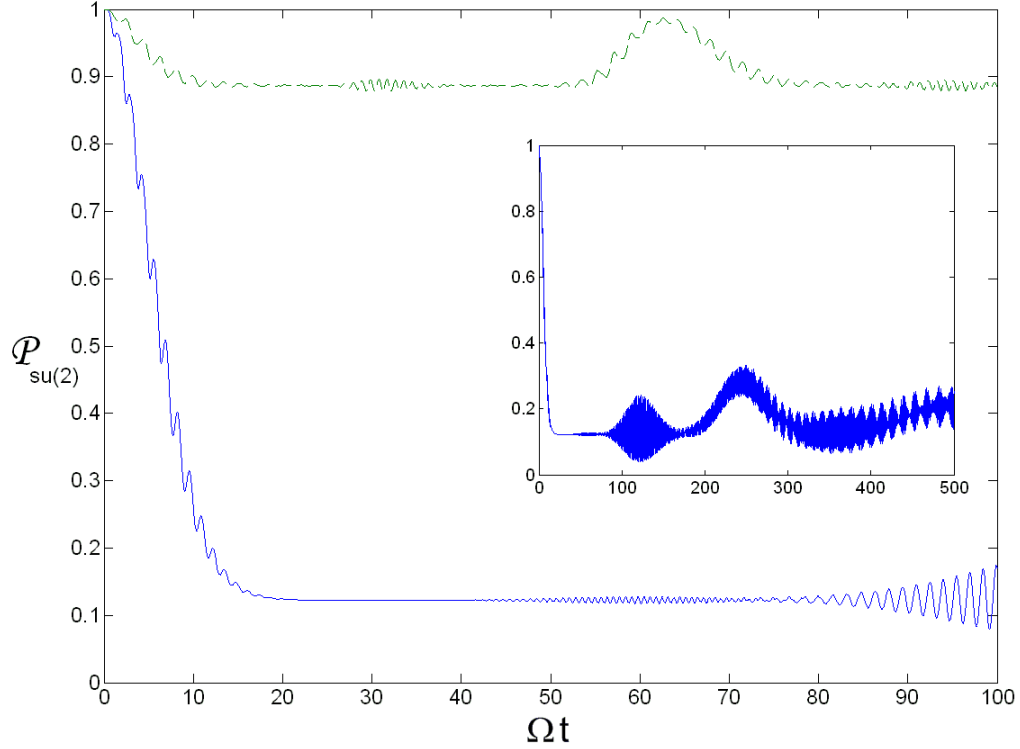


Figura 2.1.11: Comportamento com o tempo da pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(2)}$ para os dois regimes dinâmicos encontrados na figura 2.1.8. A curva tracejada representa o regime de auto-aprisionamento com $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{100}$, já a curva sólida representa o regime de oscilação Josephson com $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{10}$. Em ambas as curvas o estado inicial do sistema é o estado coerente $|J, J\rangle_x \equiv |\theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0\rangle$, no qual as $N = 100$ partículas encontram-se inicialmente no mesmo poço.

Queremos agora encontrar a validade da aproximação semiclássica para os dois regimes dinâmicos do sistema, calculando a evolução quântica exata de $\mathcal{P}_{su(2)}$ para um estado inicial coerente. Na figura 2.1.11 temos a pureza em função do tempo para a mesma condição inicial e os mesmos valores de parâmetros dos dois regimes da figura 2.1.8. A curva tracejada representa o comportamento da pureza no regime de auto-aprisionamento, com $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{100}$. Nesta curva vemos que rapidamente a pureza perde o valor um, indicando que a dinâmica retira o estado do subespaço dos estados coerentes. No entanto, a pureza se estabiliza em um valor relativamente alto, aproximadamente 0,9, quando $\Omega t \approx 10$. Este patamar na pureza coincide com a região de colapso na dinâmica populacional da figura 2.1.8.a. Note que próximo a $\Omega t = 30$ a pureza apresenta pequenas oscilações e na região próxima a $\Omega t = 60$ a pureza volta a crescer até quase atingir novamente o valor um. Neste último intervalo de tempo aconteceu a recoerência do estado, responsável pelo ressurgimento das oscilações na figura 2.1.8.a.

Portanto, no regime de auto-aprisionamento a pureza mantém valor elevado, indicando bom acordo quantitativo entre os resultados semiclássicos e quânticos. Também vemos pleno acordo entre os períodos de decoerência (recoerência) na pureza e os períodos de colapso (ressurgimento) das oscilações populacionais. Claramente, grande parte desta concordância entre os resultados deve-se justamente

ao caráter da evolução temporal da média do gerador J_x no regime de auto-aprisionamento. Como a pureza depende do quadrado desta média normalizada, temos que a oscilação em torno de valores não nulos e relativamente elevados (próximos a J) de $\langle J_x \rangle$ mantém também o valor de $\mathcal{P}_{su(2)}$ oscilando próximo ao seu máximo valor possível.

Já a curva sólida na figura 2.1.11 representa o comportamento da pureza no regime de oscilação Josephson, para $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{10}$. Novamente, a pureza do estado inicial cai rapidamente com o tempo, mas desta vez a decoerência é bem mais intensa, atingindo valores relativamente baixos de $\mathcal{P}_{su(2)}$. Portanto, este regime apresenta menor conformidade quantitativa entre as evoluções clássicas e quânticas, quando comparado o regime de auto-aprisionamento.

Neste regime dinâmico, o sistema não volta a alcançar altos valores de coerência. No tempo próximo a $\Omega t = 250$ o estado atinge sua maior recoerência, que ainda não chega a $\mathcal{P}_{su(2)} = 0,4$. Este resultado já era esperado devido à grande delocalização sobre a esfera de Bloch das órbitas clássicas encontradas neste regime, como vimos nas figuras 2.1.4, 2.1.5 e 2.1.6.

Devemos agora confirmar nossas expectativas acerca da relação entre decoerência e delocalização do estado sobre sua órbita semiclássica no espaço de fase generalizado. Neste intuito, precisamos definir uma função de distribuição semiclássica que faça a ponte entre os estados no espaço de Hilbert e a esfera de Bloch. Em analogia à definição de nossa Hamiltoniana semiclássica, convém definir funções associadas aos estados também realizando médias nos estados coerentes. Portanto, definimos a distribuição semiclássica Q ou Husimi para estados coerentes de $SU(2)$:

$$Q(\theta, \phi) \equiv \langle \theta, \phi | \rho | \theta, \phi \rangle. \quad (2.1.55)$$

Definida desta forma, a função Q é não-negativa e limitada superiormente por um. Também na última equação introduzimos o operador de densidade ρ , que neste trabalho utilizaremos apenas para representar estados puros:

$$|\psi\rangle = \sum_{M=-J}^J c_M |J, M\rangle \rightarrow \rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.1.56)$$

Utilizando a expansão geral de (2.1.56) para um estado no espaço de $J = \frac{N}{2}$ fixo, podemos escrever $Q(\theta, \phi)$ em função dos coeficientes c_M do estado. Apenas lembrando que $\tau = e^{-i\phi} \tan \frac{\theta}{2}$, obtemos:

$$Q(\theta, \phi) = \left| \sum_{M=-J}^J c_M \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!(J-M)!}} \frac{(\tau^*)^{J+M}}{(1+|\tau|^2)^J} \right|^2 \quad (2.1.55')$$

Nas figuras 2.1.12 e 2.1.13 temos a evolução da distribuição Husimi **sobre a esfera de Bloch**, para os dois regimes dinâmicos encontrados no modelo. A figura 2.1.12 ilustra os instantes relevantes encontrados na figura 2.1.11, quando estudamos a pureza no regime de auto-aprisionamento para os parâmetros $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{100}$. Em $\Omega t = 0$ temos o estado coerente inicial $|J, J\rangle_x \equiv |\theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0\rangle$, que representa um estado de máxima localização no espaço de fase. Já em $\Omega t = 5$ estamos aproximadamente no meio do período de decoerência previsto na figura 2.1.11 e fica evidente, em comparação com a figura 2.1.6.a, que a função Q se “espalha” sobre sua órbita clássica. Próximo a $\Omega t = 10$, o sistema está no fim do processo de decoerência e a distribuição se alarga sobre praticamente toda sua trajetória obtida no análogo clássico. Neste instante a correspondência quantitativa entre os cálculos quânticos e clássicos deve se quebrar completamente, pois o estado começa o processo de auto-interferência. Em $\Omega t = 20$ e $\Omega t = 30$ estamos sobre o patamar praticamente constante da pureza e notamos o aparecimento de “gatos” na distribuição Husimi, que são aproximadamente a superposição de dois e três estados

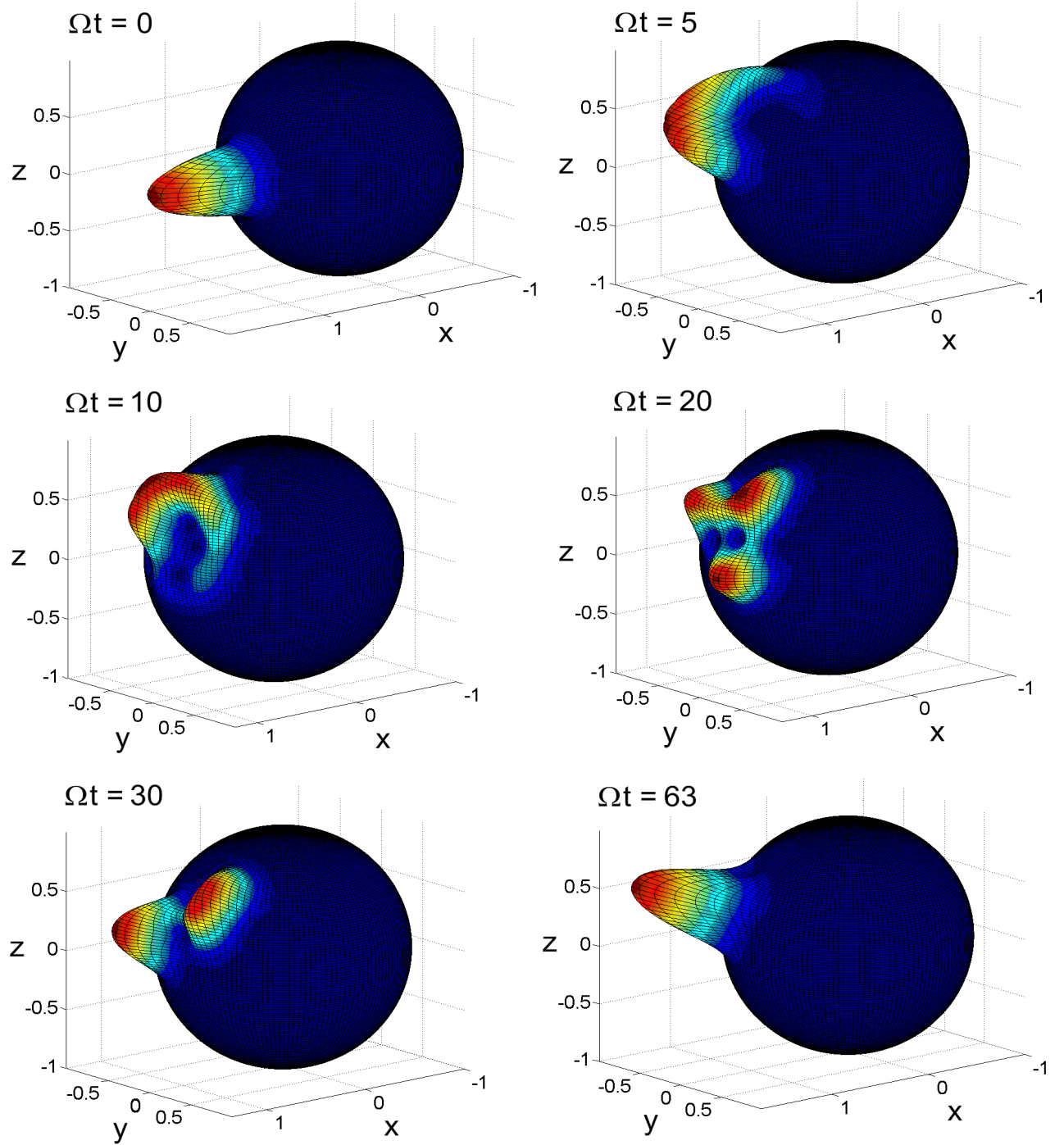


Figura 2.1.12: Evolução quântica da distribuição Q associada ao estado $|J, J\rangle_x$ para o regime de auto-aprisionamento. A fim de comparação com os resultados das figuras anteriores, utilizamos os parâmetros: $N = 100$, $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{100}$. A distribuição é mostrada para os tempos mais relevantes de decoerência e recoerência indicados pela pureza na figura 2.1.11.

coerentes. Note que pequenas oscilações na evolução da pureza acontecem no instante de formação de dois máximos na distribuição.

Por fim, em $\Omega t = 63$ temos o instante de maior recoerência do sistema, quando a pureza quase retorna a um. A função Q forma apenas um pico de formato pouco diferente de um estado coerente, mas note que este novo pico único não está centrado no mesmo ponto que o estado inicial.

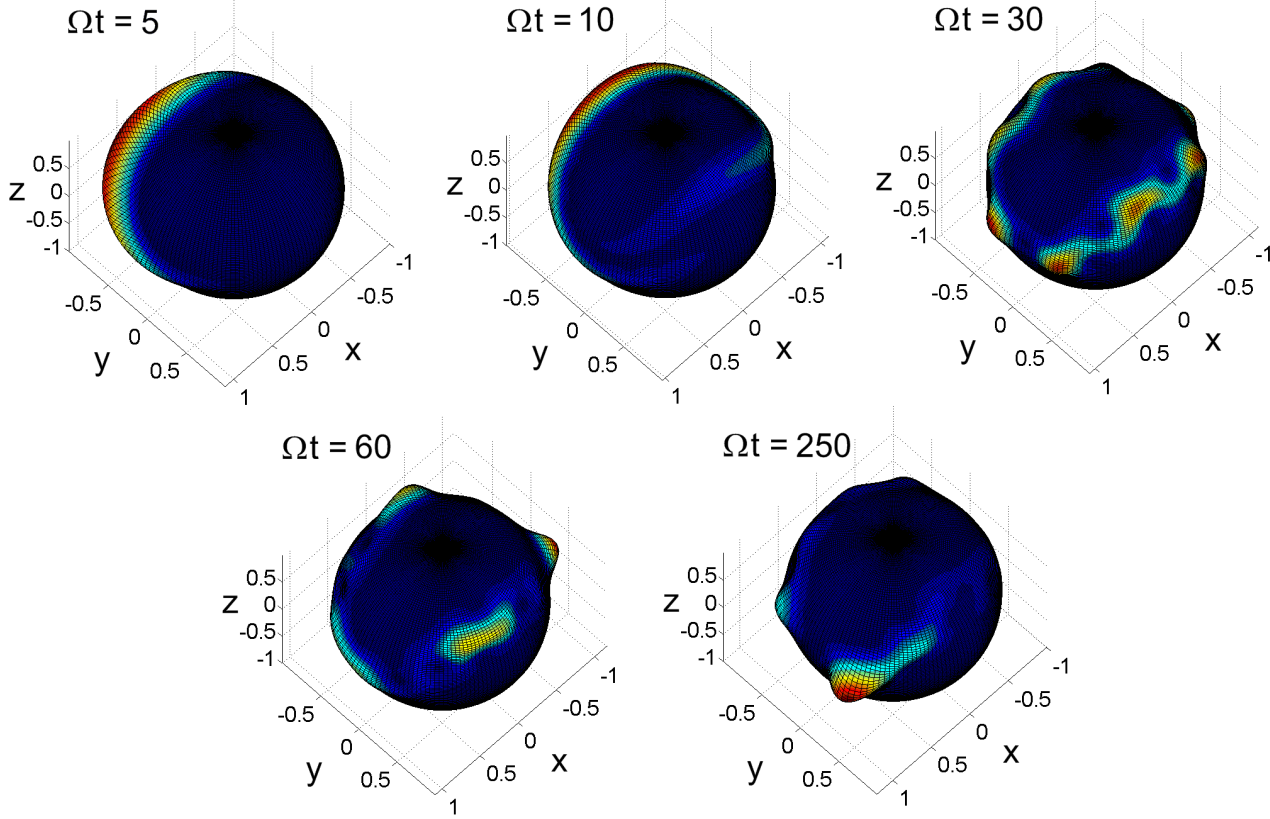


Figura 2.1.13: Distribuição Q associada ao estado $|J, J\rangle_x$ para o regime de Oscilação Josephson em vários instantes de tempo. Mais uma vez, queremos comparar a dinâmica da distribuição com os resultados da evolução da pureza e de $\langle J_x \rangle$. Os parâmetros são $N = 100$, $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{10}$. Os instantes de tempo foram escolhidos de forma que os períodos mais interessantes da figura 2.1.11 fossem bem representados.

Já a figura 2.1.13 apresenta os instantes mais interessantes para o regime de Oscilação Josephson, obtido com os parâmetros $N = 100$, $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$ e $\eta = \frac{\kappa}{10}$. Como o estado inicial é o mesmo da figura anterior, mostramos o primeiro gráfico para $\Omega t = 5$, durante o primeiro período de decoerência. Mais uma vez, a distribuição no espaço de fase se prolonga por sua órbita clássica, em comparação com 2.1.6.c. Quando $\Omega t = 10$ a função já cobre praticamente toda sua trajetória clássica, caracterizando a quebra completa de correspondência clássico-quântica, pois a partir deste instante começa o processo de auto-interferência. Em $\Omega t = 30$ e $\Omega t = 60$, que representam instantes de nenhuma ou pequenas oscilações na pureza, vemos novamente a formação de superposições de estados localizados com respectivamente oito e quatro picos. No instante $\Omega t = 250$ representamos o sistema em seu período de melhor recoerência, quando há a formação de praticamente um único máximo na distribuição, mas sua forma é muito distante de um estado coerente e bastante delocalizada.

Comparando as figuras 2.1.12 e 2.1.13, vemos que a intensidade da decoerência devido à dinâmica

quântica de um estado é proporcional à delocalização de sua órbita clássica. Quanto maior a região percorrida pela trajetória, maior é o alargamento da distribuição Q no espaço de fase e menor é a coerência atingida pelo estado em sua evolução.

Portanto, no caso de um Hamiltoniano não linear nos geradores do grupo dinâmico, a aproximação dada pelo análogo clássico possui maior concordância quantitativa com o resultado quântico exato para N finito quando utilizada para descrever órbitas que ocupam menor “volume” do espaço de fase.

O modelo do condensado em poço duplo é integrável e conseqüentemente não podemos analisar a decoerência de trajetória caóticas. Contudo, nossos resultados indicam menor validade do método análogo clássico para este tipo de trajetória, que geralmente possui maior delocalização no espaço de fase.

2.1.4 Pureza de $su(2)$ e Transição de Fase Quântica.

Na seção anterior vimos que a quantidade $\mathcal{P}_{su(2)}$ é extremamente útil como medida de decoerência, delocalização e correlações quânticas de um determinado estado em relação ao espaço de fase clássico generalizado. Podemos aproveitar estas qualidades para caracterizar uma propriedade bastante interessante de muitos sistemas quânticos: a **transição de fase quântica**.

A transição de fase quântica é uma não analiticidade na energia do estado fundamental de um sistema, quando tomada como função de algum parâmetro real contínuo do Hamiltoniano, caracterizada apenas à temperatura zero e no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$.

Geralmente, a energia do estado fundamental em um sistema finito é uma função analítica do parâmetro do Hamiltoniano e somente exibe a não analiticidade, relacionada a um cruzamento evitado de níveis, quando $N \rightarrow \infty$. Contudo, ainda podemos observar a escalabilidade das propriedades do sistema para N crescente e decidir se ocorre ou não a transição no limite termodinâmico.

Trabalhos recentes mostram que medidas de emaranhamento bipartite podem ser usadas para “sinalizar” a presença de uma transição de fase [WSL04, Hin05]. Entre as medidas para estados puros podemos citar a pureza usual^{2.6}, da qual advém o nome de nossa generalização. Devido as propriedades já citadas de nossa pureza generalizada, esperamos que ela também contenha alguma informação indicando a transição.

Em nosso tratamento semiclássico do modelo do condensado em poço duplo, vimos que o sistema sofre uma mudança drástica em sua dinâmica quando a taxa de autocolisão assume seu valor crítico $\kappa_c = \frac{\Omega}{2N}$, para $N \gg 1$ e colisões cruzadas desconsideradas. Da maneira como tratamos nosso modelo, com $\Omega, \kappa > 0$, esta transição de regime não acontece no estado fundamental do sistema, mas sim no estado de maior energia, induzida pela bifurcação no espaço de fase.

Embora o estado fundamental de nosso modelo não apresente mudança crítica de regime, podemos ainda tratar formalmente a transição no estado estacionário de energia máxima da mesma forma que uma transição de fase convencional^{2.7} no intuito de verificar as propriedades de $\mathcal{P}_{su(2)}$. Devemos lembrar sempre que a transição de fase somente é caracterizada no limite $N \rightarrow \infty$, portanto nossa mudança de regime, mesmo se ocorresse no estado fundamental, só poderia ser considerada uma transição no limite clássico exato.

Na figura 2.1.14, temos a distribuição Husimi para o auto-estado de maior energia do espectro de $\hat{H}$ para vários valores dos parâmetros κ e η . No gráfico 2.1.14.a temos simplesmente a representação

^{2.6}Empregamos o adjetivo “usual” para distinguir a utilização já consagrada da pureza em sistemas bipartites de nossa pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(2)}$.

^{2.7}Afinal, o estado de máxima energia pode ser levado ao estado fundamental pela transformação $\hat{H} \rightarrow -\hat{H}$ ou, equivalentemente, $\Omega, \kappa \rightarrow -\Omega, -\kappa$.

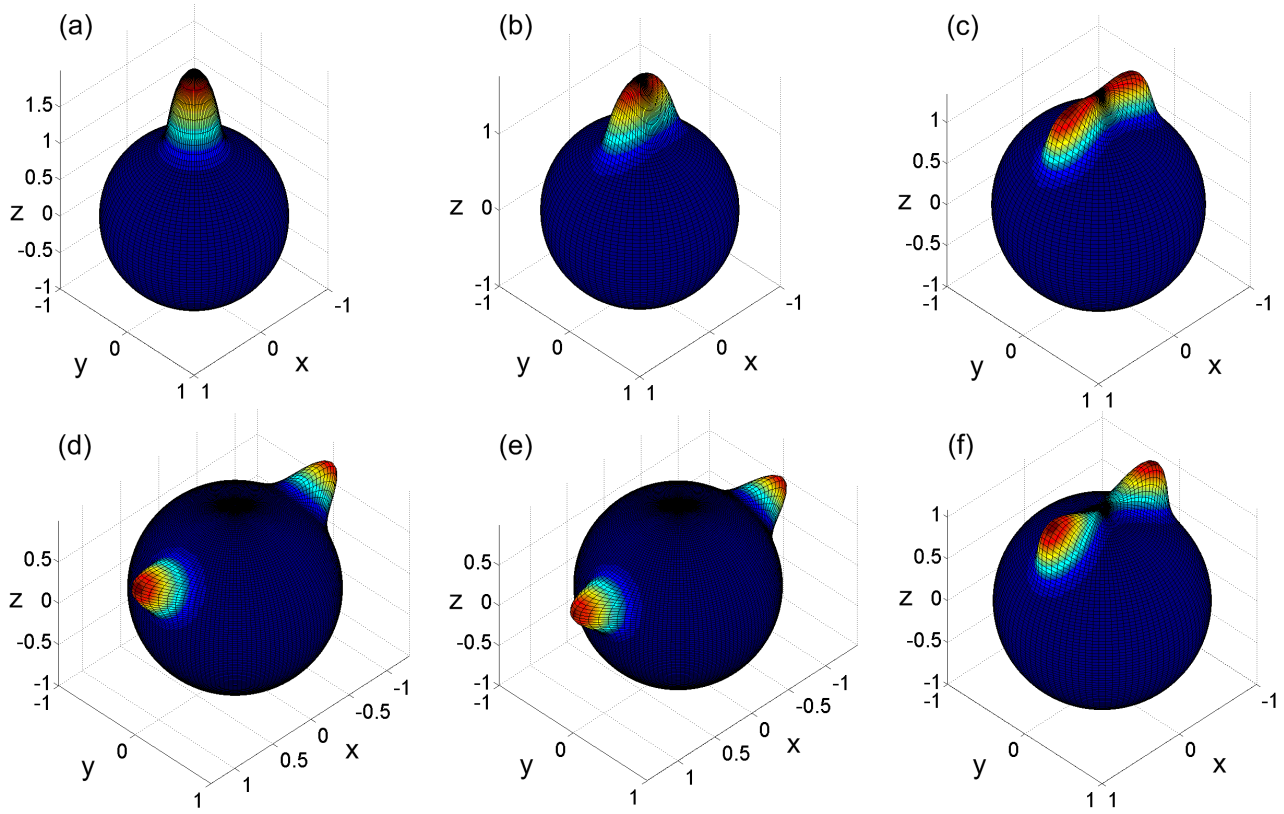


Figura 2.1.14: Distribuição Q para o estado de maior energia do espectro de $\hat{H}$ para vários valores dos parâmetros κ e η . Considerando o número de partículas $N = 100$ e $\Omega = 1$, temos os seguintes valores das taxas de colisão: (a) $\kappa = \eta = 0$, (b) $\kappa = \frac{\Omega}{2N}$, $\eta = 0$, (c) $\kappa = \frac{0.55\Omega}{N}$, $\eta = 0$, (d) $\kappa = \frac{\Omega}{N}$, $\eta = 0$, (e) $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$, $\eta = \frac{\kappa}{100}$ e (f) $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$, $\eta = \frac{\kappa}{10}$.

do estado coerente $|\theta = \pi, \phi\rangle = |J, J\rangle_z$, que é o auto-estado de energia máxima exato para o caso não interagente $\kappa = \eta = 0$, como podemos ver facilmente na equação (2.1.28). Portanto, na ausência de colisões, o nível mais energético é produzido por um estado de máxima localização no espaço de fase, tal que $\mathcal{P}_{su(2)}(|\psi\rangle) = 1$.

Aumentando o valor de κ , mas ainda desconsiderando as colisões cruzadas, vemos um crescente alargamento da função Q ao longo do eixo x e, conseqüentemente, esperamos o decrescimento da pureza. Para exatamente $\kappa = \kappa_c$, como mostrado no gráfico 2.1.14.b, o estado encontra-se bastante alongado, mas ainda não apresenta bifurcação; ou seja, a formação de dois máximos em sua distribuição. Este comportamento já era esperado para N finito, pois o parâmetro de transição de regime quântico $\kappa_c^q(N)$ é ligeiramente diferente do valor de transição κ_c encontrado no limite clássico.

No gráfico 2.1.14.c, para $\kappa = \frac{0.55\Omega}{N}$, já há formação de dois máximos na distribuição, os quais passam a se afastar ao longo do eixo x para κ crescente, como vemos na figura 2.1.14.d com $\kappa = \frac{\Omega}{N}$.

Como esperado, o aumento da taxa de colisão cruzada tem efeito oposto à autocolisão. Para η crescente vemos os dois máximos da função Q se aproximarem, como exemplificado nas figuras 2.1.14.e e 2.1.14.f, onde escolhemos respectivamente $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$, $\eta = \frac{\kappa}{100}$ e $\kappa = \frac{2\Omega}{N}$, $\eta = \frac{\kappa}{10}$.

Nossos resultados para a distribuição no espaço de fase do estado de máxima energia são confirmados quando analisamos o comportamento da pureza generalizada em função da taxa de autocolisão e do número de partículas, como mostrado na figura 2.1.15, desconsiderando as colisões cruzadas. A pureza

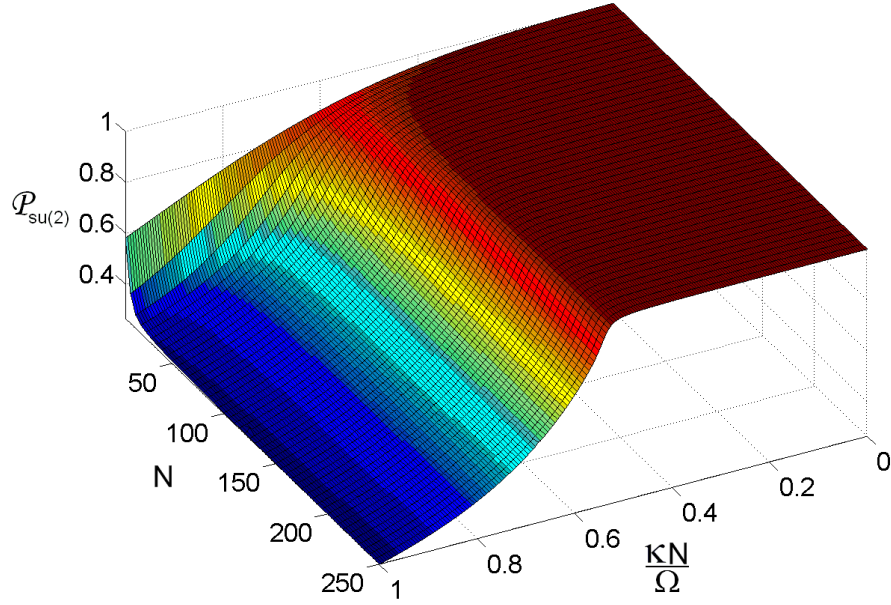


Figura 2.1.15: Pureza generalizada de $su(2)$ calculada no auto-estado de energia mais elevada em função do parâmetro de autocolisão normalizado e do número de partículas, desconsiderando o efeito das colisões cruzadas.

inicialmente decresce lentamente com $\frac{\kappa N}{\Omega}$ crescente, independentemente do valor de N , correspondendo a região onde as distribuições na figura 2.1.16 apenas se alongam sobre o eixo x . No entanto, próximo a $\frac{\kappa N}{\Omega} = \frac{1}{2}$, a pureza começa a decrescer rapidamente e, embora suave, a queda de seu valor é mais íngreme à medida que N cresce. Este comportamento de $\mathcal{P}_{su(2)}$ nos sugere uma dependência forte entre a derivada da pureza em $\frac{\kappa N}{\Omega}$ e o número de partículas.

Na figura 2.1.16 mostramos a derivada da pureza em relação à taxa de autocolisão normalizada $\frac{\kappa N}{\Omega}$ para vários valores de N . Para um número crescente de partículas, vemos se deslocar à esquerda o mínimo da derivada de $\mathcal{P}_{su(2)}$, que também se torna cada vez mais acentuado. Definimos o valor do parâmetro de autocolisão para o mínimo da derivada da pureza como o valor crítico de transição da dinâmica quântica $\kappa_c^q(N)$.

Já é claro que valor de $\kappa_c^q(N)$ se aproxima do valor de transição clássico $\kappa_c = \frac{\Omega}{2N}$ para N crescente, mas ainda precisamos identificar como ocorre esta aproximação. Na figura 2.1.17 temos os valores de $\text{Ln} \left[\frac{N(\kappa_c^q - \kappa_c)}{\Omega} \right]$, calculados numericamente nas cinco curvas do gráfico 2.1.16, em função de $\text{Ln}(N)$. É nítido que estes cinco pontos sugerem uma lei de potência entre $(\kappa_c^q - \kappa_c)$ e N . Realizando um ajuste linear nos dados, obtemos:

$$\kappa_c^q - \kappa_c = \frac{\Omega}{N} e^{0,31 \pm 0,05} N^{-0,657 \pm 0,009} \propto N^{-1,657 \pm 0,009}. \quad (2.1.57)$$

É evidente na equação (2.1.57) que $\kappa_c^q \rightarrow \kappa_c$ quando $N \rightarrow \infty$. Assim, concluímos que a pureza generalizada é uma boa medida indicativa de transições de fase quânticas. Quando um estado sofre modificações fundamentais decorrentes de uma transição, sua pureza deve acompanhar seu comportamento, pois contém toda sua informação de coerência e grau de localização sobre o espaço de fase.

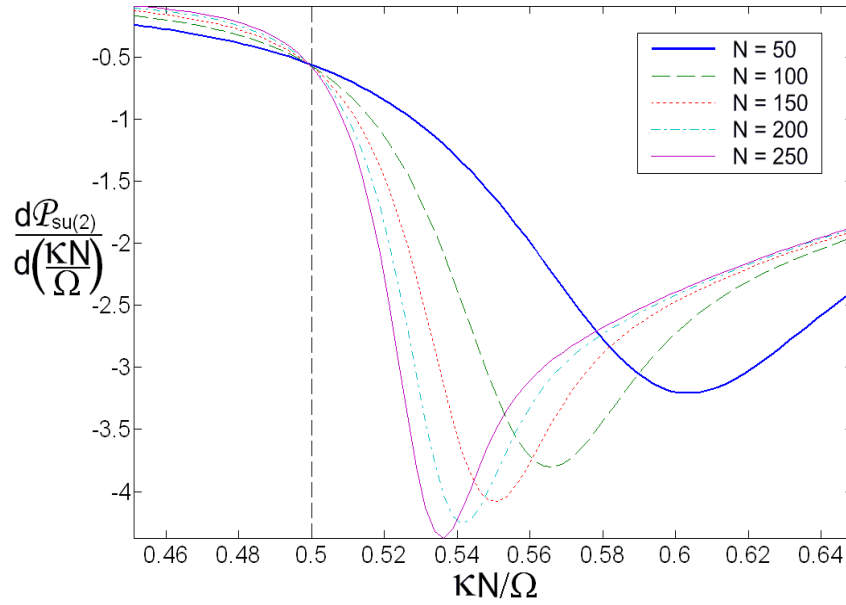


Figura 2.1.16: Derivada da pureza generalizada do auto-estado de maior energia em relação à taxa de autocolisão normalizada $\frac{\kappa N}{\Omega}$ para vários valores do número total de partículas N . A reta vertical tracejada representa o valor do parâmetro de transição clássico $\frac{\kappa_c N}{\Omega} = \frac{1}{2}$. Note que todas as curvas para sistemas finitos se cruzam justamente neste valor crítico clássico.

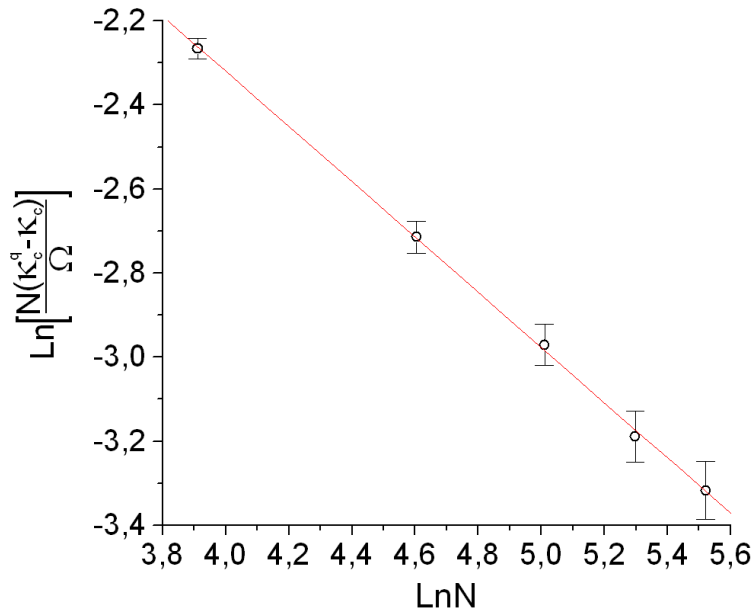


Figura 2.1.17: Gráfico de $\text{Ln} \left[\frac{N(\kappa_c^q - \kappa_c)}{\Omega} \right]$ em função de $\text{Ln}(N)$ para os cinco valores encontrados na figura 2.1.16. O ajuste linear sobre estes dados nos fornece uma lei de potência entre $(\kappa_c^q - \kappa_c)$ e N .

2.2 Princípio Variacional Dependente do Tempo

As equações de movimento para um estado parametrizado arbitrário $|\psi\rangle$, pertencente a um espaço de Hilbert $\mathbb{H}$, podem ser encontradas utilizando o princípio variacional dependente do tempo (PVDT). Primeiramente definimos o funcional de ação entre os tempos t_1 e t_2 :

$$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} dt L(|\psi\rangle, \langle\psi|); \quad (2.2.1)$$

onde $L(|\psi\rangle, \langle\psi|)$ é a Lagrangiana funcional do sistema quando consideramos o estado $|\psi\rangle$ e seu dual $\langle\psi|$ como formalmente independentes. Então, o PVDT consiste em extremizar o funcional S , considerando variações independentes no estado denotadas por $|\delta\psi\rangle$ e $\langle\delta\psi|$:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L(|\psi\rangle, \langle\psi|) = 0. \quad (2.2.2)$$

As variações em $|\psi(t)\rangle$ e $\langle\psi(t)|$ são consideradas arbitrárias, exceto nos extremos do intervalo de integração, onde:

$$|\delta\psi(t_1)\rangle = |\delta\psi(t_2)\rangle = \langle\delta\psi(t_1)| = \langle\delta\psi(t_2)| = 0. \quad (2.2.3)$$

A Lagrangiana funcional do sistema deve ser escolhida de forma que as “equações corretas” de movimento sejam obtidas do princípio variacional. A “equação correta” procurada, que deve fornecer a dinâmica quântica de um sistema conservativo não-relativístico com Hamiltoniano H , é a bem conhecida equação de Schrödinger:

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (2.2.4)$$

Uma Lagrangiana funcional adequada é dada por:

$$L'(|\psi\rangle, \langle\psi|) = \langle\psi(t)| \left(i \frac{d}{dt} - H \right) |\psi(t)\rangle. \quad (2.2.5)$$

Note que consideramos desde já $\hbar = 1$. Substituindo L' em (2.2.2), obtemos facilmente (2.2.4), após uma integração por partes:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L' \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \langle\delta\psi| \left(i \frac{d}{dt} - H \right) |\psi\rangle + \langle\psi| \left(i \frac{d}{dt} - H \right) |\delta\psi\rangle \right\} \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \langle\delta\psi| \left(i |\dot{\psi}\rangle - H |\psi\rangle \right) + \left(-i \langle\dot{\psi}| - \langle\psi| H \right) |\delta\psi\rangle \right\} + i \langle\psi| \delta\psi \Big|_{t_1}^{t_2}. \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Aqui introduzimos a notação $|\dot{\psi}\rangle$ para a derivada temporal do estado. De (2.2.3), notamos que o termo integrado em (2.2.6) é nulo. Como as variações $|\delta\psi\rangle$ e $\langle\delta\psi|$ são independentes, para que a

variação de S seja nula e caracterize um extremo, devemos ter que as duas expressões entre parênteses na última equação em (2.2.6) devem também se anular independentemente, fornecendo claramente a equação de Schrödinger e sua adjunta.

No entanto, muitas vezes é conveniente trabalhar com um estado $|\psi\rangle$ não normalizado e neste caso a Lagrangiana (2.2.5) geralmente não é real, pois quando lidamos com estados não normalizados o operador $i\frac{d}{dt}$ é não Hermitiano:

$$\begin{aligned}\langle\psi'|i\frac{d}{dt}|\psi\rangle &= i\frac{d}{dt}\langle\psi'|\psi\rangle - i\langle\dot{\psi}'|\psi\rangle \\ &= i\frac{d}{dt}\langle\psi'|\psi\rangle + (\langle\psi|i\frac{d}{dt}|\psi'\rangle)^*.\end{aligned}\tag{2.2.7}$$

Logo, se os estados são normalizados, o primeiro termo à direita de (2.2.7) é a derivada de uma constante e o operador é Hermitiano. Vemos também que a parte imaginária de L' , quando calculada em um estado não normalizado, aparece como uma derivada total no tempo. Portanto, quando aplicamos o princípio variacional $\delta S = 0$, esta parte imaginária só contribui com variações nos extremos do intervalo de integração, anulando-se e não alterando as equações de movimento.

Mesmo que a parte imaginária de L' não influa nas equações de movimento, vemos que esta Lagrangiana produz equações de movimento dependentes da normalização do estado. Como estados matematicamente distintos por uma normalização ou uma fase global são fisicamente idênticos, equações de movimento para diferentes normalizações seriam fisicamente iguais. Contudo, é bastante conveniente desacoplar a evolução da normalização e fase global do conteúdo físico do estado, impondo que as equações de movimento sejam invariantes pela transformação:

$$|\psi\rangle \rightarrow f(t)|\psi\rangle, \quad f(t) \text{ função complexa.} \tag{2.2.8}$$

A Lagrangiana que produz as equações de movimento corretas e satisfaz (2.2.8) é dada por:

$$L(|\psi\rangle, \langle\psi|) = \frac{i}{2} \frac{\langle\psi|\dot{\psi}\rangle - \langle\dot{\psi}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} - \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \tag{2.2.9}$$

Comparando com (2.2.7), é imediato que L é real, mesmo para estados não normalizados. É interessante verificarmos que (2.2.9) satisfaz a invariância das equações de movimento por uma transformação de normalização e fase:

$$\begin{aligned}L_f(f|\psi\rangle, f^*\langle\psi|) &= \frac{i}{2} \frac{f^*\langle\psi|(\dot{f}|\psi\rangle + f|\dot{\psi}\rangle) - (f^*\langle\dot{\psi}| + f^*\langle\dot{\psi}|)f|\psi\rangle}{f^*f\langle\psi|\psi\rangle} - \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\ &= L(|\psi\rangle, \langle\psi|) + \frac{i}{2} \frac{d}{dt} \ln \frac{f}{f^*}.\end{aligned}\tag{2.2.10}$$

Então, L e L_f diferem por uma derivada total no tempo, que se anula na aplicação do PVDT, e assim ambas resultam nas mesmas equações de movimento.

É importante mostrar também que as equações de movimento obtidas de L são consistentes com a equação de Schrödinger. Novamente, aplicando (2.2.2) e após várias integrações por partes, obtemos:

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \frac{i}{2} \frac{\langle\delta\psi|\dot{\psi}\rangle + \langle\psi|\delta\dot{\psi}\rangle - \langle\delta\dot{\psi}|\psi\rangle - \langle\dot{\psi}|\delta\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} - \delta \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} - \frac{i}{2} \left[\frac{\langle\psi|\dot{\psi}\rangle - \langle\dot{\psi}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle^2} - \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle^2} \right] \delta\langle\psi|\psi\rangle \right\} \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \frac{\langle\delta\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \left[i|\dot{\psi}\rangle - H|\psi\rangle - \left(i\langle\psi|\dot{\psi}\rangle - \langle\psi|H|\psi\rangle \right) \frac{|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \right] + \text{Hermitiano conjugado} \right\} \equiv 0.\end{aligned}\tag{2.2.11}$$

Para variações independentes em $|\delta\psi\rangle$ e $\langle\delta\psi|$, o termo entre colchetes e seu Hermitiano conjugado se anulam independentemente. Assim obtemos a equação de movimento para $|\psi\rangle$, juntamente com sua equação adjunta:

$$\left(i\frac{d}{dt} - H\right)|\psi\rangle = \frac{\langle\psi|i\frac{d}{dt} - H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}|\psi\rangle. \quad (2.2.12)$$

Esta equação é fisicamente equivalente à equação de Schrödinger, pois basta multiplicarmos $|\psi\rangle$ por uma fase global dependente do tempo adequada e recuperamos (2.2.4):

$$|\psi\rangle \equiv |\phi\rangle \exp\left(-i\int_{t_0}^t dt' \frac{\langle\psi|i\frac{d}{dt'} - H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right). \quad (2.2.13)$$

Então, substituindo (2.2.13) em (2.2.12), obtemos facilmente a equação de Schrödinger para $|\phi\rangle$. Como este difere de $|\psi\rangle$ apenas por uma fase global, obtemos estados e, conseqüentemente, equações de movimento de mesmo conteúdo físico.

Agora, parametrizamos a dependência temporal do estado $|\psi(t)\rangle$ em $2r$ parâmetros independentes contínuos:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(x_1(t), \dots, x_{2r}(t))\rangle = |\psi(\vec{x})\rangle. \quad (2.2.14)$$

Um ponto importante nesta parametrização é que ela não necessariamente deve cobrir todo espaço de Hilbert d -dimensional $\mathbb{H}$ quando os $2r$ parâmetros variam dentro de todo o seu domínio M . O problema quântico exato, no qual precisamos de $2r = d$ coeficientes complexos para parametrizar um estado arbitrário de $\mathbb{H}$ ou $2r = d - 1$ se considerarmos a liberdade física de fase global e normalização, pode ser simplificado se escolhermos os $2r$ parâmetros de forma a gerar apenas um subespaço $s(M)$ de $\mathbb{H}$ adequado ao nosso problema. Então, geralmente o subespaço $s(M)$ não é linear; ou seja, a soma de dois estados parametrizados nem sempre é um terceiro estado parametrizado em $s(M)$. Com a perda da linearidade do espaço de estados, abrimos mão do princípio de superposição, uma característica quântica fundamental, e assim fazemos a primeira “classicalização” de nosso sistema.

O PVDT sempre fornece uma solução para a dinâmica associada ao Hamiltoniano H quando aplicado a uma parametrização qualquer da forma (2.2.14), mas a qualidade desta solução, em relação à solução quântica exata, depende essencialmente da escolha correta dos parâmetros $\vec{x} \in M$, especialmente quando $2r < d$. Nesta seção ainda não nos preocupamos com esta escolha, pois o PVDT por si só não indica os parâmetros ótimos em cada problema, apenas nos diz quais são as equações de movimento mais adequadas, em comparação com a equação de Schrödinger, para cada escolha possível de $\vec{x}$ e $s(M)$.

Substituindo (2.2.14) em (2.2.9) e realizando as derivadas temporais, obtemos:

$$L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^{2r} \left(\frac{\langle\psi|\partial_j\psi\rangle - \langle\partial_j\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \dot{x}_j \right) - \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}; \quad (2.2.15)$$

onde utilizamos a notação $\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial x_j} = |\partial_j\psi\rangle$ e $\frac{\partial\langle\psi|}{\partial x_j} = \langle\partial_j\psi|$. Agora, definimos duas funções em M , evidentes de (2.2.15):

$$Z_j(\vec{x}) \equiv \frac{i}{2} \frac{\langle \psi | \partial_j \psi \rangle - \langle \partial_j \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}; \quad (2.2.16)$$

$$\mathcal{H}(\vec{x}) \equiv \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (2.2.17)$$

A Lagrangiana nas variáveis $\vec{x}$ fica:

$$L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \sum_{j=1}^{2r} \dot{x}_j Z_j(\vec{x}) - \mathcal{H}(\vec{x}). \quad (2.2.15')$$

Aplicando o PVDT à Lagrangiana dependente em $\vec{x}$ e $\dot{\vec{x}}$ obtemos as seguintes condições de extremização do funcional de ação, conhecidas como equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial x_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, 2r; \quad (2.2.18)$$

onde usamos que $|\delta\psi(t_1)\rangle = |\delta\psi(t_2)\rangle = 0$ equivale a $\delta x_j(t_1) = \delta x_j(t_2) = \delta \dot{x}_j(t_1) = \delta \dot{x}_j(t_2) = 0$. Substituindo (2.2.15') nas equações de Euler-Lagrange, obtemos as equações de movimento para os parâmetros:

$$\sum_{j=1}^{2r} \eta_{ij} \dot{x}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i}; \quad (2.2.19)$$

ou, em uma forma mais compacta:

$$\eta \dot{\vec{x}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{x}}. \quad (2.2.19')$$

O tensor η , que fornece a geometria das equações de movimento, é imediatamente encontrado de (2.2.18) como:

$$\eta_{ij} \equiv \frac{\partial Z_j}{\partial x_i} - \frac{\partial Z_i}{\partial x_j}. \quad (2.2.20)$$

Vemos em (2.2.19) que as equações de movimento obtidas do PVDT têm a mesma forma da mecânica clássica; ou seja, derivadas de primeira ordem nas coordenadas generalizadas de uma Hamiltoniana funcional $\mathcal{H}(\vec{x})$, definida em (2.2.17), fornecem sistemas lineares para as velocidades generalizadas. Como esperado, a função responsável pela dinâmica no PVDT é dependente do Hamiltoniano quântico H , sendo simplesmente sua média no estado $|\psi\rangle$. Já o tensor $\eta(\vec{x})$ é responsável pela geometria das equações de movimento e tem caráter apenas cinemático, pois depende somente de derivadas de segunda ordem nos parâmetros da sobreposição $\langle \psi(\vec{x}') | \psi(\vec{x}) \rangle$, como veremos a seguir.

Podemos verificar as seguintes propriedades, diretamente da definição de η :

$$\eta_{ij} = -\eta_{ji}; \quad (2.2.21.a)$$

$$\frac{\partial \eta_{ij}}{\partial x_k} + \frac{\partial \eta_{jk}}{\partial x_i} + \frac{\partial \eta_{ki}}{\partial x_j} = 0; \quad (2.2.21.b)$$

$$\eta_{jk} = i \left(\frac{\partial}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x'_k} \right) \ln \langle \psi(\vec{x}') | \psi(\vec{x}) \rangle \Big|_{\vec{x}=\vec{x}'}. \quad (2.2.21.c)$$

Esta última propriedade é bastante útil no cálculo de η para uma dada parametrização do estado $|\psi\rangle$. Da antissimetria de η em (2.2.21.a), temos que a Hamiltoniana $\mathcal{H}$ é uma função conservada pela dinâmica classicalizada do sistema:

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} \dot{x}_i = \sum_{i,j} \eta_{ij} \dot{x}_i \dot{x}_j = 0. \quad (2.2.22)$$

Outra propriedade interessante é a lei de transformação de η por reparametrização do espaço M , onde vemos que este é um tensor duplamente covariante. Utilizando (2.2.21.c) em uma mudança de variáveis $\vec{x} \leftrightarrow \vec{y}$, temos:

$$\begin{aligned} \bar{\eta}_{jk} &= i \left(\frac{\partial}{\partial y'_j} \frac{\partial}{\partial y_k} - \frac{\partial}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial y'_k} \right) \ln \langle \psi(\vec{y}') | \psi(\vec{y}) \rangle \Big|_{\vec{y}=\vec{y}'} \\ &= i \sum_{l,m} \frac{\partial x_l}{\partial y_j} \frac{\partial x_m}{\partial y_k} \left(\frac{\partial}{\partial x'_l} \frac{\partial}{\partial x_m} - \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial}{\partial x'_m} \right) \ln \langle \psi(\vec{x}') | \psi(\vec{x}) \rangle \Big|_{\vec{x}=\vec{x}'} \\ &= \sum_{l,m=1}^{2r} \mathcal{T}_{lj}^{-1} \eta_{lm} \mathcal{T}_{mk}^{-1}; \end{aligned} \quad (2.2.23)$$

onde definimos a matriz de transformação:

$$\mathcal{T}_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial x_j}. \quad (2.2.24)$$

Podemos reescrever compactamente (2.2.23) na forma matricial:

$$\bar{\eta} = (\mathcal{T}^{-1})^T \eta \mathcal{T}^{-1}. \quad (2.2.23')$$

Então, se quisermos obter equações de movimento de mesma forma das equações canônicas de Hamilton, devemos buscar a transformação entre parametrizações tal que:

$$\bar{\eta} = \mathbb{J}^{-1} = -\mathbb{J}, \quad (2.2.25)$$

onde $\mathbb{J}$ é a matriz $2r \times 2r$ constituída de blocos $r \times r$ da seguinte forma:

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.26)$$

Se η é não degenerado ($\det \eta \neq 0$) para todo $\vec{x} \in M$, podemos definir seu tensor inverso:

$$\xi \equiv \eta^{-1}. \quad (2.2.27)$$

Assim, reescrevemos as equações de movimento na forma mais usual:

$$\dot{\vec{x}} = \xi \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{x}}. \quad (2.2.28)$$

Utilizando ξ , podemos também definir os parênteses de Poisson generalizados:

$$\begin{aligned} \{f(\vec{x}), g(\vec{x})\} &\equiv \sum_{j,k} \frac{\partial f}{\partial x_j} \xi_{jk} \frac{\partial g}{\partial x_k} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \vec{x}}^T \xi \frac{\partial g}{\partial \vec{x}}. \end{aligned} \quad (2.2.29)$$

Podemos verificar que esta operação bilinear satisfaz todas propriedades que esperamos em comparação com a mecânica clássica:

$$\{f, g\} = -\{g, f\}; \quad (2.2.30.a)$$

$$\{\{f, g\}, h\} + \{\{g, h\}, f\} + \{\{h, f\}, g\} = 0; \quad (2.2.30.b)$$

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + \{f, h\}g; \quad (2.2.30.c)$$

$$\{x_j, x_k\} = \xi_{jk}. \quad (2.2.30.d)$$

Também podemos escrever a equação de movimento de uma função qualquer sobre M utilizando os parênteses de Poisson generalizados:

$$\{x_i, \mathcal{H}\} = \sum_{j,k} \delta_{ij} \xi_{jk} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_k} = \dot{x}_i; \quad (2.2.31.a)$$

$$\{f(\vec{x}), \mathcal{H}\} = \sum_{j,k} \frac{\partial f}{\partial x_j} \xi_{jk} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_k} = \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_j} \dot{x}_j = \frac{df}{dt}. \quad (2.2.31.b)$$

Tomando como exemplo a Hamiltoniana $\mathcal{H}$, que é obtida do operador Hamiltoniano H tomando sua média nos estados parametrizados, vemos que de forma geral podemos associar um operador observável O sobre o espaço de Hilbert a uma função sobre M , da seguinte maneira:

$$\mathcal{O}(\vec{x}) = \frac{\langle \psi(\vec{x}) | O | \psi(\vec{x}) \rangle}{\langle \psi(\vec{x}) | \psi(\vec{x}) \rangle}, \quad (2.2.32)$$

A dinâmica de $\mathcal{O}$ sobre o espaço de fase é dada imediatamente por (2.2.31.b).

Agora, consideremos o caso particular de uma parametrização na qual os $2r$ parâmetros são r variáveis complexas z_i e suas r complexo conjugadas z_i^* , estas tomadas formalmente como parâmetros independentes:

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_r \\ z_1^* \\ \vdots \\ z_r^* \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \vec{z} \\ \vec{z}^* \end{pmatrix}. \quad (2.2.33)$$

Geralmente podemos escolher a dependência de (2.2.14) apenas nas variáveis $\vec{z}$:

$$|\psi(\vec{z})\rangle = |\psi(z_1, \dots, z_r)\rangle. \quad (2.2.34)$$

Logo, seu estado dual $\langle\psi(\vec{z})|$ deve depender apenas das variáveis complexo conjugadas $\vec{z}^*$. Considerando a ordem dos parâmetros de (2.2.33) e a independência $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|$) em $\vec{z}^*$ ($\vec{z}$), o tensor η toma uma forma simples de blocos:

$$\eta = i \begin{pmatrix} 0 & -C \\ C^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2.35)$$

onde os elementos do bloco $(C)_{r \times r}$ são dados por:

$$C_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j^*} \ln \langle\psi(\vec{z})|\psi(\vec{z})\rangle. \quad (2.2.36)$$

Neste caso, as equações de movimento, quando consideradas juntamente com suas equações complexo conjugadas, assumem a seguinte forma:

$$iC^* \vec{z} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{z}^*}. \quad (2.2.19'')$$

Se $\det C(\vec{z}, \vec{z}^*) \neq 0$ para todo $\vec{z}$, os parênteses de Poisson generalizados nestas variáveis ficam:

$$i\{f, g\} = \frac{\partial f^T}{\partial \vec{z}} (C^*)^{-1} \frac{\partial g}{\partial \vec{z}^*} - \frac{\partial f^T}{\partial \vec{z}^*} C^{-1} \frac{\partial g}{\partial \vec{z}}. \quad (2.2.29')$$

Neste capítulo apresentamos o modelo de um condensado de Bose-Einstein aprisionado em um potencial de poço triplo^{3.1}. Apesar de já existir uma literatura teórica de tamanho considerável sobre o assunto produzida nos últimos anos [LFYL07, NHMM00, MJ06, FP01, FP03, BFP03, BFP, SAZ07], observamos que os efeitos da interação bosônica entre diferentes modos locais são habitualmente negligenciados. Portanto, discutimos na seção 3.1 a verdadeira relevância das denominadas **colisões cruzadas**, que geralmente são consideradas uma correção de menor ordem na dinâmica do condensado [dCdO, dC06].

A estrutura algébrica natural do sistema começa a ser explorada na seção 8.3, onde reescrevemos o Hamiltoniano do modelo em termos dos geradores do grupo $SU(3)$, também realizando a interpretação destes operadores como os observáveis fundamentais na descrição do comportamento de muitos bósons.

3.1 Modelo de um Condensado em Poço Triplo

Considere um potencial $V(\vec{r})$ de aprisionamento de bósons neutros e sem spin. Supomos que o potencial $V(\vec{r})$ possui três mínimos globais equivalentes nas posições $\vec{r}_i = x_i\hat{x} + y_i\hat{y} + z_i\hat{z}$ ($i = 1, 2, 3$) e que na direção cartesiana z o potencial seja harmônico simples de frequência angular ω . Sem perda de generalidade, escolhemos potencial nulo nos mínimos, simbolicamente $V(\vec{r}_i) = 0$.

Então, para uma partícula de massa m , podemos modelar um potencial com estas características por:

$$V(\vec{r}) = \frac{b}{q_0^4} \prod_{i=1}^3 [(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2] + \frac{m\omega^2}{2} z^2; \quad (3.1.1)$$

onde q_0 é a distância de cada mínimo à origem do sistema de coordenadas. Como os três mínimos são supostamente equivalentes, o potencial de (3.1.1) deve ser simétrico por rotações de $\frac{2\pi}{3}$ em torno do eixo z . Então, como indicado na figura 3.1.1, juntamente com uma representação do potencial, escolhemos as posições dos mínimos da seguinte forma:

^{3.1}O potencial de aprisionamento pode ter seus três poços dispostos de várias formas. Neste trabalho consideramos somente o caso em que os poços são distribuídos simetricamente no formato de um anel.

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= -\frac{1}{2}q_0\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}q_0\hat{y}; \\
\vec{r}_2 &= -\frac{1}{2}q_0\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}q_0\hat{y}; \\
\vec{r}_3 &= q_0\hat{x}.
\end{aligned} \tag{3.1.2}$$

Já o parâmetro b em (3.1.1) representa um possível ajuste na altura da barreira de potencial localizada na origem entre os três mínimos, cujo valor é $V(0) = bq_0^2$.

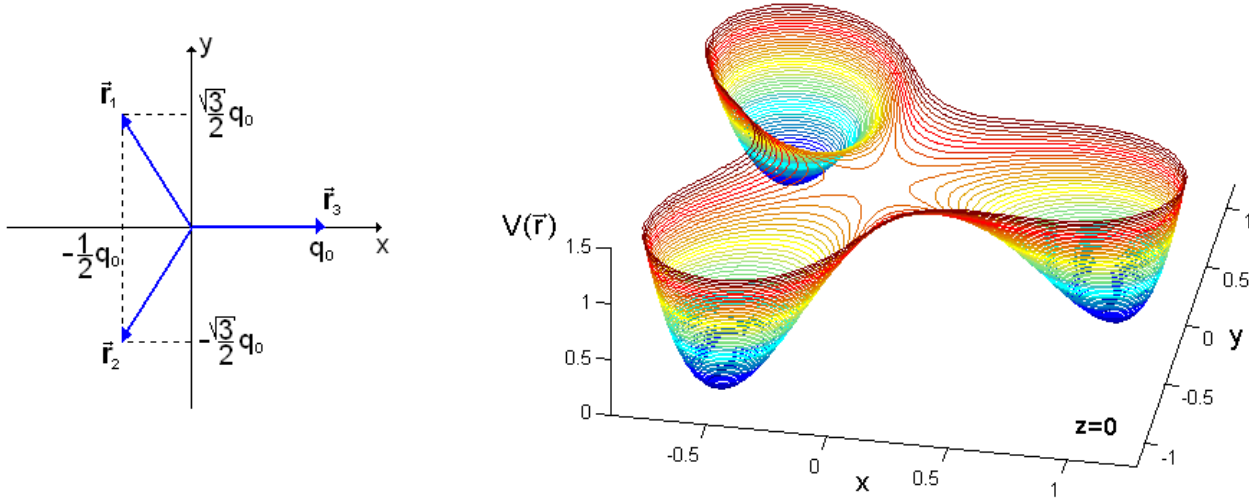


Figura 3.1.1: À esquerda temos as posições dos três mínimos no plano $z = 0$. À direita vemos um gráfico do corte $z = 0$ do potencial de três poços (3.1.1) para $q_0 = b = 1$.

Se considerarmos a barreira de potencial suficientemente alta e os mínimos suficientemente distantes, tornamos o poço de potencial associado a cada mínimo praticamente independente. Desta forma, o potencial $V(\vec{r})$ representa uma pequena variação em relação a sua aproximação harmônica em torno de cada mínimo, dada por:

$$\begin{aligned}
V_i^{(2)}(\vec{r}) &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(\vec{r}_i)}{\partial x^2} (x - x_i)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(\vec{r}_i)}{\partial y^2} (y - y_i)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(\vec{r}_i)}{\partial z^2} (z - z_i)^2 \\
&= 9b(x - x_i)^2 + 9b(y - y_i)^2 + \frac{m\omega^2}{2} z^2; \quad i = 1, 2, 3.
\end{aligned} \tag{3.1.3}$$

Nesta última equação omitimos as derivadas cruzadas de $V(\vec{r})$ na expansão de Taylor, pois claramente são todas nulas quando calculadas em $\vec{r}_i$. Podemos agora fazer uma escolha simplificadora, ajustando o valor do parâmetro b tal que a aproximação harmônica $V_i^{(2)}(\vec{r})$ torne-se o potencial de um oscilador harmônico tridimensional isotrópico centrado em $\vec{r}_i$. Então, escolhendo:

$$b = \frac{m\omega^2}{18}; \tag{3.1.4}$$

Podemos reescrever (3.1.3) como:

$$V_i^{(2)}(\vec{r}) = \frac{m\omega^2}{2} [(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2]; \quad i = 1, 2, 3. \tag{3.1.3'}$$

O estado fundamental de uma partícula colocada em um oscilador harmônico isotrópico é muito bem conhecido. Então, podemos associar a cada $V_i^{(2)}(\vec{r})$, tomado independentemente, um estado localizado de menor energia, ou seja:

$$u_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | u_i \rangle = \frac{1}{\pi^{3/4} d^{3/2}} e^{-\frac{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}{2d^2}}, \quad i = 1, 2, 3; \quad (3.1.5)$$

onde d é a largura da Gaussiana, dada por:

$$d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (3.1.6)$$

Assim, definindo um Hamiltoniano de partícula única em poço independente $H_i \equiv \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_i^{(2)}(\vec{r})$, temos que os estados de (3.1.5) satisfazem a seguinte equação de autovalores, considerando daqui em diante unidades tais que $\hbar = 1$:

$$H_i |u_i\rangle = E |u_i\rangle; \text{ com } E = \frac{3\omega}{2}. \quad (3.1.7)$$

Ou seja, a cada potencial harmônico independente associamos um estado localizado de energia E . No entanto, se considerarmos o potencial completo dado por (3.1.1), tal que a distância $\sqrt{3}q_0$ entre dois mínimos é muito maior que a largura d das Gaussianas, podemos mostrar que os estados localizados em cada poço são praticamente ortogonais:

$$\langle u_i | u_j \rangle = \int d^3r u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) = \delta_{ij} + \varepsilon(1 - \delta_{ij}); \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (3.1.8)$$

Calculando a integral acima, encontramos o valor da sobreposição ε em função dos parâmetros do potencial. É evidente que $\varepsilon \ll 1$ se $d \ll q_0$:

$$\varepsilon = e^{-\frac{3q_0^2}{4d^2}}. \quad (3.1.9)$$

Os estados localizados $|u_i\rangle$ não são auto-estados do Hamiltoniano completo de partícula única H , mas sob certas hipóteses podemos mostrar que estes estados geram o mesmo subespaço do espaço de Hilbert de partícula única que os três auto-estados de mais baixa energia de H . Primeiramente, escrevemos o Hamiltoniano completo de partícula única da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_i^{(2)}(\vec{r}) + \left(V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r}) \right) \\ &= H_i + \left(V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r}) \right); \quad i = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Escolhendo uma frequência ω conveniente e, conseqüentemente, ajustando a altura da barreira de potencial por meio da equação (3.1.4), podemos garantir que apenas os três níveis mais baixos do espectro de H , que denominamos $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$ e $|e_3\rangle$, possuam energia inferior a $V(0) = bq_0^2$. Ainda mais, supomos que isto pode ser feito de maneira que os demais estados do espectro se encontrem bem afastados dos três fundamentais. Então, se a altura da barreira for suficientemente maior que a energia de um estado localizado para $\varepsilon \ll 1$, podemos afirmar que os poços são praticamente independentes para os estados de baixa energia e que os estados fundamentais de H são aproximadamente combinações

lineares dos estados localizados $|u_i\rangle$ induzidas pelo pequeno acoplamento entre os poços. Este acoplamento entre os três poços de potencial é gerado pelo termo perturbativo $(V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r}))$ de (3.1.10), ou seja:

$$\begin{aligned}\langle u_j|H|u_i\rangle &= \langle u_j|H_i|u_i\rangle + \langle u_j|(V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r}))|u_i\rangle \\ &\equiv E[\delta_{ij} + \varepsilon(1 - \delta_{ij})] + \Delta\delta_{ij} + g(1 - \delta_{ij}); \quad i, j = 1, 2, 3.\end{aligned}\tag{3.1.11}$$

Nesta última equação, introduzimos o parâmetro de acoplamento g entre os poços e a correção de primeira ordem Δ nas energias dos estados locais, devida à presença de termos anarmônicos no potencial. A simetria de rotação do sistema nos permite a seguinte definição destes parâmetros, independentemente de uma escolha específica dos valores dos índices dos poços:

$$\begin{aligned}\Delta &\equiv \langle u_i|V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r})|u_i\rangle = \int d^3r u_i^*(\vec{r}) (V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r})) u_i(\vec{r}); \\ g &\equiv \langle u_j|V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r})|u_i\rangle = \int d^3r u_j^*(\vec{r}) (V(\vec{r}) - V_i^{(2)}(\vec{r})) u_i(\vec{r}), \text{ para } i \neq j.\end{aligned}\tag{3.1.12}$$

Utilizando as funções de onda (3.1.5) e as expressões explícitas do potencial e de sua aproximação harmônica, calculamos o valor da correção das energias dos estados localizados:

$$\Delta = \frac{(d^2 + 3q_0^2)d^2}{3q_0^4}\omega \approx \frac{1}{mq_0^2}.\tag{3.1.13}$$

Na segunda equação de (3.1.13) usamos a aproximação hipotética $q_0 \gg d$ e a identidade (3.1.6). Realizando também a integral (3.1.12) para o parâmetro de acoplamento, obtemos:

$$g = \frac{m\omega^2}{q_0^4} \left(\frac{128d^6 + 96d^4q_0^2 - 180d^2q_0^4 - 117q_0^6}{384} \right) \varepsilon \approx -\frac{39}{128}m\omega^2q_0^2\varepsilon.\tag{3.1.13'}$$

Vemos claramente que o valor de g é negativo para $q_0 \gg d$ e que o fator ε é dominante em sua ordem de grandeza, pois cai com a exponencial da razão $\frac{q_0^2}{d^2}$.

Agora, reescrevemos os elementos de matriz de H no subespaço gerado pelos estados $|u_i\rangle$, definindo a taxa de tunelamento Ω e a energia corrigida E' :

$$\begin{aligned}\langle u_j|H|u_i\rangle &= (E + \Delta)\delta_{ij} + (g + \varepsilon E)(1 - \delta_{ij}) \\ &\equiv E'\delta_{ij} + \Omega(1 - \delta_{ij}).\end{aligned}\tag{3.1.14}$$

Por hipótese, estes elementos formam um bloco da representação matricial de H , na base aproximadamente ortogonal formada pelos estados localizados. Esta representação, correta que até primeira ordem em ε , é dada por:

$$H \doteq \left(\begin{array}{ccc|c} E' & \Omega & \Omega & 0 \\ \Omega & E' & \Omega & \\ \Omega & \Omega & E' & \\ \hline 0 & & & \ddots \end{array} \right).\tag{3.1.14'}$$

Note que o sinal de Ω também depende dos valores relativos entre as constantes m , ω e q_0 :

$$\Omega = \left[\frac{m\omega^2}{q_0^4} \left(\frac{128d^6 + 96d^4q_0^2 - 180d^2q_0^4 - 117q_0^6}{384} \right) + \frac{3\omega}{2} \right] \varepsilon. \quad (3.1.15)$$

Novamente, para $q_0 \gg d$, podemos tomar apenas o termo de maior ordem em q_0 de (3.1.15). Neste caso, Ω tem sinal negativo se:

$$\Omega \approx -\frac{39}{128}m\omega^2q_0^2\varepsilon + \frac{3}{2}\omega\varepsilon < 0 \rightarrow m\omega q_0^2 = \frac{q_0^2}{d^2} > \frac{64}{13}. \quad (3.1.16)$$

Portanto, vemos que Ω geralmente é negativo para nosso arranjo experimental idealizado, pois a inequação já é aproximadamente satisfeita se q_0 excede d por um fator superior a $\sqrt{5}$.

Diagonalizando o bloco de matriz dado em (3.1.14'), obtemos os três estados fundamentais de H em termos dos estados localizados, juntamente com seus autovalores correspondentes em aproximação de primeira ordem em ε .

$$\begin{cases} |e_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle - |u_3\rangle), \quad E_1 = E' - \Omega; \\ |e_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|u_1\rangle - 2|u_2\rangle + |u_3\rangle), \quad E_2 = E' - \Omega; \\ |e_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|u_1\rangle + |u_2\rangle + |u_3\rangle), \quad E_3 = E' + 2\Omega. \end{cases} \quad (3.1.17)$$

Como o valor de Ω é de ordem ε , vemos que estes três estados formam uma estrutura bastante fina do espectro de H . Mais do que isso, os estados $|e_1\rangle$ e $|e_2\rangle$ são degenerados na ordem de aproximação utilizada.

Até o momento tratamos de um sistema de uma única partícula. Se passarmos a considerar um sistema em **baixíssima temperatura**, como um condensado de Bose-Einstein, composto por N **bósons idênticos**, não-interagentes e sem spin, esperamos que apenas os estados $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$ e $|e_3\rangle$ de H estejam significativamente populados, pois são os três estados fundamentais praticamente degenerados e afastados dos demais estados do espectro, por hipótese. Esperamos também que a estrutura de níveis de energia não se altere radicalmente se adicionarmos ao sistema interações suficientemente fracas entre as partículas, de maneira que os estados relevantes ao sistema continuem sendo somente os três estados fundamentais.

Considerando apenas colisões de partículas aos pares^{3,2}, o Hamiltoniano de muitas partículas para um condensado em um potencial de poço triplo é dado segundo (8.1.41') e (8.1.48).

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) H(\vec{r}, \vec{\nabla}) \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \mathcal{V}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}). \quad (3.1.18)$$

Em (3.1.18), $H(\vec{r}, \vec{\nabla})$ é a representação de coordenadas do Hamiltoniano de partícula única (3.1.10), $\mathcal{V}(\vec{r}, \vec{r}')$ é o potencial de interação de partículas aos pares e $\hat{\psi}(\vec{r})$ é o operador de campo. O operador $\hat{\psi}(\vec{r})$ pode ser expandido em uma base arbitrária $\{|\alpha_i\rangle\}$ do espaço de Hilbert, segundo a equação abaixo:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_i \langle \vec{r} | \alpha_i \rangle a_i, \quad (8.1.42)$$

onde a_i é o operador de aniquilação que destrói uma partícula no estado $|\alpha_i\rangle$. Os operadores a_i seguem as relações de comutação canônicas para bósons:

^{3,2}Ver, por exemplo, motivação exposta na seção 8.5.

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0; \quad (8.1.22)$$

$$[a_i, a_j] = 0; \quad (8.1.24)$$

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (8.1.30)$$

Como apenas três estados do sistema estão significativamente populados, aproximamos o operador de campo por uma expansão apenas nos três estados localizados que geram o subespaço de interesse, caracterizando uma aproximação de três modos:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) \cong u_1(\vec{r})a_1 + u_2(\vec{r})a_2 + u_3(\vec{r})a_3. \quad (3.1.19)$$

Desta vez, a_i é o operador de aniquilação no estado localizado $|u_i\rangle$.

Já a interação entre as partículas pode ser aproximada por um pseudopotencial do tipo esfera-dura, que leva em conta as interações de curto alcance para partículas com momento linear praticamente nulo:

$$\mathcal{V}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \equiv V_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.1.20)$$

onde a é o comprimento de espalhamento de onda s , negativo para interações atrativas e positivo para as repulsivas. Uma dedução detalhada do pseudopotencial de interação é encontrada na seção 8.5, juntamente com as hipóteses e motivações desta aproximação.

Substituindo (3.1.19) e (3.1.20) em (3.1.18) e utilizando o fato que as funções $u_i(\vec{r})$ são reais, obtemos:

$$\hat{H} = \sum_{i,j=1}^3 \int d^3r u_i(\vec{r}) H(\vec{r}, \vec{\nabla}) u_j(\vec{r}) a_i^\dagger a_j + \sum_{i,j,k,l=1}^3 \int d^3r u_i(\vec{r}) u_j(\vec{r}) u_k(\vec{r}) u_l(\vec{r}) a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l. \quad (3.1.21)$$

Agora, definimos um conjunto de parâmetros de colisão que permitem uma interpretação mais intuitiva do sistema:

$$\kappa \equiv \frac{V_0}{2} \int d^3r u_i^4(\vec{r}); \quad i = 1, 2, 3; \quad (3.1.22.a)$$

$$\eta \equiv \frac{V_0}{2} \int d^3r u_i^2(\vec{r}) u_j^2(\vec{r}); \quad i, j = 1, 2, 3, i \neq j; \quad (3.1.22.b)$$

$$\Lambda \equiv \frac{V_0}{2} \int d^3r u_i^3(\vec{r}) u_j(\vec{r}); \quad i, j = 1, 2, 3, i \neq j; \quad (3.1.22.c)$$

$$\xi \equiv \frac{V_0}{2} \int d^3r u_i^2(\vec{r}) u_j(\vec{r}) u_k(\vec{r}); \quad i, j, k = 1, 2, 3, \text{ todos índices diferentes.} \quad (3.1.22.d)$$

Os parâmetros (3.1.22.a)-(3.1.22.d) independem do conjunto de índices escolhidos para o cálculo das integrais envolvidas devido à simetria de rotação do sistema.

O parâmetro κ é denominado taxa de autocolisão, pois representa a magnitude das interações entre partículas presentes em um mesmo poço e que continuam nele após a colisão. Esta interpretação fica clara quando notamos que o parâmetro κ é proveniente da integral da função de onda de apenas um poço à quarta potência.

Os parâmetros η e Λ são denominados de taxas de colisão cruzada, pois representam a magnitude das interações envolvendo dois poços distintos durante o processo de colisão. Como vemos em (3.1.22.b) e (3.1.22.c), estes parâmetros dependem da integral da sobreposição de funções de onda localizadas em dois poços distintos, que por hipótese consideramos como uma pequena perturbação ao sistema. Conseqüentemente, esperamos que a ordem de grandeza destas taxas sejam bem inferiores à taxa de autocolisão κ .

Já o parâmetro ξ é denominado taxa de colisão cruzada tripla e representa a frequência de uma interação que envolve os três poços da armadilha durante a colisão. Como esta taxa depende da sobreposição das funções de onda localizadas nos três sítios do potencial simultaneamente, esperamos que esta seja uma aproximação ainda de maior ordem em ε que η e Λ .

De fato, calculando as integrais dadas em (3.1.22.a)-(3.1.22.d), encontramos:

$$\kappa = \frac{V_0}{2^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} d^3}; \quad (3.1.22.a')$$

$$\eta = \kappa e^{-\frac{3q_0^2}{2d^2}} = \kappa \varepsilon^2; \quad (3.1.22.b')$$

$$\Lambda = \kappa e^{-\frac{9q_0^2}{8d^2}} = \kappa \varepsilon^{\frac{3}{2}}; \quad (3.1.22.c')$$

$$\xi = \kappa e^{-\frac{15q_0^2}{8d^2}} = \kappa \varepsilon^{\frac{5}{2}}. \quad (3.1.22.d')$$

Vemos que os parâmetros de colisão não são todos independentes e precisamos de apenas dois para determinar os demais. No restante do trabalho escolhemos como parâmetros independentes a taxa de autocolisão κ e a taxa de colisão cruzada Λ , pois possuem menor ordem no parâmetro perturbativo ε . Dados κ e Λ recuperamos os outros parâmetros facilmente com:

$$\eta = \sqrt[3]{\frac{\Lambda^4}{\kappa}}; \quad (3.1.22.b'')$$

$$\xi = \sqrt[3]{\frac{\Lambda^5}{\kappa^2}}. \quad (3.1.22.d'')$$

Utilizando as definições dos parâmetros de colisão e a equação (3.1.14), que fornece os elementos de matriz $\langle u_j | H | u_i \rangle = \int d^3r u_j(\vec{r}) H(\vec{r}, \vec{\nabla}) u_i(\vec{r})$, o Hamiltoniano de muitas partículas pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & E' \sum_i a_i^\dagger a_i + \Omega \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j + \kappa \sum_i a_i^{\dagger 2} a_i^2 + \eta \sum_{i \neq j} a_i^{\dagger 2} a_j^2 \\
& + 2\Lambda \sum_{i \neq j} a_i^{\dagger 2} a_i a_j + 2\eta \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j + 2\Lambda \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j^2 \\
& + \xi \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^{\dagger 2} a_j a_k} + \xi \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k^2} + 4\xi \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_k};
\end{aligned} \tag{3.1.23}$$

onde $\widetilde{\sum_{i,j,k}}$ denota soma sobre $i, j, k = 1, 2, 3$, mas com a restrição que todos os índices assumem valores diferentes em cada termo.

Empregando as relações de comutação bosônicas podemos demonstrar as seguintes identidades úteis na simplificação da expressão (3.1.23):

$$\begin{aligned}
\sum_{i \neq j} a_i^{\dagger 2} a_j^2 + 2 \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j = & - \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j - \sum_i a_i^{\dagger 2} a_j^2 + \left(\sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j \right)^2 + \hat{N}^2 - 3\hat{N} \\
& - 2 \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_k} - \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^{\dagger 2} a_j a_k} - \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k^2};
\end{aligned} \tag{3.1.24}$$

$$\sum_{i \neq j} a_i^{\dagger 2} a_i a_j + \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j^2 = (\hat{N} - 1) \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j - \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_k}.$$

Nestas últimas equações introduzimos o operador do número total de partículas do sistema $\hat{N} = a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + a_3^\dagger a_3$, dado de forma geral em (8.1.32). É fácil verificar que $\hat{H}$ conserva o número total de partículas, o que é expresso pela relação de comutação $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$. Como o número de partículas é conservado pela dinâmica do sistema, temos que o espaço de Hilbert acessível pelo sistema, dado um número inicial N de bósons na armadilha, é equivalente ao auto-espaço de $\hat{N}$ com autovalor N . Desta forma, $\hat{N}$ é um operador constante no espaço acessível ao sistema e podemos simplesmente substituí-lo no Hamiltoniano por seu autovalor N . Termos de $\hat{H}$ dependentes apenas de $\hat{N}$ e de outras constantes podem ser desprezados, pois contribuem apenas com uma fase global na dinâmica do sistema.

Assim, utilizando (3.1.24) e descartando termos constantes obtemos:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & [\Omega + 2\Lambda(N - 1) - \eta] \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j + (\kappa - \eta) \sum_i a_i^{\dagger 2} a_i^2 \\
& + \eta \left(\sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j \right)^2 + (4\xi - 2\eta - 2\Lambda) \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_k} \\
& + (\xi - \eta) \left(\widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^{\dagger 2} a_j a_k} + \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k^2} \right).
\end{aligned} \tag{3.1.25}$$

A primeira somatória ao lado direito de (3.1.25) é a única constituída somente de termos bilineares nos operadores de criação e aniquilação bosônicos, de maneira que cada termo destrói uma partícula em um poço e a recoloca em outro, representando o tunelamento no sistema. Desprezando as taxas

de colisão cruzada, vemos que Ω é o pré-fator deste operador e representa a taxa de tunelamento entre os diferentes sítios do potencial de aprisionamento do condensado, como esperado. No entanto, considerando efeitos de maior ordem em ε , obtemos um novo pré-fator ao operador de tunelamento, que denominamos **taxa de tunelamento efetiva**:

$$\Omega' \equiv \Omega + 2\Lambda(N - 1) - \eta. \quad (3.1.26)$$

Em (3.1.26) vemos a real importância dos parâmetros de colisão cruzada. Segue da comparação entre (3.1.15) e (3.1.22.b')-(3.1.22.c') que a ordem de aproximação em ε é inferior em Ω , de forma que $|\Omega| \gg |\Lambda|$. Contudo, a presença de Λ no tunelamento efetivo tem grande peso devido ao fator $(N - 1)$, pois $N \gg 1$ em um experimento típico com condensados.

A segunda somatória do Hamiltoniano (3.1.25) envolve termos biquadráticos nos operadores bosônicos, mas todos os operadores de um termo pertencem a um mesmo modo, aniquilando duas partículas em um poço e as recriando no mesmo modo local, representando uma autocolisão na porção do condensado presente naquele sítio. A taxa de autocolisão sem os efeitos de sobreposição das funções de onda em diferentes sítios seria κ , mas considerando o parâmetro η , vemos que a taxa de autocolisão efetiva é $\kappa' \equiv \kappa - \eta$. A presença da colisão cruzada em κ' não é significativa, pois de (3.1.22.a') e (3.1.22.b') podemos ver que $|\kappa| \gg |\eta|$.

As três outras somatórias presentes em (3.1.25) também envolvem termos biquadráticos nos operadores $a_i^\dagger$ e a_i , mas desta vez nem todos os operadores de um de seus termos pertencem a um mesmo modo, representando a interação entre duas partículas que, antes ou após a colisão, estão em diferentes poços. Estas três últimas partes do Hamiltoniano têm efeito bem menor que os termos de autocolisão ou tunelamento na dinâmica do sistema, já que seus pré-fatores são apenas os parâmetros de colisão cruzada, estes de grandeza inferior a Ω' e κ .

Por hipótese, consideramos os três poços do potencial $V(\vec{r})$ praticamente independentes, o que é expresso pela condição $\varepsilon \ll 1$. Então, temos que os parâmetros de colisão cruzada são correções de ordem superior a ε na dinâmica do condensado e, portanto, pequenas em relação a Ω e κ , exceto na taxa de tunelamento efetiva, na qual a ordem de grandeza de Λ é compensada por um fator proporcional ao, em geral, elevado número de partículas aprisionadas. Enfim, de forma coerente com as aproximações e hipóteses feitas anteriormente, como por exemplo no cálculo da taxa de tunelamento Ω em termos dos parâmetros do potencial, e também buscando maior simplicidade nos cálculos daqui em diante, vamos desprezar termos de ordem de perturbação superior a $\varepsilon^{\frac{3}{2}}$ no Hamiltoniano (3.1.25). Ou seja, descartamos os parâmetros η e ξ , conservando apenas o efeito substancial da colisão cruzada no tunelamento efetivo.

Então, restando apenas termos até $O(\varepsilon^{\frac{3}{2}})$, reescrevemos o Hamiltoniano do modelo em sua forma final:

$$\hat{H} = \Omega' \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j + \kappa \sum_i a_i^{\dagger 2} a_i^2 - 2\Lambda \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_k}; \quad (3.1.25')$$

onde agora:

$$\Omega' = \Omega + 2\Lambda(N - 1). \quad (3.1.26')$$

Consistentemente com a ordem de aproximação escolhida, mantivemos a terceira somatória em (3.1.25'). Note também que este termo é um remanescente da interação efetiva entre os três poços simultaneamente.

3.2 Interpretação dos Geradores de $SU(3)$

Da mesma maneira que utilizamos os conhecidos operadores de Schwinger para representar em termos de operadores bosônicos os geradores do grupo de Lie $SU(2)$, ou elementos da base da álgebra de Lie $su(2)$, podemos estender este tratamento para um modelo de três modos, representando os oito geradores do grupo $SU(3)$ com os operadores de aniquilação e criação em três modos bosônicos. Reescrevemos então os operadores de (8.1.101) de forma explícita e em notação simplificada:

$$\begin{aligned} Q_1 &\equiv \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2), \quad Q_2 \equiv \frac{1}{3}(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 - 2a_3^\dagger a_3); \\ J_x &\equiv i(a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3), \quad J_y \equiv i(a_1^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_1), \quad J_z \equiv i(a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2); \\ P_1 &\equiv a_1^\dagger a_3 + a_3^\dagger a_1, \quad P_2 \equiv a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2, \quad P_3 \equiv a_3^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_3. \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

Vamos agora encontrar um significado físico para cada um destes operadores dentro do modelo do condensado em poço triplo. A interpretação de Q_1 e Q_2 é bastante simples se recordarmos da expressão (8.1.31), na qual $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$ é o operador do número de bósons no modo i . Então, Q_1 é proporcional à diferença de população entre o poço rotulado com o índice do mínimo $\vec{r}_1$ e o poço de mínimo $\vec{r}_2$. Relacionando este fato à posição escolhida destes mínimos no sistema cartesiano, vemos que Q_1 deve ser proporcional à posição no eixo y do condensado. Semelhantemente, Q_2 é proporcional à diferença entre a população somada em torno dos mínimos $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$ e o dobro da população do poço rotulado pelo mínimo $\vec{r}_3$, comparando o que foi dito com a posição destes mínimos, vemos que Q_2 deve ser semelhante à posição do condensado no eixo x .

Para comprovar nossas suspeitas a respeito dos operadores Q_1 e Q_2 , podemos usar a expressão para operadores de muitas partículas na representação de campo. Utilizando o resultado (8.1.41) para um operador de um corpo na aproximação de três modos, temos para um observável O de uma partícula o seguinte operador de muitas partículas na linguagem da segunda quantização:

$$\hat{O} = \sum_{i,j=1}^3 \langle u_i | O | u_j \rangle a_i^\dagger a_j. \quad (3.2.2)$$

Neste momento, precisamos calcular os elementos de matriz dos operadores de posição de partícula única x e y nos estados localizados $|u_i\rangle$, dados em (3.1.5). Em primeira ordem em ε obtemos:

$$\begin{aligned} \langle u_j | x | u_i \rangle &= x_i \delta_{ij} + \varepsilon \left(\frac{x_i + x_j}{2} \right) (1 - \delta_{ij}); \\ \langle u_j | y | u_i \rangle &= y_i \delta_{ij} + \varepsilon \left(\frac{y_i + y_j}{2} \right) (1 - \delta_{ij}). \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Recordando, x_i e y_i são as coordenadas do mínimo $\vec{r}_i$ do potencial de aprisionamento. Substituindo estas médias em (3.2.2), encontramos os operadores de distribuição de posição do condensado:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= -\frac{3q_0}{2} Q_2 + \varepsilon \frac{q_0}{2} \left[\frac{1}{2}(P_1 + P_3) - P_2 \right]; \\ \hat{y} &= \sqrt{3} q_0 Q_1 + \varepsilon \frac{\sqrt{3} q_0}{4} (P_1 - P_3). \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Como esperado, para ordem zero em ε , os operadores Q_1 e Q_2 são proporcionais à posição do condensado projetada nos eixos y e x , respectivamente. Em ordem de aproximação ε , vemos que a

posição do condensado depende também dos operadores P_i , responsáveis pelo tunelamento do sistema, como vemos comparando a primeira somatória em (3.1.25') e as definições de (3.2.1).

Os operadores J_x , J_y e J_z receberam estes símbolos, sugerindo momento angular, pois geram uma subálgebra de $su(3)$ isomorfa a álgebra $su(2)$; ou seja, satisfazem as relações de comutação:

$$[J_j, J_k] = i\varepsilon_{jkl}J_l; \quad j, k, l = x, y, z. \quad (3.2.5)$$

No entanto, estes operadores não têm a interpretação direta de momento angular do condensado, mas de momento linear. Com o objetivo de encontrar a interpretação dos operadores de muitas partículas J_i , calculamos desta vez os elementos de matriz^{3.3} $\langle u_j | \vec{p} | u_k \rangle = \int d^3r u_j^*(\vec{r})(-i\vec{\nabla})u_k(\vec{r})$, para $\vec{p}$ o operador de momento linear de partícula única. Obtemos até ordem ε de aproximação:

$$\begin{aligned} \langle u_j | p_x | u_k \rangle &= \frac{i\varepsilon}{2d^2}(x_j - x_k); \\ \langle u_j | p_y | u_k \rangle &= \frac{i\varepsilon}{2d^2}(y_j - y_k). \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

Os elementos de matriz acima são de ordem ε , pois dependem fundamentalmente da sobreposição entre funções de onda em diferentes sítios. Utilizando novamente (3.2.2), podemos encontrar os operadores de momento linear do condensado:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= \frac{\sqrt{3}q_0}{2d^2}\varepsilon \left(\frac{\sqrt{3}}{2}J_x - \frac{\sqrt{3}}{2}J_y \right); \\ \hat{p}_y &= \frac{\sqrt{3}q_0}{2d^2}\varepsilon \left(\frac{1}{2}J_x + \frac{1}{2}J_y - J_z \right). \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

Analisando cuidadosamente as equações (3.2.7), podemos interpretar os J_i como operadores proporcionais à magnitude de um vetor de momento linear de tunelamento ligando dois mínimos do potencial e temos que a soma das projeções destes vetores em cada um dos eixos x e y é, por sua vez, proporcional a $\hat{p}_x$ e $\hat{p}_y$. Logo, J_z representa o momento linear das partículas que tunelam do poço de mínimo $\vec{r}_1$ ao de mínimo $\vec{r}_2$, J_x é proporcional ao momento linear de bósons que vão de $\vec{r}_2$ a $\vec{r}_3$ e J_y está relacionado ao momento linear de partículas tunelando de $\vec{r}_3$ a $\vec{r}_1$. O esquema de vetores de momento linear entre os mínimos é dado na figura 3.2.1.

Persistindo na interpretação vetorial da figura 3.2.1, podemos inferir uma rotação do condensado em torno da origem imposta pelos vetores de momento linear entre as diferentes porções do condensado. Então, para confirmar nossas expectativas, calculamos os elementos de matriz nos estados localizados da projeção no eixo z do momento angular de uma partícula:

$$\begin{aligned} \langle u_j | L_z | u_i \rangle &= \int d^3r u_j^*(\vec{r})(-i) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) u_i(\vec{r}) \\ &= \frac{i\varepsilon}{2d^2}(x_i y_j - x_j y_i). \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

Com estes elementos de matriz podemos calcular o operador que fornece a distribuição do momento angular do condensado:

$$\hat{L}_z = \frac{\varepsilon}{d^2} \left(\frac{q_0}{2} \right) \left(\frac{\sqrt{3}q_0}{2} \right) (J_x + J_y + J_z) \equiv \varepsilon \frac{\sqrt{3}q_0^2}{4d^2} J_S. \quad (3.2.9)$$

^{3.3}Lembrando que escolhemos o sistema de unidades tal que $\hbar = 1$.

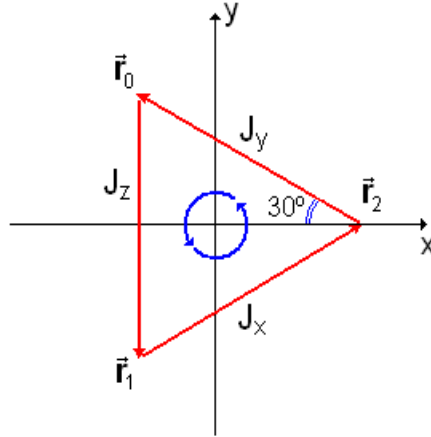


Figura 3.2.1: Interpretação vetorial dos operadores de momento linear J_x , J_y e J_z para bósons do condensado que tunelam entre dois poços. As somas das projeções destes vetores nos eixos cartesianos são proporcionais às componentes cartesianas do momento linear do condensado. Já a soma destes três operadores é proporcional ao momento angular do condensado na direção z , representando a dinâmica de rotação do sistema.

Então, a soma dos três operadores de momento linear J_i , definida como J_S , é proporcional ao momento angular do condensado em torno do eixo z . Este resultado poderia ser obtido ingenuamente usando a interpretação dos operadores J_i como a magnitude de vetores de momento linear de partículas tunelando entre dois poços a uma distância de $\frac{q_0}{2}$ da origem, tal que $L_z = (\vec{r} \times \vec{p})_z$.

Resta apenas a interpretação dos operadores P_i . Podemos ver facilmente que a soma destes operadores é idêntica ao operador de tunelamento em (3.1.25').

$$\sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_j = P_1 + P_2 + P_3 \equiv P_S. \quad (3.2.10)$$

Esta parte do Hamiltoniano proveio diretamente do termo de energia de partícula única em (3.1.21), logo podemos esperar que P_S represente de alguma forma a distribuição das partículas nos níveis de energia do Hamiltoniano de partícula única de (3.1.17). Podemos demonstrar esta inferência lembrando do resultado (8.1.102), segundo o qual podemos escrever os operadores de (3.2.1) da seguinte forma:

$$A_i = \vec{a}^\dagger \gamma^1(A_i) \vec{a}; \quad (8.1.102')$$

onde $\gamma^1(A_i)$ é a representação padrão de um elemento da base da álgebra $su(3)$ ^{3.4} e $\vec{a}$ é o vetor cujas componentes são os operadores de aniquilação nos três modos bosônicos:

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}. \quad (8.1.99')$$

Como vimos, sob certas exigências, tanto os auto-estados de mais baixa energia de partícula única $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$ e $|e_3\rangle$ quanto os estados localizados $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ e $|u_3\rangle$ geram o mesmo subespaço de interesse do espaço de Hilbert. Portanto, é possível uma transformação de base do tipo:

^{3.4}Neste caso, uma matriz 3×3 de traço nulo e Hermitiana.

$$|u_i\rangle = \sum_{j=1}^3 \langle e_j | u_i \rangle |e_j\rangle, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.2.11)$$

Definimos agora um novo trio de operadores de criação bosônicos $b_j^\dagger$, $j = 1, 2, 3$, construídos de maneira que $b_j^\dagger$ cria uma partícula no auto-estado de energia $|e_j\rangle$. Então, de (8.1.35), temos a identidade:

$$a_i^\dagger = \sum_{j=1}^3 b_j^\dagger \langle e_j | u_i \rangle \equiv \sum_{j=1}^3 b_j^\dagger U_{ji}^\dagger. \quad (3.2.12)$$

A equação acima nos permite escrever os operadores de criação de estados localizados em termos dos operadores de criação de auto-estados de energia de partícula única, se conhecemos a matriz unitária de transformação de base $U_{ij} = \langle u_i | e_j \rangle$.

De forma análoga a (8.1.36), é fácil mostrar que se um conjunto de operadores de criação e aniquilação satisfaz as relações de comutação bosônicas, então o outro satisfaz equações idênticas:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \sum_{k,l} U_{ik} U_{lj}^\dagger [b_k, b_l^\dagger] \\ &= \sum_k U_{ik} U_{kj}^\dagger = \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

Transformando a equação (8.1.102') segundo a regra (3.2.12), obtemos:

$$\begin{aligned} A_i &= \vec{a}^\dagger \gamma^1(A_i) \vec{a} \\ &= \vec{b}^\dagger U^\dagger \gamma^1(A_i) U \vec{b} \\ &\equiv \vec{b}^\dagger \gamma_e^1(A_i) \vec{b}, \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

onde definimos $\gamma_e^1(A_i)$ como a representação padrão da álgebra $su(3)$ na base de auto-estados de energia, obtida da representação em estados localizados por:

$$\gamma_e^1(A) = U^\dagger \gamma^1(A) U. \quad (3.2.15)$$

Com as equações (3.1.17) e (8.1.85) podemos facilmente encontrar a matriz de transformação U e a representação $\gamma^1(P_1 + P_2 + P_3)$, respectivamente:

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \gamma^1(P_1 + P_2 + P_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2.16)$$

Realizando a transformação (3.2.15), obtemos:

$$P_S = \vec{b}^\dagger \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \vec{b} = 2b_3^\dagger b_3 - b_2^\dagger b_2 - b_1^\dagger b_1. \quad (3.2.17)$$

Vemos que $P_S = P_1 + P_2 + P_3$ é o operador que fornece o balanço de população entre o estado de energia $E' + 2\Omega$ e os dois estados degenerados de energia $E' - \Omega$. É fácil ver que somando este operador

a $\hat{N}$, que descartamos em (3.1.23), obtemos justamente a expressão que esperaríamos para o operador de energia total do sistema, desconsiderando a interação entre as partículas:

$$E' \hat{N} + \Omega(P_1 + P_2 + P_3) = (E' + 2\Omega)b_3^\dagger b_3 + (E' - \Omega)(b_2^\dagger b_2 + b_1^\dagger b_1). \quad (3.2.18)$$

Usamos na última equação que o operador $\hat{N} = \vec{a}^\dagger \cdot \vec{a} = \vec{b}^\dagger \cdot \vec{b}$ tem sua forma invariante sob mudança de representação.

Conhecidas as interpretações dos operadores geradores de $SU(3)$, é conveniente para futuras aplicações reescrever (3.1.25') em termos destes operadores. Para este fim, usamos as seguintes identidades, que podem ser facilmente demonstradas utilizando as relações de comutação bosônicas e (3.2.1):

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 a_i^{\dagger 2} a_i^2 &= \frac{1}{2}(4Q_1^2 + 3Q_2^2) + \hat{N} \left(\frac{\hat{N}}{3} - 1 \right); \\ \widetilde{\sum_{i,j,k} a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_k} &= \hat{n}_1 P_3 + \hat{n}_2 P_1 + \hat{n}_3 P_2 \\ &= Q_1(P_3 - P_1) + \frac{Q_2}{2}(P_1 + P_3 - 2P_2) + \frac{\hat{N}}{3}(P_1 + P_2 + P_3). \end{aligned} \quad (3.2.19)$$

Finalmente, o Hamiltoniano (3.1.25') escrito em termos lineares e quadráticos nos geradores de $SU(3)$, de acordo com (3.2.10) e (3.2.19), torna-se:

$$\hat{H} = \left(\Omega' - 2\Lambda \frac{N}{3} \right) (P_1 + P_2 + P_3) + \frac{\kappa}{2}(4Q_1^2 + 3Q_2^2) + \Lambda [2Q_1(P_1 - P_3) + Q_2(2P_2 - P_1 - P_3)]. \quad (3.2.20)$$

Na equação acima novamente descartamos os termos constantes dependentes apenas de parâmetros e do operador $\hat{N}$. No primeiro termo à direita, não acrescentamos o pré-fator $-\frac{2\Lambda N}{3}$ à taxa de tunelamento efetiva, pois geralmente é mais fácil tratar este termo juntamente com o último, dependente apenas do parâmetro Λ .

Este capítulo é inteiramente dedicado ao estudo dos estados coerentes generalizados e sua aplicação ao modelo de três modos locais. Aqui justificamos uma possível solução à questão aberta na seção 2.2, onde não determinamos uma parametrização adequada à utilização do PVDT.

Discutimos na seção 4.1 a generalização do conceito de estado coerente [ZFG90, Per86], resultando finalmente em uma expressão para os estados coerentes das representações totalmente simétricas de $SU(3)$ [Dao04, MS00, RSV89]. Então, na seção 4.2 obtemos algumas identidades úteis no tratamento dos estados coerentes de $SU(3)$, preparando sua aplicação ao modelo de três modos.

O método **análogo clássico**, que consiste na aproximação semiclássica obtida do PVDT utilizando parametrização dada pelos estados coerentes, é examinado na seção 4.3. Resumimos esta análise nos seguintes tópicos:

- O análogo clássico é exato para Hamiltonianos lineares nos geradores do grupo dinâmico do sistema. Para exemplificar este fato, resolvemos analiticamente o modelo de três modos na ausência de colisões bosônicas.
- O formalismo de integrais de caminho fornece naturalmente as equações de movimento referentes ao análogo clássico na aproximação de fase estacionária. Embora estas duas aproximações produzam resultados distintos, podemos afirmar que há consistência entre o método análogo clássico e as demais abordagens semiclássicas.
- No limite macroscópico $N \rightarrow \infty$, o análogo clássico fornece os resultados clássicos exatos [Yaf82].
- A pureza generalizada associada à álgebra $su(3)$ é uma medida quantitativa da validade da aproximação análoga clássica na dinâmica do modelo do condensado em poço triplo.

Portanto, fazemos uma profunda discussão das ferramentas utilizadas nos próximos capítulos, conhecendo suas vantagens e propondo quantificações de suas desvantagens.

4.1 Estado Coerente para $SU(3)$

Precisamos generalizar o conceito de estados coerentes para as representações simétricas de $SU(3)$ e, de maneira mais geral, para as representações de um grupo G qualquer. Para este fim, recorreremos às

definições equivalente dos estados coerentes do campo ou do oscilador harmônico, devidas a Glauber [Gla63], no intuito de encontrar a definição que generaliza o conceito de estado coerente.

As três definições equivalentes do estado coerente do campo $|\alpha\rangle$ são:

1. Auto-estados do operador de aniquilação a em um dado modo do campo:

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (4.1.1)$$

Para um grupo arbitrário G , esta definição **não** pode ser generalizada, pois geralmente não podemos construir a partir dela estados coerentes para espaços de Hilbert finitos [ZFG90]. Mais adiante veremos que a aplicação de um operador de aniquilação a um estado coerente em espaço finito, de maneira geral, não é um estado coerente pertencente ao mesmo espaço.

Se tentarmos generalizar o conceito de operador de “abaixamento”, para então generalizar (4.1.1), também chegamos a uma indefinição. Em muitos casos, da álgebra $\mathfrak{L}_G$ de G podemos definir vários operadores de “abaixamento” não equivalentes e que não comutam entre si, tornando impossível encontrar auto-estados simultâneos de todos eles.

2. Estados que saturam a incerteza de Heisenberg:

$$(\Delta X)^2(\Delta P)^2 = \left| \frac{1}{2} \langle \alpha | [X, P] | \alpha \rangle \right|^2 = \frac{1}{4}; \quad (4.1.2)$$

onde usamos $\hbar = 1$ e definimos as coordenadas canônicas a partir dos operadores de aniquilação a e criação $a^\dagger$ em um dado modo do campo, por $X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$ e $P = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$. Lembramos também que $(\Delta A)^2 = \langle \alpha | A^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | A | \alpha \rangle^2$.

Primeiramente, devemos ressaltar que apesar dos estados coerentes do campo resultarem de (4.1.2), eles não são os únicos estados definidos desta forma. Como exemplo temos os estados comprimidos do campo, que também saturam a incerteza. Portanto, a saturação da incerteza é uma condição necessária, mas não é suficiente para a definição dos estados coerentes, mesmo no caso simples do oscilador harmônico.

A generalização desta definição, que somente é possível para alguns grupos de transformações, gera os chamados estados inteligentes. Estes não são muito úteis em situações físicas, principalmente porque **não** conservam as condições análogas a (4.1.2) sob evolução temporal. Logo, estados inteligentes geralmente não continuam tão inteligentes com o tempo.

3. Estados obtidos por um deslocamento imposto pelo grupo dinâmico do sistema^{4.1} no estado de vácuo:

$$|\alpha\rangle \equiv e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} |0\rangle. \quad (4.1.3)$$

Esta definição não encontra restrições para um grupo arbitrário G , pois sempre podemos aplicar uma transformação do grupo em um estado de um espaço que carrega uma de suas representações. Portanto, a definição (4.1.3) sugere uma boa generalização do conceito de estado coerente.

^{4.1}O grupo dinâmico de um modo do campo é conhecido como grupo de Weyl-Heisenberg, cuja álgebra é gerada por $\{1, a^\dagger a, a^\dagger, a\}$.

Devemos enfatizar que as três definições dos estados coerentes do campo produzem resultados distintos quando aplicadas a outros sistemas e, de forma generalizada, apenas a última não prescinde de propriedades úteis e significado físico.

Da terceira definição de $|\alpha\rangle$, vemos que precisamos de três ingredientes fundamentais para a construção de um estado coerente generalizado:

1. Grupo de transformações G , geralmente escolhido como o grupo dinâmico do sistema, que por sua vez é uma família de operadores de evolução unitária do problema físico em questão^{4.2}. O grupo G é associado, pelo mapa exponencial, à álgebra de Lie $\mathfrak{L}_G$, que para o caso do grupo dinâmico gera uma família de Hamiltonianos do sistema.
2. Espaço de Hilbert $\mathbb{V}$ que carrega uma representação de G . Neste trabalho escolhemos $\mathbb{V}$ de forma que uma representação irredutível de G age sobre ele.
3. Estado de referência $|\Phi_0\rangle \in \mathbb{V}$. Em princípio, o estado de referência é arbitrário dentro do espaço de Hilbert, mas uma escolha adequada pode trazer várias propriedades físicas interessantes. O caso mais útil, como explicado em outras seções, é quando $|\Phi_0\rangle$ é o estado de máximo peso da representação irredutível em $\mathbb{V}$, definido como:

$$\begin{cases} E_\beta |\Phi_0\rangle = 0, \text{ onde } E_\beta \text{ são os operadores de levantamento associados a } \mathfrak{L}_G; \\ H_\gamma |\Phi_0\rangle = h_\gamma |\Phi_0\rangle, \text{ onde } H_\gamma \text{ são geradores da maior subálgebra comutativa de } \mathfrak{L}_G. \end{cases} \quad (4.1.4)$$

O estado coerente produzido por um estado de referência de máximo peso é chamado de **estado coerente mais próximo ao clássico**.

Dos três ingredientes iniciais fazemos as três definições fundamentais na teoria de estados coerentes generalizados:

1. O **subgrupo de estabilidade** S , constituído do conjunto de elementos s de G tais que:

$$s|\Phi_0\rangle = e^{i\phi(s)}|\Phi_0\rangle, \quad \phi(s) \in \mathbb{R}. \quad (4.1.5)$$

Portanto, o grupo de estabilidade é fundamentalmente dependente da escolha do estado de referência. A definição do grupo de estabilidade nos permite excluir as transformações de G que não alteram o conteúdo físico de $|\Phi_0\rangle$, multiplicando-o apenas por uma fase global dependente do elemento s .

2. Para todo elemento g de G há uma decomposição única em um elemento de S e outro no chamado **espaço quociente** G/S [Gil74]:

$$g = \Theta s, \text{ onde } \Theta \in G/S \subset G \text{ e } s \in S. \quad (4.1.6)$$

^{4.2}O conceito de grupo dinâmico é explorado na seção 8.3.

3. Finalmente definimos **estado coerente generalizado** como o deslocamento produzido em $|\Phi_0\rangle$ por G/S :

$$|\mathbb{V}; \Theta\rangle \equiv \Theta|\Phi_0\rangle. \quad (4.1.7)$$

Os estados coerentes são indexados pelo seu elemento de G/S gerador e o espaço de Hilbert $\mathbb{V}$. Estados gerados por elementos Θ em espaços $\mathbb{V}$ distintos são geralmente diferentes. Devido à definição de S , temos uma relação de um para um entre os estados coerentes não equivalentes e os elementos do espaço quociente.

Muitas vezes em sistema de muitos bósons [NO98, FW71] podemos descrever o Hamiltoniano do sistema, considerando até termos de interação aos pares entre as partículas, como:

$$H = \sum_{i,j} h_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k; \quad (4.1.8)$$

onde $a_i^\dagger$ (a_i) são os operadores de criação (aniquilação) bosônicos no i -ésimo estado de uma base escolhida do espaço de Hilbert de partícula única $\mathbb{H}$.

Uma família de Hamiltonianos como (4.1.8) define o grupo dinâmico G do sistema se pudermos reescrever H em termos dos operadores geradores deste grupo, utilizando uma generalização do formalismo de pseudo-spins de Schwinger para G . Um exemplo de generalização dos operadores de Schwinger é encontrado na seção 8.1.4.

Por definição, a álgebra de Lie $\mathfrak{L}_G$ do grupo de Lie G é o conjunto de todos os elementos A tais que:

$$g = \exp(itA) \in G, \text{ para todo } t \in \mathbb{R}. \quad (4.1.9)$$

Os geradores $\{A_i\}$ ($i = 1, \dots, r$) de G formam uma base de sua álgebra real r -dimensional, $\mathfrak{L}_G = \left\{ A, \text{ tal que } A = \sum_{i=1}^r \alpha^i A_i, \alpha^i \in \mathbb{R} \right\}$ e seguem as seguintes relações de comutação:

$$[A_j, A_k] = i \sum_{l=1}^r c_{jk}^l A_l. \quad (4.1.10)$$

Com os operadores de Schwinger podemos reescrever os termos bilineares nos operadores bosônicos de (4.1.8) como termos lineares nos A_i , enquanto os termos biquadráticos são reformulados como termos quadráticos nos geradores de G :

$$H = \sum_i h'_i A_i + \sum_{i,j} V'_{ij} A_i A_j. \quad (4.1.8')$$

Como vimos anteriormente, podemos escrever a família de Hamiltonianos do modelo de poço triplo, levando em conta a variação dos parâmetros do potencial de aprisionamento, em termos dos geradores de $SU(3)$. Portanto, este é o grupo dinâmico interessante para o nosso sistema, responsável por sua evolução unitária no caso de Hamiltonianos lineares nos A_i . Então, vamos escrever os três ingredientes para a construção dos estados coerentes úteis no tratamento do nosso modelo:

1. Grupo de Lie dinâmico $SU(3)$ dotado da álgebra de Lie $\mathfrak{su}(3)$.

2. O espaço de Hilbert é $\mathbb{B}_N$, o espaço de Fock de N bósons, que em nosso caso tem apenas três modos e uma base adequada é dada por $\{n_1, n_2, n_3\}$, com $n_1 + n_2 + n_3 = N$. Neste espaço age a representação irredutível completamente simétrica de $SU(3)$ que denotamos por Γ^N .
3. Escolhemos o estado de referência $|\Phi_0\rangle$ como o estado de máximo peso da representação Γ^N .

Para encontrarmos o estado de máximo peso de Γ^N , primeiramente devemos escrever os operadores de Schwinger para os elementos da base da álgebra $sl(3)$, a complexificação de $su(3)$, que fornece a base canônica de Cartan que age sobre $\mathbb{B}_N$ [LF88, Hal03]. Então, utilizando as representações de (8.1.72) e a fórmula (8.1.102), obtemos:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2); \\ Q_2 &= \frac{1}{3}(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 - 2a_3^\dagger a_3); \\ E_{ij} &= a_i^\dagger a_j, \text{ com } i, j = 1, 2, 3 \text{ e } i \neq j. \end{aligned} \tag{4.1.11}$$

As relações de comutação destes operadores são facilmente verificadas como sendo do tipo:

$$\begin{aligned} [Q_1, Q_2] &= 0; \\ [Q_i, E_{jk}] &= \alpha_{ijk} E_{jk}. \end{aligned} \tag{4.1.12}$$

Os operadores Q_i constituem a subálgebra comutativa máxima de Cartan e são diagonalizados simultaneamente na base conveniente constituída dos elementos $|n_1, n_2, n_3\rangle$. Denominemos os autovalores de Q_i nesta base por v_i , então a quantidade $\vec{v} = (v_1, v_2)$ é chamada de peso da representação γ^N de $su(3)$ e seu autovetor correspondente $|n_1, n_2, n_3\rangle \equiv |v_1, v_2\rangle$ é seu vetor peso associado. Excepcionalmente no caso das representações completamente simétricas de $SU(n)$, apenas os autovalores dos operadores da subálgebra comutativa máxima são suficientes para especificar unicamente um vetor peso. No caso geral, haveria degenerescência e precisaríamos de mais números quânticos para especificar um estado da base do espaço de Hilbert em questão.

Das relações de comutação (4.1.12), temos:

$$\begin{aligned} Q_i E_{jk} |v_1, v_2\rangle &= \alpha_{ijk} E_{jk} |v_1, v_2\rangle + v_i E_{jk} |v_1, v_2\rangle \\ &= (v_i + \alpha_{ijk}) E_{jk} |v_1, v_2\rangle. \end{aligned} \tag{4.1.13}$$

Ou seja, $E_{jk} |v_1, v_2\rangle$ é zero ou é um novo autovetor de Q_i com autovalor $(v_i + \alpha_{ijk})$. A quantidade $\vec{\alpha}_{jk} = (\alpha_{1jk}, \alpha_{2jk})$ é conhecida como raiz e o operador E_{jk} é seu vetor raiz associado. Por gerar novos vetores da base da representação, com novos autovalores, os E_{jk} são chamados de operadores “escada” e podem ser classificados como operadores de “levantamento” e “abaixamento”. As raízes para cada vetor associado são encontradas calculando as relações de comutação (4.1.12), utilizando (4.1.11), e são dadas na tabela 4.1.1.

Vemos também na tabela 4.1.1 que todas as raízes podem ser escritas como uma combinação linear de apenas duas escolhidas entre elas, denominadas raízes simples positivas $\vec{\alpha}_1$ e $\vec{\alpha}_2$. Note que ambos os coeficientes da combinação linear de $\vec{\alpha}_{jk}$ em termos de $\vec{\alpha}_1$ e $\vec{\alpha}_2$ têm o mesmo sinal ou um deles é nulo. Denominamos também os operadores E_{ij} com apenas coeficientes não nulos positivos (negativos) de operadores de “levantamento” (“abaixamento”), como mostrado na tabela 4.1.2.

Tabela 4.1.1: Raízes para a álgebra gerada por (4.1.11), juntamente com seus respectivos vetores e sua combinação linear em raízes simples positivas.

$\vec{\alpha}_{jk}$	Vetor E_{jk}	Combinação linear em raízes simples positivas
$(1, 0)$	E_{12}	$-\vec{\alpha}_2$
$(-1, 0)$	E_{21}	$\vec{\alpha}_2$
$(-\frac{1}{2}, 1)$	E_{23}	$-\vec{\alpha}_1$
$(\frac{1}{2}, -1)$	E_{32}	$\vec{\alpha}_1$
$(\frac{1}{2}, 1)$	E_{13}	$-\vec{\alpha}_1 - \vec{\alpha}_2$
$(-\frac{1}{2}, -1)$	E_{31}	$\vec{\alpha}_1 + \vec{\alpha}_2$

Tabela 4.1.2: Operadores de levantamento e abaixamento dos estado em $\mathbb{B}_N$.

Levantamento	E_{32}	E_{31}	E_{21}
Abaixamento	E_{23}	E_{13}	E_{12}

Como vemos na tabela 4.1.2, os operadores E_{ij} de levantamento (abaixamento) foram escolhidos justamente de forma que $i > j$ ($i < j$). Também é claro que os operadores de levantamento são os Hermitianos conjugados dos operadores de abaixamento.

Então, de (4.1.4), temos que o estado de máximo peso $|\vec{v}_M\rangle$ em $\mathbb{B}_N$ é dado por:

$$\begin{cases} E_{ij}|\vec{v}_M\rangle = 0, \text{ se } i > j; \\ Q_i|\vec{v}_M\rangle = v_i^M|\vec{v}_M\rangle, \text{ } i = 1, 2; \\ E_{ij}|\vec{v}_M\rangle = 0 \text{ ou } E_{ij}|\vec{v}_M\rangle \propto |\vec{v}_M + \vec{\alpha}_{ij}\rangle, \text{ se } i < j. \end{cases} \quad (4.1.14)$$

Como mostramos na seção 8.1.1, uma base adequada para $\mathbb{B}_N$ pode ser dada pelos estados de população bem definida nos três modos locais do condensado $|n_1, n_2, n_3\rangle$. Segundo (8.1.17) e (8.1.27), os operadores de aniquilação e destruição agem nestes estados da seguinte maneira:

$$\begin{cases} a_1^\dagger |n_1, n_2, n_3\rangle = \sqrt{n_1 + 1} |n_1 + 1, n_2, n_3\rangle; \\ a_2^\dagger |n_1, n_2, n_3\rangle = \sqrt{n_2 + 1} |n_1, n_2 + 1, n_3\rangle; \\ a_3^\dagger |n_1, n_2, n_3\rangle = \sqrt{n_3 + 1} |n_1, n_2, n_3 + 1\rangle; \end{cases} \quad (4.1.15.a)$$

$$\begin{cases} a_1 |n_1, n_2, n_3\rangle = \sqrt{n_1} |n_1 - 1, n_2, n_3\rangle; \\ a_2 |n_1, n_2, n_3\rangle = \sqrt{n_2} |n_1, n_2 - 1, n_3\rangle; \\ a_3 |n_1, n_2, n_3\rangle = \sqrt{n_3} |n_1, n_2, n_3 - 1\rangle. \end{cases} \quad (4.1.15.b)$$

Os estados $|n_1, n_2, n_3\rangle$ também são construídos ortonormais:

$$\langle n'_1, n'_2, n'_3 | n_1, n_2, n_3 \rangle = \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \delta_{n'_3, n_3}. \quad (4.1.16)$$

Como já observado em outras seções do trabalho, diretamente das equações (4.1.15.a) e (4.1.15.b), vemos que as combinações bilineares do tipo $a_i^\dagger a_j$ conservam o número de partículas no sistema, pois comutam com o operador de número total de partículas $\hat{N}$. Também é um resultado mostrado na seção 8.1.3 que o espaço $\mathbb{B}_N$, invariante sob a aplicação de operadores de $sl(3)$, tem dimensão:

$$\dim \mathbb{B}_N = \frac{(N+2)(N+1)}{2}. \quad (8.1.83)$$

Desta forma, utilizando a aplicação dos operadores de Schwinger (4.1.11) sobre a base $\{|n_1, n_2, n_3\rangle\}$, dada pelas equações (4.1.15.a) e (4.1.15.b), concluimos, em comparação com (4.1.14), que o estado de máximo peso associado a representação totalmente simétrica Γ^N de $SU(3)$ é $|0, 0, N\rangle$.

$$|\vec{v}_M\rangle \equiv |0, 0, N\rangle. \quad (4.1.17)$$

Poderíamos obter outros estados de máximo peso equivalentes se tivéssemos escolhido outro par de raízes simples positivas (assim teríamos $|N, 0, 0\rangle$ ou $|0, N, 0\rangle$) ou fazendo uma transformação unitária (mudança de base) das representações padrões (8.1.72). Como as transformações unitárias nas matrizes da representação padrão são dadas justamente pelos elementos de $SU(3)$, que agem sobre espaços tridimensionais, temos que todos estados de máximo peso equivalentes estão ligados por uma transformação do grupo. Então, comparando com (4.1.7), vemos que todos os estados coerentes mais próximos aos clássicos são estados de máximo peso em alguma base unitariamente equivalente de $\mathbb{B}_N$. Ou seja, utilizando a decomposição (4.1.6), temos para $|\Phi_0\rangle = |0, 0, N\rangle$:

$$g|0, 0, N\rangle = \Theta s|0, 0, N\rangle = e^{i\phi(s)}|N; \Theta\rangle = |\vec{v}'_M\rangle, \quad (4.1.18)$$

onde $|\vec{v}'_M\rangle$ é o estado de máximo peso para outra escolha da base do espaço de Hilbert de partícula única $\mathbb{H}$ ou, em outras palavras, outra escolha de três modos bosônicos para modelo. Note também que, para o estado coerente de $SU(3)$ associado a Γ^N , utilizamos o número total de partículas como índice indicativo do espaço de Hilbert $\mathbb{B}_N$.

Escolhido o estado de referência como estado de máximo peso, vamos determinar o grupo de estabilidade S . Utilizando a definição de álgebra de Lie, juntamente com (8.1.76), podemos escrever um elemento de $SU(3)$ como a exponencial de um operador anti-Hermitiano:

$$\begin{aligned} g &= \exp \left(i \sum_{j=1}^3 \alpha_j P_j + i \sum_{k=1}^3 \beta_k J_k + i \sum_{l=1}^2 \gamma_l Q_l \right); \alpha_j, \beta_k, \gamma_l \in \mathbb{R}; \\ &= \exp \left[\sum_{j < k} \left(\theta_{jk} E_{jk} - \theta_{jk}^* E_{kj} \right) + i \sum_{l=1}^2 \gamma_l Q_l \right]; \theta_{jk} \in \mathbb{C}; \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

onde P_j , J_k e Q_l são os geradores de $su(3)$ definidos em (3.2.1). Fazendo $\alpha_1 = \alpha_3 = \beta_1 = \beta_2 = 0$ em (4.1.19), ou analogamente $\theta_{13} = \theta_{23} = 0$, vemos que:

$$\begin{aligned}
s|0,0,N\rangle &= \exp\left(i\alpha_2 P_2 + i\beta_z J_z + i\sum_{l=1}^2 \gamma_l Q_l\right)|0,0,N\rangle \\
&= \exp\left(\theta_{12}a_1^\dagger a_2 - \theta_{12}^* a_2^\dagger a_1 + i\sum_{l=1}^2 \gamma_l Q_l\right)|0,0,N\rangle \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\theta_{12}a_1^\dagger a_2 - \theta_{12}^* a_2^\dagger a_1 + i\sum_{l=1}^2 \gamma_l Q_l\right)^m |0,0,N\rangle \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(-i\gamma_2 \frac{2}{3}N\right)^m |0,0,N\rangle \\
&= e^{-\frac{i2\gamma_2 N}{3}} |0,0,N\rangle;
\end{aligned} \tag{4.1.20}$$

aqui usamos que:

$$E_{12}|0,0,N\rangle = E_{21}|0,0,N\rangle = Q_1|0,0,N\rangle = 0 \quad \text{e} \quad Q_2|0,0,N\rangle = -\frac{2N}{3}|0,0,N\rangle. \tag{4.1.21}$$

É fácil ver que nenhum outro elemento de $SU(3)$, construído de (4.1.19), mantém o estado $|0,0,N\rangle$ invariante a menos de uma fase global. Portanto, S é o subgrupo de $SU(3)$ gerado por $\{Q_2, Q_1, P_2, J_z\}$, cujas relações de comutação são dadas por:

$$\begin{aligned}
[Q_1, Q_2] &= 0, \quad [Q_1, P_2] = iJ_z, \quad [Q_1, J_z] = -iP_2; \\
[Q_2, P_2] &= 0, \quad [Q_2, J_z] = 0, \quad [P_2, J_z] = 4iQ_1.
\end{aligned} \tag{4.1.22}$$

Ou seja, as mesmas relações de comutação entre os elementos de $\{\mathbb{1}/3, J'_z, 2J'_x, 2J'_y\}$, mas aqui J'_x , J'_y e J'_z são os conhecidos operadores de momento angular, geradores de $SU(2)$ e base da álgebra $su(2)$. Mas, estes operadores juntamente com a identidade, cujo traço não é nulo e portanto gera elementos não unimodulares ($\det g \neq 1$) por exponenciação, formam uma base para $u(2)$. Desta forma, vemos que o grupo de estabilidade S associado a $|0,0,N\rangle$ é isomorfo ao grupo $U(2)$. A partir de agora denominamos neste trabalho S por $U(2)$ e a álgebra gerada de $\{Q_2, Q_1, P_2, J_z\}$ por $u(2)$.

Então, todo elemento de $SU(3)$ pode ser decomposto unicamente em um produto de um elemento de $U(2)$ e outro do espaço quociente $SU(3)/U(2)$. Os elementos Θ de $SU(3)/U(2)$ são gerados por exponenciação de combinações lineares anti-Hermitianas dos elementos restantes da base de $su(3)$, excluindo a base de $u(2)$:

$$\begin{aligned}
\Theta &= \exp[i(\alpha_1 P_1 + \alpha_3 P_3 + \beta_x J_x + \beta_y J_y)] \\
&\equiv \exp(\theta_1 E_{13} - \theta_1^* E_{31} + \theta_2 E_{23} - \theta_2^* E_{32}).
\end{aligned} \tag{4.1.23}$$

Da definição de estado coerente generalizado (4.1.7), temos o estado coerente mais próximo ao clássico de representações totalmente simétricas de $SU(3)$:

$$|N; \Theta\rangle \equiv \exp\left(\theta_1 a_1^\dagger a_3 - \theta_1^* a_3^\dagger a_1 + \theta_2 a_2^\dagger a_3 - \theta_2^* a_3^\dagger a_2\right)|0,0,N\rangle. \tag{4.1.24}$$

Esta definição de estado coerente é, como previsto, amplamente dependente da escolha do estado de referência, que determina o espaço quociente e assim a forma dos elementos Θ .

Os estados (4.1.24) estão em correspondência um para um com os elementos de $SU(3)/U(2)$. Portanto, os estados coerentes são topologicamente equivalentes a $SU(3)/U(2)$; ou seja, possuem as mesmas propriedades geométricas deste espaço.

Em (4.1.19) vemos que os elementos de $SU(3)$ são determinados por oito parâmetros reais. Já em (4.1.20), temos que $U(2)$ é parametrizado por quatro variáveis reais. Logo, restam quatro parâmetros reais para o espaço quociente, ou dois complexos como em (4.1.23), que conseqüentemente parametrizam os estados coerentes, tornando-os funções sobre um domínio M quadridimensional, que representa o nosso espaço de fase generalizado na possível aplicação do princípio variacional dependente do tempo (PVDT).

Agora vamos calcular a expansão dos estados coerentes (4.1.24) nos estados de população bem definida $|n_1, n_2, n_3\rangle$, que formam uma base de $\mathbb{B}_N$. Como os elementos de $SU(3)/U(2)$ são também elementos de $SU(3)$, podemos fazer uma decomposição de Gauss [SK81, ZFG90]:

$$e^{\theta_1 E_{13} - \theta_1^* E_{31} + \theta_2 E_{23} - \theta_2^* E_{32}} = e^{\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23} + \tau_3 E_{12}} e^{2\sigma_1 Q_1 + 3\sigma_2 Q_2} e^{-\tau_1^* E_{31} - \tau_2^* E_{32} - \tau_3^* E_{21}}. \quad (4.1.25)$$

Na primeira exponencial do lado direito temos apenas os operadores de abaixamento, na segunda os operadores da subálgebra comutativa que são diagonalizados pelos estados $|n_1, n_2, n_3\rangle$ e na terceira exponencial somente os operadores de levantamento, que produzem zero quando aplicados em $|0, 0, N\rangle$. Aplicando a decomposição de Gauss (4.1.25) no estado de referência, temos:

$$\begin{aligned} |N; \Theta\rangle &= e^{\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23} + \tau_3 E_{12}} e^{2\sigma_1 Q_1 + 3\sigma_2 Q_2} e^{-\tau_1^* E_{31} - \tau_2^* E_{32} - \tau_3^* E_{21}} |0, 0, N\rangle \\ &= \exp(\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23} + \tau_3 E_{12}) e^{-2N\sigma_2} |0, 0, N\rangle \\ &\equiv e^{-2N\sigma_2} |N; \Theta\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.26)$$

Definimos o estado coerente não normalizado $||N; \Theta\rangle$, em oposição ao estado $|N; \Theta\rangle$, que é normalizado por definição ^{4.3}:

$$||N; \Theta\rangle \equiv \exp(\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23} + \tau_3 E_{12}) |0, 0, N\rangle. \quad (4.1.27)$$

Pelo teorema de Baker-Campbell-Hausdorff (BCH), sabemos que toda a informação do produto entre dois elementos do grupo está contida nas relações de comutação de sua álgebra, portanto é também independente da representação utilizada. Então, podemos realizar os cálculos na representação padrão tridimensional γ^1 da álgebra $su(3)$, a fim de encontrar as relações entre os parâmetros θ_i , τ_j e σ_k . As relações obtidas são chamadas de fórmulas BCH.

Em termos das representações padrões dadas em (8.1.72), a equação (4.1.25) pode ser reescrita como:

$$e^{\begin{pmatrix} 0 & 0 & \theta_1 \\ 0 & 0 & \theta_2 \\ -\theta_1^* & -\theta_2^* & 0 \end{pmatrix}} = e^{\begin{pmatrix} 0 & \tau_3 & \tau_1 \\ 0 & 0 & \tau_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} e^{\begin{pmatrix} \sigma_1 + \sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 + \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & -2\sigma_2 \end{pmatrix}} e^{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\tau_3^* & 0 & 0 \\ -\tau_1^* & -\tau_2^* & 0 \end{pmatrix}}. \quad (4.1.28)$$

^{4.3}Devido à unitariedade da parametrização exponencial (4.1.23), temos que $\langle N; \Theta | N; \Theta \rangle = \langle 0, 0, N | \Theta^\dagger \Theta | 0, 0, N \rangle = \langle 0, 0, N | \Theta^{-1} \Theta | 0, 0, N \rangle = 1$, pois o estado $|0, 0, N\rangle$ é normalizado segundo (4.1.16).

As exponenciais das matrizes à direita são facilmente executadas, pois são nilpotentes ou diagonais. Já para a diagonalização da matriz do lado esquerdo, encontramos seus autovalores e autovetores, que são dados aqui como passo intermediário:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \theta_1 \\ 0 & 0 & \theta_2 \\ -\theta_1^* & -\theta_2^* & 0 \end{pmatrix} = U_D \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\theta & 0 \\ 0 & 0 & -i\theta \end{pmatrix} U_D^\dagger; \quad (4.1.29)$$

onde $\theta = \sqrt{|\theta_1|^2 + |\theta_2|^2}$. A matriz unitária diagonalizante U_D é dada por:

$$U_D = \frac{1}{\theta} \begin{pmatrix} -\theta_2^* & -\frac{i\theta_1}{\sqrt{2}} & \frac{i\theta_1}{\sqrt{2}} \\ \theta_1^* & -\frac{i\theta_2}{\sqrt{2}} & \frac{i\theta_2}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\theta}{\sqrt{2}} & \frac{\theta}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (4.1.30)$$

O resultado da exponenciação de (4.1.28) é então:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\theta^2} \begin{pmatrix} |\theta_2|^2 + |\theta_1|^2 \cos \theta & \theta_2^* \theta_1 (\cos \theta - 1) & \frac{\theta_1 \theta \sin \theta}{\theta^2} \\ \theta_1^* \theta_2 (\cos \theta - 1) & |\theta_1|^2 + |\theta_2|^2 \cos \theta & \frac{\theta_2 \theta \sin \theta}{\theta^2} \\ -\theta_1^* \theta \sin \theta & -\theta_2^* \theta \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \\ & \begin{pmatrix} 1 & \tau_3 & \tau_1 + \frac{\tau_2 \tau_3}{2} \\ 0 & 1 & \tau_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\sigma_1 + \sigma_2} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\sigma_1 + \sigma_2} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-2\sigma_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\tau_3^* & 1 & 0 \\ -\tau_1^* + \frac{\tau_2^* \tau_3^*}{2} & -\tau_2^* & 1 \end{pmatrix} = \\ & e^{\sigma_2} \begin{pmatrix} e^{\sigma_1 - |\tau_3|^2 e^{-\sigma_1} + \left(\tau_1 + \frac{\tau_3 \tau_2}{2}\right) \left(-\tau_1^* + \frac{\tau_2^* \tau_3^*}{2}\right) e^{-3\sigma_2}} & \tau_3 e^{-\sigma_1} - \tau_2^* \left(\tau_1 + \frac{\tau_3 \tau_2}{2}\right) e^{-3\sigma_2} & \left(\tau_1 + \frac{\tau_3 \tau_2}{2}\right) e^{-3\sigma_2} \\ -\tau_3^* e^{-\sigma_1} + \tau_2 \left(-\tau_1^* + \frac{\tau_2^* \tau_3^*}{2}\right) e^{-3\sigma_2} & e^{-\sigma_1 - |\tau_2|^2 e^{-3\sigma_2}} & \tau_2 e^{-3\sigma_2} \\ \left(-\tau_1^* + \frac{\tau_2^* \tau_3^*}{2}\right) e^{-3\sigma_2} & -\tau_2^* e^{-3\sigma_2} & e^{-3\sigma_2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.1.31)$$

Comparando a terceira coluna da primeira matriz de (4.1.31) com a mesma coluna da última matriz, obtemos as seguintes fórmulas BCH:

$$\begin{cases} w_1 \equiv \tau_1 + \frac{\tau_2 \tau_3}{2} = \frac{\theta_1}{\theta} \tan \theta; \\ w_2 \equiv \tau_2 = \frac{\theta_2}{\theta} \tan \theta; \\ e^{-2\sigma_2} = \cos \theta = (1 + |w_1|^2 + |w_2|^2)^{-\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (4.1.32)$$

Vemos que a normalização do estado $||N, \Theta\rangle$ é dada por $\mathfrak{N}^{-\frac{1}{2}}(\vec{w}^*, \vec{w}) \equiv e^{-2N\sigma_2} = (1 + |w_1|^2 + |w_2|^2)^{-\frac{N}{2}}$. Os parâmetros τ_i e σ_j não são todos independentes, pois vimos anteriormente que são necessários apenas dois parâmetros complexos para especificar um elemento de $SU(3)/U(2)$, por este motivo introduzimos os dois novos parâmetros w_1 e w_2 .

Em (4.1.27), podemos ainda aplicar a conhecida fórmula BCH:

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}; \text{ se } [A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0; \quad (4.1.33)$$

juntamente com os seguintes comutadores:

$$\begin{aligned}
[\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23}, \tau_3 E_{12}] &= -\tau_2 \tau_3 E_{13}; \\
[\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23}, -\tau_2 \tau_3 E_{13}] &= 0; \\
[\tau_3 E_{12}, -\tau_2 \tau_3 E_{13}] &= 0.
\end{aligned} \tag{4.1.34}$$

Então, utilizando (4.1.33) e (4.1.34) em (4.1.27), obtemos:

$$\begin{aligned}
||N; \Theta\rangle &= \exp(\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23}) \exp(\tau_3 E_{12}) \exp\left(\frac{\tau_2 \tau_3}{2} E_{13}\right) |0, 0, N\rangle \\
&= \exp\left[\left(\tau_1 + \frac{\tau_2 \tau_3}{2}\right) E_{13} + \tau_2 E_{23}\right] \exp(\tau_3 E_{12}) |0, 0, N\rangle \\
&= \exp(w_1 E_{13}) \exp(w_2 E_{23}) |0, 0, N\rangle;
\end{aligned} \tag{4.1.27'}$$

onde usamos também as fórmulas BCH de (4.1.32), $E_{12}|0, 0, N\rangle = 0$ e $[E_{13}, E_{23}] = 0$. Finalmente, temos uma expressão para os estados coerentes de simples expansão na base $\{|n_1, n_2, n_3\rangle\}$ e dependente apenas dos dois parâmetros complexos independentes w_1 e w_2 . Doravante, passamos a identificar os três conceitos equivalentes, que são pontos no espaço de fase generalizado M , elementos de $SU(3)/U(2)$ e os estados coerentes, por seu vetor complexo de coordenadas $\vec{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$. Então, expandindo (4.1.27'):

$$\begin{aligned}
||N; \vec{w}\rangle &= \exp\left(w_1 a_1^\dagger a_3 + w_2 a_2^\dagger a_3\right) |0, 0, N\rangle \\
&= \sum_{j,k} \frac{w_1^j}{j!} \frac{w_2^k}{k!} (a_1^\dagger)^j (a_2^\dagger)^k (a_3)^{j+k} |0, 0, N\rangle \\
&= \sum_{0 \leq j+k \leq N} \left[\frac{N!}{j!k!(N-j-k)!} \right]^{\frac{1}{2}} w_1^j w_2^k |j, k, N-j-k\rangle \\
&= \sum_{n_1+n_2+n_3=N} \left(\frac{N!}{n_1!n_2!n_3!} \right)^{\frac{1}{2}} w_1^{n_1} w_2^{n_2} |n_1, n_2, n_3\rangle.
\end{aligned} \tag{4.1.35}$$

Antes de começarmos a calcular várias quantidades úteis usando (4.1.35) e os métodos do PVDT, definimos um último conjunto de parâmetros para o estado coerente. Note que na primeira matriz de (4.1.31) sublinhamos dois elementos, que agora chamamos de $\theta^2 \vec{z}$:

$$\vec{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\theta_1}{\theta} \sin \theta \\ \frac{\theta_2}{\theta} \sin \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 \cos \theta \\ w_2 \cos \theta \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \frac{q_1 + ip_1}{\sqrt{2N}} \\ \frac{q_2 + ip_2}{\sqrt{2N}} \end{pmatrix}. \tag{4.1.36}$$

Na equação acima utilizamos as relações (4.1.32) e definimos as partes reais e imaginárias de z_j como proporcionais a q_j e p_j , respectivamente. Isolando $\vec{w}$ em (4.1.36), obtemos:

$$\vec{w} = \begin{pmatrix} \frac{q_1 + ip_1}{\sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2}} \\ \frac{q_2 + ip_2}{\sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2}} \end{pmatrix}. \tag{4.1.37}$$

Invertendo (4.1.37) para q_j e p_j :

$$\begin{cases} q_j &= \sqrt{\frac{N}{2}} \frac{w_j + w_j^*}{\sqrt{1 + |w_1|^2 + |w_2|^2}} \\ p_j &= \sqrt{\frac{N}{2}} \frac{i(w_j^* - w_j)}{\sqrt{1 + |w_1|^2 + |w_2|^2}} \end{cases}, \quad \text{com } j = 1, 2. \quad (4.1.38)$$

4.2 Resultados para os Estados Coerentes de $SU(3)$

Em (4.1.35), possuímos uma expressão bastante acessível para o estado coerente de uma representação simétrica de $SU(3)$, parametrizando o estado não normalizado com as variáveis complexas $\vec{w}$. Vamos agora calcular várias quantidades úteis derivadas dos estados coerentes, mas primeiramente vamos escrever o estado coerente normalizado em uma forma mais simétrica nos três modos, usando (4.1.32) e (4.1.35):

$$|N; \vec{w}\rangle = \frac{1}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + |w_3|^2)^{\frac{N}{2}}} \sum_{n_1+n_2+n_3=N} \left(\frac{N!}{n_1!n_2!n_3!} \right)^{\frac{1}{2}} w_1^{n_1} w_2^{n_2} w_3^{n_3} |n_1, n_2, n_3\rangle; \quad (4.2.1)$$

onde inserimos $w_3 = 1$ para simetrizar a expressão. A sobreposição entre dois estados coerentes não normalizados, cujos parâmetros são $\vec{w}$ e $\vec{w}'$, é uma quantidade útil, usada na determinação das equações de movimento nas variáveis $\vec{w}$:

$$\begin{aligned} \mathfrak{N}(\vec{w}'^*, \vec{w}) &= \langle N; \vec{w}' | N; \vec{w} \rangle \\ &= \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} \frac{N!}{(n_1!n_1'!n_2!n_2'!n_3!n_3')^{\frac{1}{2}}} (w_1'^*)^{n_1'} w_1^{n_1} (w_2'^*)^{n_2'} w_2^{n_2} (w_3'^*)^{n_3'} w_3^{n_3} \delta_{n_1, n_1'} \delta_{n_2, n_2'} \delta_{n_3, n_3'} \\ &= \sum_{\vec{n}} \frac{N!}{n_1!n_2!n_3!} (w_1'^* w_1)^{n_1} (w_2'^* w_2)^{n_2} (w_3'^* w_3)^{n_3} \\ &= (w_1'^* w_1 + w_2'^* w_2 + 1)^N. \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

Aqui introduzimos a conveniente notação da somatória sobre $\vec{n} \equiv (n_1, n_2, n_3)$, que indica a soma sobre valores tais que $n_1 + n_2 + n_3 = N$, para n_1, n_2 e n_3 inteiros não negativos. Usamos também a relação de ortonormalidade (4.1.16) e a expansão do trinômio:

$$(a + b + c)^N = \sum_{n_1+n_2+n_3=N} \frac{N!}{n_1!n_2!n_3!} a^{n_1} b^{n_2} c^{n_3}. \quad (4.2.3)$$

Antes de procedermos com o cálculo das equações de movimento, vamos mostrar que os estados de (4.2.1) satisfazem uma resolução “diagonal” da identidade, o que é possível devido a sua propriedade de sobre-completudeza.

Os estados coerentes do grupo G são sobre-completos no espaço de Hilbert $\mathbb{V}$, que carrega uma representação irredutível de G . Isto significa que os estados coerentes formam um conjunto completo, uma combinação linear deles pode gerar qualquer estado $|\psi\rangle \in \mathbb{V}$, mas são em número maior que a dimensão de $\mathbb{V}$ e por este motivo não constituem uma base. Por exemplo, a dimensão do espaço $\mathbb{B}_N$ é

finita, enquanto os estados coerentes de $SU(3)$ são indexados por parâmetros contínuos, portanto em número infinito e não enumerável.

Podemos mostrar que a definição (4.1.7) gera um conjunto completo de estados sobre $\mathbb{V}$, que é invariante e irredutível sob a ação de G . Primeiramente, mostramos que o espaço gerado pelo conjunto de estados coerentes $\{|\mathbb{V}, \Theta\rangle\}$, com $\Theta \in G/S$ e S o grupo de estabilidade do estado de referência $|\Phi_0\rangle$, é invariante sobre a ação do grupo G :

$$g|\mathbb{V}, \Theta\rangle = g\Theta|\Phi_0\rangle = \Theta's|\Phi_0\rangle = e^{i\phi(s)}|\mathbb{V}, \Theta'\rangle; \quad (4.2.4)$$

onde utilizamos a decomposição (4.1.6), para $g\Theta = \Theta's \in G$, com $\Theta' \in G/S$ e $s \in S$. Vemos em (4.2.4) que os estados coerentes formam um conjunto invariante sob a aplicação de g , a menos de uma fase global não significativa^{4.4}, e assim também um espaço invariante sob o grupo. No entanto, por hipótese, $\mathbb{V}$ é um espaço invariante irredutível, que por definição é aquele que não possui subespaços invariantes não triviais. Portanto, o espaço invariante gerado por $\{|\mathbb{V}, \Theta\rangle\}$ deve ser todo $\mathbb{V}$.

A parametrização do espaço quociente $SU(3)/U(2)$ é topologicamente idêntica à de S^5/S^1 , onde S^{d-1} é a casca esférica em d dimensões. S^5 pode ser parametrizado por cinco ângulos $\theta, \chi \in [0, \frac{\pi}{2})$ e $\phi_1, \phi_2, \phi_3 \in [0, 2\pi)$, enquanto para S^1 precisamos de apenas um ângulo $\phi_3 \in [0, 2\pi)$. A medida normalizada na superfície S^5 da esfera unitária em seis dimensões é dada por:

$$\begin{aligned} d\Omega_{S^5} &= \frac{2}{\pi^3} d^2x_1 d^2x_2 d^2x_3 \delta(|x_1|^2 + |x_2|^2 + |x_3|^2 - 1) \\ &= \frac{1}{\pi^3} \sin^3 \theta \cos \theta \cos \chi \sin \chi d\theta d\chi d\phi_1 d\phi_2 d\phi_3. \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

Aqui introduzimos a notação bastante útil $d^2x_i = d(\text{Re}x_i)d(\text{Im}x_i)$. Então, realizando a integração sobre o ângulo ϕ_3 , obtemos a medida normalizada em S^5/S^1 :

$$d\Omega_{S^5/S^1} = \frac{2}{\pi^2} \sin^3 \theta \cos \theta \cos \chi \sin \chi d\theta d\chi d\phi_1 d\phi_2. \quad (4.2.5')$$

Comparando a parametrização de S^5/S^1 com (4.1.32) e levando em conta que θ_1 e θ_2 são dois números complexos de fases independentes, mas restritos a $\theta = \sqrt{|\theta_1|^2 + |\theta_2|^2}$, chegamos a seguinte relação entre as parametrizações utilizadas:

$$\begin{cases} w_1 &= \cos \chi \tan \theta e^{-i\phi_1}; \\ w_2 &= \sin \chi \tan \theta e^{-i\phi_2}. \end{cases} \quad (4.2.6)$$

Calculamos o Jacobiano da transformação (4.2.6), mas apenas para os valores absolutos de w_1 e w_2 :

$$\left| \begin{array}{cc} \frac{\partial |w_1|}{\partial \theta} & \frac{\partial |w_1|}{\partial \chi} \\ \frac{\partial |w_2|}{\partial \theta} & \frac{\partial |w_2|}{\partial \chi} \end{array} \right| = \frac{\sin \theta}{\cos^3 \theta}; \quad (4.2.7)$$

e imediatamente obtemos:

$$\begin{aligned} d\Omega_{S^5/S^1} &= \frac{2}{\pi^2} \frac{|w_1||w_2|}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^3} d|w_1|d|w_2|d\phi_1d\phi_2 \\ &= \frac{2}{\pi^2} \frac{d^2w_1 d^2w_2}{(w_1^* w_1 + w_2^* w_2 + 1)^3} \equiv d\Omega. \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

^{4.4}Pois podemos multiplicar previamente o estado coerente por $s^{-1} \in S$.

Então, conferimos que a medida $d\Omega$ fornece uma resolução diagonal da identidade nos estados coerentes de (4.2.1):

$$\begin{aligned}
\int d\Omega |N; \vec{w}\rangle \langle N; \vec{w}| &= \frac{2N!}{\pi^2} \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} \frac{|\vec{n}\rangle \langle \vec{n}'|}{(n_1! n_2! n_3! n_1'! n_2'! n_3'!)^{\frac{1}{2}}} \int d^2 w_1 d^2 w_2 \frac{w_1^{n_1} w_1^{*n_1'} w_2^{n_2} w_2^{*n_2'} w_3^{n_3} w_3^{*n_3'}}{(w_1^* w_1 + w_2^* w_2 + 1)^{N+3}} \\
&= 8N! \sum_{\vec{n}} \frac{|\vec{n}\rangle \langle \vec{n}|}{n_1! n_2! n_3!} \int d\theta (\sin \theta)^{2n_1+2n_2+3} (\cos \theta)^{2n_3+1} \int d\chi (\sin \chi)^{2n_2+1} (\cos \chi)^{2n_1+1} \quad (4.2.9) \\
&= \frac{\mathbb{1}}{\dim \mathbb{B}_N}.
\end{aligned}$$

Em (4.2.9) utilizamos as transformações (4.2.6) e a relação de completeza (8.1.20) do espaço de Fock bosônico de N partículas, juntamente com as integrais definidas:

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 e^{i(n_1-n_1')\phi_1} e^{i(n_2-n_2')\phi_2} &= (2\pi)^2 \delta_{n_1, n_1'} \delta_{n_2, n_2'} \delta_{n_3, n_3'}; \\
\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta (\sin \theta)^{2n_1+2n_2+3} (\cos \theta)^{2n_3+1} &= \frac{(N-n_3+1)! n_3!}{2(N+2)!}; \quad (4.2.10) \\
\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\chi (\sin \chi)^{2n_2+1} (\cos \chi)^{2n_1+1} &= \frac{n_1! n_2!}{2(N-n_3+1)!}.
\end{aligned}$$

Agora vamos calcular a representação (2.2.32) dos operadores geradores de $SU(3)$ no espaço de fase generalizado $SU(3)/U(2)^{4.5}$. Para tanto, calculamos os elementos $\langle N; \vec{w} | a_i^\dagger a_j | N; \vec{w} \rangle$, utilizando (4.1.15.a)-(4.1.15.b) e a versão não normalizada de (4.2.1):

$$\begin{aligned}
\langle N; \vec{w} | a_i^\dagger a_j | N; \vec{w} \rangle &= N! \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} \frac{w_1^{*n_1'} w_1^{n_1} w_2^{*n_2'} w_2^{n_2} w_3^{*n_3'} w_3^{n_3}}{(n_1! n_1'! n_2! n_2'! n_3! n_3'!)^{\frac{1}{2}}} \langle n_1', n_2', n_3' | a_i^\dagger a_j | n_1, n_2, n_3 \rangle \\
&= N w_i^* w_j (|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{N-1}; \quad i, j = 1, 2, 3 \quad \text{e} \quad w_3 = 1.
\end{aligned} \quad (4.2.11)$$

Então, utilizando (8.1.102), a representação de um gerador A_k de $SU(3)$ no espaço de fase generalizado fica:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_k &\equiv \frac{\langle N; \vec{w} | A_k | N; \vec{w} \rangle}{\langle N; \vec{w} | N; \vec{w} \rangle} = \sum_{i,j} \gamma_{ij}^1(A_k) \frac{\langle N; \vec{w} | a_i^\dagger a_j | N; \vec{w} \rangle}{\langle N; \vec{w} | N; \vec{w} \rangle} \\
&= \sum_{i,j} N \gamma_{ij}^1(A_k) \frac{w_i^* w_j}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} = N \frac{\vec{w}^\dagger \gamma^1(A_k) \vec{w}}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1}.
\end{aligned} \quad (4.2.12)$$

Na última linha, para simplificar a notação, estendemos o vetor de coordenadas no espaço de fase para três dimensões $\vec{w} = (w_1 \ w_2 \ 1)^T$.

Devemos agora associar combinações quadráticas do tipo $A_l A_n$ a funções no espaço de fase. Para este fim calculamos os elementos:

^{4.5}Conhecida como representação Q destes observáveis.

$$\begin{aligned}
\langle N; \vec{w} | a_i^\dagger a_j a_k^\dagger a_m | N; \vec{w} \rangle &= N(N-1) w_i^* w_j w_k^* w_m (|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{N-2} \\
&+ N \delta_{jk} w_i^* w_m (|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{N-1}.
\end{aligned} \tag{4.2.13}$$

Novamente utilizando a generalização (8.1.102) dos operadores de Schwinger para representações simétricas, obtemos as funções em M de operadores quadráticos nos geradores de $SU(3)$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{l,n}^2 &\equiv \frac{\langle N; \vec{w} | A_l A_n | N; \vec{w} \rangle}{\langle N; \vec{w} | N; \vec{w} \rangle} = \sum_{i,j,k,m} \gamma_{ij}^1(A_l) \gamma_{km}^1(A_n) \frac{\langle N; \vec{w} | a_i^\dagger a_j a_k^\dagger a_m | N; \vec{w} \rangle}{\langle N; \vec{w} | N; \vec{w} \rangle} \\
&= N(N-1) \sum_{i,j,k,m} \frac{w_i^* \gamma_{ij}^1(A_l) w_j w_k^* \gamma_{km}^1(A_n) w_m}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} + N \sum_{i,j,m} \frac{w_i^* \gamma_{ij}^1(A_l) \gamma_{jm}^1(A_n) w_m}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \\
&= N(N-1) \frac{[\vec{w}^\dagger \gamma^1(A_l) \vec{w}][\vec{w}^\dagger \gamma^1(A_n) \vec{w}]}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} + N \frac{\vec{w}^\dagger \gamma^1(A_l) \gamma^1(A_n) \vec{w}}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1}.
\end{aligned} \tag{4.2.14}$$

Por fim, podemos encontrar as equações de movimento para a parametrização $\vec{w}$ dos estados coerentes não normalizados, utilizando a equação (2.2.36) obtida no contexto do PVDT, que neste caso assume a forma:

$$C_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial w_i \partial w_j^*} \ln \Re(\vec{w}^*, \vec{w}). \tag{4.2.15}$$

Substituindo acima a sobreposição (4.2.2), mas entre estados coerentes indistintos e considerando formalmente independentes $\vec{w}$ e $\vec{w}^*$, obtemos:

$$C = \frac{N}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} \begin{pmatrix} w_2^* w_2 + 1 & -w_1^* w_2 \\ -w_2^* w_1 & w_1^* w_1 + 1 \end{pmatrix}. \tag{4.2.16}$$

O determinante de C é sempre diferente de zero, exceto quando $|w_i| \rightarrow \infty$:

$$\det C = \frac{N^2}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^3}. \tag{4.2.17}$$

Logo, podemos inverter C para definir os parênteses de Poisson generalizados (2.2.29'):

$$C^{-1} = \frac{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1}{N} \begin{pmatrix} w_1^* w_1 + 1 & w_1^* w_2 \\ w_2^* w_1 & w_2^* w_2 + 1 \end{pmatrix}. \tag{4.2.18}$$

Com a matriz C construímos o tensor η de (2.2.35) e assim podemos transformar as equações de movimento para qualquer conjunto de variáveis desejado, calculando a matriz de transformação $\mathcal{T}$ de (2.2.24). A matriz $\mathcal{T}^{-1}$ que vai das variáveis complexas w_1 , w_2 , w_1^* e w_2^* às reais q_1 , q_2 , p_1 e p_2 , apresentadas em (4.1.37), é dada por:

$$\mathcal{T}^{-1} = \sqrt{\frac{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1}{2N}} \begin{pmatrix} 1 + \frac{w_1(w_1^* + w_1)}{2} & \frac{w_1(w_2^* + w_2)}{2} & i \left[1 + \frac{w_1(w_1^* - w_1)}{2} \right] & i \frac{w_1(w_2^* - w_2)}{2} \\ \frac{w_2(w_1^* + w_1)}{2} & 1 + \frac{w_2(w_2^* + w_2)}{2} & i \frac{w_2(w_1^* - w_1)}{2} & i \left[1 + \frac{w_2(w_2^* - w_2)}{2} \right] \\ 1 + \frac{w_1^*(w_1^* + w_1)}{2} & \frac{w_1^*(w_2^* + w_2)}{2} & -i \left[1 + \frac{w_1^*(w_1 - w_1^*)}{2} \right] & -i \frac{w_1^*(w_2 - w_2^*)}{2} \\ \frac{w_2^*(w_1^* + w_1)}{2} & 1 + \frac{w_2^*(w_2^* + w_2)}{2} & -i \frac{w_2^*(w_1 - w_1^*)}{2} & -i \left[1 + \frac{w_2^*(w_2 - w_2^*)}{2} \right] \end{pmatrix}. \tag{4.2.19}$$

Quando aplicamos a transformação $\mathcal{T}^{-1}$, segundo (2.2.23'), ao tensor $\eta(\vec{w}, \vec{w}^*)$, obtido de (4.2.16), vemos imediatamente que o tensor transformado $\bar{\eta}(q_1, q_2, p_1, p_2)$ assume a forma canônica de (2.2.25). Portanto, as variáveis q_i e p_i são coordenadas e momentos canônicos, respectivamente. A Hamiltoniana funcional (2.2.17), escrita nestas variáveis, satisfaz as equações de canônicas de movimento de Hamilton.

4.3 Justificativa do Análogo Clássico

Quando discutimos anteriormente o PVDT, analisamos a evolução devida à equação de Schrödinger de um estado parametrizado restrito a um subespaço não linear $s(M)$ do espaço de Hilbert, mas em nenhum momento fizemos qualquer suposição sobre a forma da função teste utilizada. O PVDT sempre fornece uma resposta independentemente do espaço $s(M)$ escolhido, mas a qualidade desta solução depende crucialmente desta escolha. Nesta seção reunimos argumentos indicando que os estados coerentes geram uma parametrização com significado físico relevante e bastante útil em muitos casos. Enfim, mostramos porque a aplicação do estado coerente mais próximo ao clássico (ECMPC) como parametrização preferencial no PVDT merece ser considerada como o modelo **análogo clássico** do sistema.

Primeiramente, demonstramos que o subespaço $s(M)$ formado apenas pelos estados coerentes é suficientemente amplo para suportar a evolução **exata** de um sistema de grupo dinâmico G para o caso específico de um Hamiltoniano linear H_L em seus geradores $\{A_i\}$, que formam uma base de sua álgebra real e r -dimensional $\mathfrak{L}_G$:

$$H_L = \sum_{i=1}^r \zeta^i A_i \in \mathfrak{L}_G, \quad \zeta^i \in \mathbb{R}. \quad (4.3.1)$$

Como exemplo, vemos que se “desligarmos” as interações entre os bósons no Hamiltoniano (3.2.20) do modelo de três poços, fazendo $\kappa = \Lambda = 0$, obtemos um Hamiltoniano linear na base de $su(3)$:

$$H_L^{su(3)} = \Omega(P_1 + P_2 + P_3). \quad (4.3.2)$$

Para mostrar que o PVDT com estados coerentes é exato para Hamiltonianos lineares, é necessário supor que o estado inicial do sistema é coerente:

$$|\psi(0)\rangle = \Theta(0)|\Phi_0\rangle. \quad (4.3.3)$$

Aqui tomamos, sem perda de generalidade, $t = 0$ como o tempo inicial. O operador $\Theta(0)$ é a representação de um elemento do espaço quociente G/S , onde S é o grupo de estabilidade do estado de referência $|\Phi_0\rangle$. Lembrando que no caso de três modos bosônicos temos que $G/S = SU(3)/U(2)$, quando tomamos o estado de referência $|\Phi_0\rangle = |0, 0, N\rangle$ para um ECMPC.

Supondo que o Hamiltoniano (4.3.1) independe do tempo, obtemos facilmente a solução formal da equação de Schrödinger:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH_L t} |\psi(0)\rangle. \quad (4.3.4)$$

Da definição (4.1.9) de álgebra de Lie, vemos que $e^{-iH_L t}$ é um elemento do grupo G , portanto:

$$\begin{aligned}
e^{-iH_L t}|\psi(0)\rangle &= e^{-iH_L t}\Theta(0)|\Phi_0\rangle \\
&= \Theta(t)s(t)|\Phi_0\rangle \\
&= e^{i\phi(s(t))}|\Theta(t)\rangle = |\psi(t)\rangle;
\end{aligned} \tag{4.3.5}$$

onde usamos que G é, por definição de grupo, fechado por multiplicação, logo seu elemento $e^{-iH_L t}\Theta(0)$ pode ser decomposto na forma (4.1.6) em $\Theta(t)s(t)$, com $s(t) \in S$ e $\Theta(t) \in G/S$. Portanto, segundo a definição (4.1.7), $|\psi(t)\rangle$ é um estado coerente a menos de uma fase global. Como a fase $e^{i\phi(s)}$ não altera o conteúdo físico do estado ^{4.6}, vemos que um estado coerente sempre evolui em outro estado coerente quando o Hamiltoniano é linear nos geradores do grupo. Concluimos que o espaço não linear $s(M)$ é suficiente para a evolução exata quântica dos estados coerentes por H_L qualquer, quando utilizamos o PVDT.

Agora retornamos ao exemplo de (4.3.2). Aplicando o operador de evolução unitária dado pelo Hamiltoniano (4.3.2) no estado coerente dado em (4.1.27'), obtemos:

$$|\psi(t)\rangle \equiv U\Theta(0)|0,0,N\rangle = \exp[-i\Omega t(P_1 + P_2 + P_3)] \exp(w_1^0 E_{13} + w_2^0 E_{23}) \mathfrak{N}^{-\frac{1}{2}} |0,0,N\rangle; \tag{4.3.6}$$

onde w_1^0 e w_2^0 são os parâmetros em $t = 0$ do estado coerente inicial $\Theta(0)|0,0,N\rangle$ e $\mathfrak{N}^{-\frac{1}{2}}$ é o fator de normalização derivado de (4.2.2). Também definimos o operador de evolução unitária $U = e^{-iH_L^{su(3)} t}$. Como vimos anteriormente em (4.1.25), para o caso específico de um elemento de $SU(3)/U(2)$, temos também que todo elemento de $SU(3)$ pode ser escrito em uma decomposição de Gauss:

$$g = e^{\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23} + \tau_3 E_{12}} e^{2\sigma_1 Q_1 + 3\sigma_2 Q_2} e^{-\tau_1^* E_{31} - \tau_2^* E_{32} - \tau_3^* E_{21}} \in SU(3). \tag{4.3.7}$$

No entanto, vimos ainda que esta decomposição quando aplicada em $|0,0,N\rangle$, de acordo com (4.1.26) e (4.1.27'), gera o seguinte estado coerente:

$$g|0,0,N\rangle = \Theta s|0,0,N\rangle = e^{i\phi(s)} \mathfrak{N}^{-\frac{1}{2}} \exp(w_1 E_{13} + w_2 E_{23}) |0,0,N\rangle. \tag{4.3.8}$$

Os parâmetros w_i , σ_i e τ_j , $i = 1, 2$ e $j = 1, 2, 3$, estão relacionados segundo (4.1.32). Agora, expandimos o elemento $\Theta(0) \in SU(3)/U(2) \subset SU(3)$ na forma (4.3.7), assim como o elemento produto $g = U\Theta(0) \in SU(3)$:

$$U\Theta(0) = g \begin{cases} U\Theta(0) = e^{-i\Omega t(P_1 + P_2 + P_3)} \left(e^{\tau_1^0 E_{13} + \tau_2^0 E_{23} + \tau_3^0 E_{12}} e^{2\sigma_1^0 Q_1 + 3\sigma_2^0 Q_2} e^{-(\tau_1^0)^* E_{31} - (\tau_2^0)^* E_{32} - (\tau_3^0)^* E_{21}} \right); \\ g = e^{\tau_1 E_{13} + \tau_2 E_{23} + \tau_3 E_{12}} e^{2\sigma_1 Q_1 + 3\sigma_2 Q_2} e^{-\tau_1^* E_{31} - \tau_2^* E_{32} - \tau_3^* E_{21}}. \end{cases} \tag{4.3.9}$$

Aqui também os parâmetros w_i^0 , σ_i^0 e τ_j^0 estão relacionados por (4.1.32). Como anteriormente, fundamentados no teorema BCH, podemos relacionar os parâmetros de (4.3.9), utilizando as representações padrões dos geradores, dadas em (8.1.72) e (8.1.75).

Empregando a matriz de diagonalização de (3.2.16) para facilitar a exponenciação, obtemos:

^{4.6}A fase global também pode ser evitada multiplicando previamente o estado inicial por uma fase conveniente.

$$\begin{aligned}
U &\doteq \exp \left[i\Omega t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&\doteq \begin{pmatrix} \frac{2}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} & -\frac{1}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} & -\frac{1}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} \\ -\frac{1}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} & \frac{2}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} & -\frac{1}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} \\ -\frac{1}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} & -\frac{1}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} & \frac{2}{3}e^{i\Omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\Omega t} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.3.10}$$

A exponencial para g é dada em (4.1.31), assim como a representação análoga para $\Theta(0)$ trocando os parâmetros σ_i e τ_j por σ_i^0 e τ_j^0 . Multiplicando as matrizes de acordo com (4.3.9), comparamos as terceiras colunas de ambos os lados do resultado, dadas por:

$$\frac{1}{3} \begin{pmatrix} w_1^0(2e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) + w_2^0(-e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) + (-e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) \\ w_1^0(-e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) + w_2^0(2e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) + (-e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) \\ w_1^0(-e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) + w_2^0(-e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) + (2e^{i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) \end{pmatrix} e^{-2\sigma_2^0} = \begin{pmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \\ 1 \end{pmatrix} e^{-2\sigma_2}. \tag{4.3.11}$$

Resolvendo (4.3.11) para $w_1(t)$ e $w_2(t)$:

$$\begin{cases} w_1(t) = \frac{e^{i\Omega t}(2w_1^0 - w_2^0 - 1) + e^{-2i\Omega t}(1 + w_1^0 + w_2^0)}{e^{i\Omega t}(2 - w_1^0 - w_2^0) + e^{-2i\Omega t}(1 + w_1^0 + w_2^0)}; \\ w_2(t) = \frac{e^{i\Omega t}(2w_2^0 - w_1^0 - 1) + e^{-2i\Omega t}(1 + w_1^0 + w_2^0)}{e^{i\Omega t}(2 - w_1^0 - w_2^0) + e^{-2i\Omega t}(1 + w_1^0 + w_2^0)}. \end{cases} \tag{4.3.12}$$

Então, a solução exata da equação de Schrödinger para o Hamiltoniano $H_L^{su(3)}$, supondo que a condição inicial é um estado coerente de parâmetros w_1^0 e w_2^0 , é outro estado coerente, a menos de uma fase global sem significado físico, dado por (4.3.8) com os parâmetros $w_1(t)$ e $w_2(t)$ de (4.3.12).

Para um Hamiltoniano quadrático nos geradores, ou ainda de ordem superior, geralmente a evolução dada pelo PVDt restrita a $s(M)$ não é exata. Contudo, podemos mostrar que o PVDt com a parametrização dos estados coerentes surge naturalmente quando utilizamos o formalismo do propagador de Feynman, juntamente com a aproximação de fase estacionária.

Primeiramente, calculamos o propagador entre dois estados coerentes, para um Hamiltoniano H qualquer que age sobre o espaço $\mathbb{B}_N$:

$$K(\vec{w}^f, t_f; \vec{w}^i, t_i) = \langle N; \vec{w}^f | e^{-iH(t_f - t_i)} | N; \vec{w}^i \rangle. \tag{4.3.13}$$

Dividimos o intervalo de tempo $(t_f - t_i)$ em m intervalos iguais $\frac{(t_f - t_i)}{m} \equiv \epsilon$, enquanto abrimos a exponencial de (4.3.13) em m fatores idênticos. Entre cada par de fatores, colocamos uma identidade em $\mathbb{B}_N$ escrita em termos dos estados coerentes, usando (4.2.8) e (4.2.9):

$$K(\vec{w}^f, t_f; \vec{w}^i, t_i) = \int D\Omega \prod_{n=0}^{m-1} \langle N; \vec{w}^{(n+1)} | e^{-iH\epsilon} | N; \vec{w}^{(n)} \rangle. \tag{4.3.14}$$

Introduzimos aqui a notação $\vec{w}^{(0)} \equiv \vec{w}^i$ e $\vec{w}^{(m)} \equiv \vec{w}^f$. Também definimos o seguinte produto:

$$D\Omega \equiv \prod_{k=1}^{m-1} (\dim \mathbb{B}_N) \frac{2}{\pi^2} \frac{d^2 w_1^{(k)} d^2 w_2^{(k)}}{(|w_1^{(k)}|^2 + |w_2^{(k)}|^2 + 1)^3}. \tag{4.3.15}$$

Tomando o limite $m \rightarrow \infty$, onde $\epsilon = dt$ e $\vec{w}^{(n+1)} = \vec{w}^{(n)} + d\vec{w}^{(n)}$, temos:

$$\langle N; \vec{w}^{(n)} + d\vec{w}^{(n)} | e^{-iHdt} | N; \vec{w}^{(n)} \rangle \cong \langle N; \vec{w}^{(n)} + d\vec{w}^{(n)} | (\mathbb{1} - iHdt) | N; \vec{w}^{(n)} \rangle. \quad (4.3.16)$$

Então, devemos substituir na última equação a relação:

$$\langle N; \vec{w}^{(n)} + d\vec{w}^{(n)} | \cong \langle N; \vec{w}^{(n)} | + d\vec{w}^{*(n)} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{w}^{*(n)}} \langle N; \vec{w}^{(n)} |. \quad (4.3.17)$$

Aqui tratamos como formalmente independentes as variáveis $\vec{w}^{(n)}$ e $\vec{w}^{*(n)}$, lembrando também que o estado $\langle N; \vec{w}^{(n)} |$ só depende destas últimas. Nas equações (4.3.16) e (4.3.17) retivemos apenas os termos até primeira ordem em dt e $d\vec{w}$. Realizando a substituição:

$$\begin{aligned} \langle N; \vec{w}^{(n)} + d\vec{w}^{(n)} | (\mathbb{1} - iHdt) | N; \vec{w} \rangle &= \langle N; \vec{w}^{(n)} | N; \vec{w}^{(n)} \rangle + d\vec{w}^{*(n)} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \vec{w}^{*(n)}} \langle N; \vec{w}^{(n)} | \right) | N; \vec{w}^{(n)} \rangle \\ &\quad - i dt \langle N; \vec{w}^{(n)} | H | N; \vec{w}^{(n)} \rangle. \end{aligned} \quad (4.3.18)$$

Devido ao limite $m \rightarrow \infty$, passamos a tratar a dependência temporal das variáveis como contínua, logo $\vec{w}^{(n)} \rightarrow \vec{w}(t)$. Lembrando agora que os estados $|N; \vec{w}\rangle$ são normalizados, podemos escrever a seguinte identidade:

$$\begin{aligned} d\vec{w}^*(t) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \vec{w}^*} \langle N; \vec{w}(t) | \right) | N; \vec{w}(t) \rangle &= dt \frac{d\vec{w}^*}{dt} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \vec{w}^*} \langle N; \vec{w}(t) | \right) | N; \vec{w}(t) \rangle \\ &= dt \left(\frac{d}{dt} \langle N; \vec{w}(t) | \right) | N; \vec{w}(t) \rangle \\ &= dt \left(\frac{d}{dt} \langle N; \vec{w} | N; \vec{w} \rangle - \langle N; \vec{w} | \frac{d}{dt} | N; \vec{w} \rangle \right) \\ &= -dt \langle N; \vec{w} | \frac{d}{dt} | N; \vec{w} \rangle. \end{aligned} \quad (4.3.19)$$

Substituindo o resultado (4.3.19) em (4.3.18):

$$\begin{aligned} \langle N; \vec{w}(t + dt) | (\mathbb{1} - iHdt) | N; \vec{w}(t) \rangle &\cong 1 - dt \left(\langle N; \vec{w} | \frac{d}{dt} | N; \vec{w} \rangle + i \langle N; \vec{w} | H | N; \vec{w} \rangle \right) \\ &\cong \exp \left[i dt \left(\langle N; \vec{w} | i \frac{d}{dt} | N; \vec{w} \rangle - \langle N; \vec{w} | H | N; \vec{w} \rangle \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.3.20)$$

Finalmente, recolocamos (4.3.20) resultado em (4.3.14):

$$\begin{aligned} K(\vec{w}^f, t_f; \vec{w}^i, t_i) &= \int D\Omega \exp \left[i \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\langle N; \vec{w} | i \frac{d}{dt} | N; \vec{w} \rangle - \langle N; \vec{w} | H | N; \vec{w} \rangle \right) \right] \\ &\equiv \int D\Omega \exp [i\Phi(\vec{w}^*, \vec{w})]. \end{aligned} \quad (4.3.21)$$

Na aproximação de fase estacionária, expandimos $\Phi(\vec{w}^*, \vec{w})$ em torno de caminhos tais que sua variação em primeira ordem se anule:

$$\delta\Phi = 0 = \delta \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\langle N; \vec{w} | i \frac{d}{dt} | N; \vec{w} \rangle - \langle N; \vec{w} | H | N; \vec{w} \rangle \right). \quad (4.3.22)$$

Note que (4.3.22) é exatamente o PVDT como utilizado em (2.2.6) para a Lagrangiana (2.2.5). Embora menos prática, esta é perfeitamente equivalente à Lagrangiana (2.2.9), pois as duas levam corretamente à equação de Schrödinger.

Em nenhum momento pretendemos utilizar o propagador (4.3.21) para obter a evolução de um estado, o que resultaria em uma solução aproximada diferente do PVDT. Concluimos apenas que da condição de fase estacionária (4.3.22) surge naturalmente o formalismo utilizado na seção 2.2 e já incluída a parametrização com estados coerentes. Portanto, apenas supondo que o sistema evolui entre estados coerentes, vemos que PVDT com a parametrização escolhida é uma aproximação semiclássica consistente com outros métodos de aproximação da dinâmica de um sistema quântico.

Contudo, existe mais um caso limítrofe, além dos Hamiltonianos lineares, no qual o PVDT é exato. Também no chamado limite macroscópico, $N \rightarrow \infty$, o PVDT com parametrização dada pelos estados coerentes atinge o limite clássico exato da dinâmica do sistema.

Para o limite clássico de um sistema quântico é exigido que medidas exatas e simultâneas em observáveis não comutantes sejam possíveis. Geralmente este requisito é satisfeito se a média do produto de dois observáveis arbitrários em um estado físico qualquer do sistema fatora-se quando $\hbar \rightarrow 0$:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle O_1 O_2 \rangle = \langle O_1 \rangle \langle O_2 \rangle. \quad (4.3.23)$$

Em geral, podemos mostrar de (4.3.23) que o limite $\hbar \rightarrow 0$ é equivalente, no contexto de estados coerentes, a $N \rightarrow \infty$ [Yaf82]. No caso especial das representações totalmente simétricas de $SU(3)$, basta mostrarmos que as médias dos operadores sobre $\mathbb{B}_N$ em estados coerentes apropriados são fatoradas no limite $N \rightarrow \infty$ para que o limite clássico correto seja atingido.

Como qualquer observável em $\mathbb{B}_N$ pode ser escrito, em princípio, como uma série de potências nos oito geradores $\{A_i\}$ de $SU(3)$, precisamos apenas mostrar que a média do produto de dois geradores é fatorada no limite macroscópico. Utilizando (4.2.12) e (4.2.14), temos:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle N; \vec{w} | A_i A_j | N; \vec{w} \rangle}{N^2} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{N(N-1)}{N^2} \frac{\langle N; \vec{w} | A_i | N; \vec{w} \rangle}{N} \frac{\langle N; \vec{w} | A_j | N; \vec{w} \rangle}{N} + \frac{1}{N} \frac{\vec{w}^\dagger \gamma^1(A_i) \gamma^1(A_j) \vec{w}}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \right] \\ &= \frac{\langle N; \vec{w} | A_i | N; \vec{w} \rangle}{N} \frac{\langle N; \vec{w} | A_j | N; \vec{w} \rangle}{N}. \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

Desta equação temos também que a média de um Hamiltoniano em estados coerentes, que chamamos de Hamiltoniana funcional $\mathcal{H}$, atinge seu limite clássico no limite macroscópico $N \rightarrow \infty$ e pode ser usada para cálculos termodinâmicos exatos, como por exemplo no estudo de transições de fase. No limite em que as médias se fatoram, podemos ver os geradores de $SU(3)$ como quantidades clássicas generalizadas independentes e não correlacionadas, cujas equações de movimento podem ser dadas pelas médias fatoradas de equações de Heisenberg.

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle N; \vec{w} | A_i | N; \vec{w} \rangle}{N} = \frac{A_i}{N} \equiv a_i; \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle N; \vec{w} | A_i A_j | N; \vec{w} \rangle}{N^2} = a_i a_j. \end{array} \right. \quad (4.3.25)$$

As oito quantidades clássicas a_j satisfazem um sistema de equações diferenciais dado por:

$$\begin{aligned}
\langle N; \vec{w} | \frac{dA_j}{dt} | N; \vec{w} \rangle &= \frac{dA_j}{dt} = N \frac{da_j}{dt} \\
&= i \langle N; \vec{w} | [H, A_j] | N; \vec{w} \rangle, \quad j = 1, \dots, 8.
\end{aligned}
\tag{4.3.26}$$

Note que os operadores resultantes de $[H, A_i]$ devem ter suas médias fatoradas apenas após o cálculo do comutador. Usamos também em (4.3.26) que os estados $|N; \vec{w}\rangle$ não dependem do tempo na interpretação de Heisenberg.

Na seção 8.4, mostramos que se o grupo de estabilidade do estado de referência, escolhido na definição dos estados coerentes, coincidir com um dos grupos de estabilidade das classes do grupo G , também associado à definição dos estados coerentes, então os parênteses de Poisson definidos em (2.2.29), no contexto do PVDt, reproduzem as relações de comutação da álgebra correspondente a G . No caso dos estados coerentes de $SU(3)$, mostramos que existem órbitas das classes deste grupo com subgrupo de estabilidade $U(2)$, justamente o mesmo grupo de estabilidade do estado de referência $|0, 0, N\rangle$, usado na obtenção do ECMPC das representações totalmente simétricas. Consequentemente podemos escrever:

$$\begin{aligned}
\langle N; \vec{w} | [A_j, A_k] | N; \vec{w} \rangle &= i \{ \mathcal{A}_j(\vec{w}^*, \vec{w}), \mathcal{A}_k(\vec{w}^*, \vec{w}) \} \\
&= i \sum_{m=1}^8 c_{jk}^m \mathcal{A}_m(\vec{w}^*, \vec{w}).
\end{aligned}
\tag{4.3.27}$$

As constantes c_{jk}^m são os fatores de estrutura de $su(3)$, mas diferentemente da seção 8.4, aqui estamos utilizando a “notação dos físicos” para definição de álgebra de Lie^{4.7}. É um resultado muito forte a conservação da estrutura da álgebra em uma estrutura simplética, quando utilizamos o PVDt e a parametrização de estados coerentes. Logo, a equação de Heisenberg em (4.3.26) assume a forma clássica exata de (2.2.31.b) quando o Hamiltoniano é linear nos oito geradores do grupo $SU(3)$:

$$\begin{aligned}
\frac{dA_k}{dt} &= i \langle N; \vec{w} | [H_L, A_k] | N; \vec{w} \rangle \\
&= i \sum_{j=1}^8 \zeta^j \langle N; \vec{w} | [A_j, A_k] | N; \vec{w} \rangle \\
&= - \sum_{j=1}^8 \{ \zeta^j \mathcal{A}_j, \mathcal{A}_k \} \\
&= \{ \mathcal{A}_k, \langle N; \vec{w} | H_L | N; \vec{w} \rangle \} \equiv \{ \mathcal{A}_k, \mathcal{H}_L \}.
\end{aligned}
\tag{4.3.28}$$

Mais uma vez o formalismo quântico e clássico se correspondem exatamente. No entanto, de forma geral, funções não lineares dos geradores não têm suas relações de comutação conservadas pelos parênteses de Poisson e a correspondência entre a equação de Heisenberg e (2.2.31.b) não é mantida para a equação de movimento de um operador qualquer sobre $\mathbb{B}_N$, assim como também não é conservada para Hamiltonianos não lineares. Apesar disso, no limite macroscópico a correspondência é reobtida para um operador $O(A_j)$, com dependência arbitrária nos geradores, e um Hamiltoniano $H(A_j)$, também com dependência qualquer, devido à fatoração das médias:

^{4.7}Os fatores de estrutura da equação (4.3.27) seguem a mesma notação da relação (4.1.10), devida à definição (4.1.9) de álgebra de Lie.

$$\begin{aligned}
\lim_{N \rightarrow \infty} \langle N; \vec{w} | \frac{dO(A_j)}{dt} | N; \vec{w} \rangle &= \frac{dO(\langle N; \vec{w} | A_j | N; \vec{w} \rangle)}{dt} = \frac{dO(A_j)}{dt} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} i \langle N; \vec{w} | [H(A_j), O(A_j)] | N; \vec{w} \rangle \\
&= -\{H(A_j), O(A_j)\} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \{ \langle N; \vec{w} | O(A_j) | N; \vec{w} \rangle, \mathcal{H}(\vec{w}^*, \vec{w}) \}.
\end{aligned} \tag{4.3.29}$$

Note que, na segunda linha de (4.3.29), o comutador sempre deve ser calculado antes da realização do limite. Então, mostramos que o formalismo clássico é equivalente ao quântico nos dois limites em que o PVDT é exato.

Como último argumento a favor do PVDT parametrizado com estados coerentes, vamos avaliar os resultados da seção 8.2. Nesta seção mostramos que os estados coerentes obtidos de estados de referência de máximo peso de uma representação irredutível de $su(n)$ são aqueles que minimizam a chamada incerteza total da álgebra, que é uma medida das flutuações quânticas do sistema e invariante por transformações unitárias. Este é o verdadeiro motivo da denominação destes estados como os mais próximos aos clássicos.

Então, o ECMPC, que obtivemos nas seções anteriores para $SU(3)$, minimiza a incerteza associada a $su(3)$. Equivalentemente, podemos dizer que ele maximiza a pureza da álgebra, definida como:

$$\mathcal{P}_{su(3)}(|\psi\rangle) = \frac{9}{N^2} \left(\frac{\langle \psi | Q_1 | \psi \rangle^2}{3} + \frac{\langle \psi | Q_2 | \psi \rangle^2}{4} + \sum_{j=1}^3 \frac{\langle \psi | P_j | \psi \rangle^2}{12} + \sum_{k=1}^3 \frac{\langle \psi | J_k | \psi \rangle^2}{12} \right); \tag{4.3.30}$$

onde o fator $\frac{9}{N^2}$ é uma normalização tal que o ECMPC tem pureza generalizada igual a um. Note que a pureza é uma medida de “distância” entre os estados. Aqueles que minimizam $\mathcal{P}_{su(3)}(|\psi\rangle)$ são chamados de estados maximamente emaranhados no sentido generalizado e são os mais distantes dos clássicos devido à presença de grandes flutuações quânticas^{4.8}.

Quando utilizamos o PVDT com parametrização dada pelos ECMPC, “obrigamos” o estado a evoluir dentro de um espaço não linear $s(M)$ formado apenas pelos estados que maximizam (4.3.30). Entretanto, a dinâmica quântica exata pode privilegiar o afastamento do sistema em relação a $s(M)$, reduzindo o acordo entre a aproximação semiclássica e os resultados quânticos. Portanto, utilizando $\mathcal{P}_{su(3)}$, podemos acompanhar o distanciamento da situação onde o PVDT é exato, avaliando a qualidade de um possível cálculo semiclássico de mesmas condições iniciais.

Nesta seção enumeramos vários argumentos apontando o método obtido do PVDT, utilizando os estados coerentes na parametrização, especialmente os ECMPC, como uma aproximação semiclássica consistente e merecedora da designação de **análogo clássico** do sistema.

^{4.8}A pureza generalizada é melhor discutida na seção 8.2, onde mostramos que esta medida pode ser escrita como o traço do quadrado de um operador densidade reduzido, justificando sua denominação.

Neste capítulo aplicamos a aproximação análoga clássica ao modelo três modos locais. Desta forma, obtemos vários resultados analíticos relevantes à compreensão da dinâmica populacional do sistema, apenas utilizando as conhecidas ferramentas da mecânica clássica [Gol69, dA95].

A Hamiltoniana análoga clássica do modelo é encontrada na seção 5.1, onde também introduzimos variáveis canônicas de ângulo e ação, cuja interpretação física é imediata em nosso problema.

Na breve seção 5.2 exibimos as equações de movimento clássicas que regem a dinâmica do condensado em potencial de poço triplo. Então, calculamos a localização dos pontos de equilíbrio do modelo, mostrados na seção 5.3, visando as implicações físicas de cada um destes estados clássicos.

Para completar a discussão analítica do sistema análogo clássico, na seção 5.4 estudamos a estabilidade do equilíbrio em cada ponto fixo, também incluindo os efeitos das colisões cruzadas.

5.1 Hamiltoniana do Análogo Clássico

Agora vamos calcular a representação análoga clássica do Hamiltoniano do modelo de um condensado em poço triplo (3.2.20), utilizando as identidades (4.2.11)-(4.2.14). Também fazemos aqui a transformação para as variáveis canônicas q_i e p_i , de coordenada e momento generalizados, empregando as relações (4.1.37). Vamos construir o resultado final por partes:

$$\begin{aligned} \langle N; \vec{w} | P_1 + P_2 + P_3 | N; \vec{w} \rangle &= \sum_{i \neq j} \frac{\langle N; \vec{w} | a_i^\dagger a_j | N; \vec{w} \rangle}{\langle N, \vec{w} | N; \vec{w} \rangle} \\ &= N \frac{w_1^* w_2 + w_2^* w_1 + w_1 + w_1^* + w_2 + w_2^*}{1 + |w_1|^2 + |w_2|^2}. \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

Na transformação para variáveis canônicas usamos as identidades auxiliares:

$$\begin{aligned} w_1 w_2^* + w_2 w_1^* &= \frac{2}{r^2} (q_1 q_2 + p_1 p_2); \\ w_i + w_i^* &= \frac{2}{r} q_i; \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

onde definimos a grandeza:

$$r \equiv \sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2}; \quad (5.1.3)$$

de maneira que obtemos uma nova identidade auxiliar:

$$|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1 = \frac{2N}{r^2}. \quad (5.1.4)$$

Então, nas variáveis canônicas, a equação (5.1.1) assume a forma:

$$\langle P_1 + P_2 + P_3 \rangle = (q_1 q_2 + p_1 p_2) + (q_1 + q_2) \sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2}. \quad (5.1.1')$$

Ao próximo termo do Hamiltoniano (3.2.20) vamos reacrescentar o termo constante de (3.2.19), descartado na substituição em $\hat{H}$, a fim de simplificar os cálculos, mas não alterando as equações de movimento:

$$\begin{aligned} \langle \tfrac{1}{2}(4Q_1^2 + 3Q_2^2) + \hat{N} \left(\tfrac{\hat{N}}{3} - 1 \right) \rangle &= \langle \sum_i a_i^{\dagger 2} a_i^2 \rangle \\ &= \frac{N(N-1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (|w_1|^4 + |w_2|^4 + 1). \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

Nas variáveis de coordenada e momento canônicas obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \tfrac{1}{2}(4Q_1^2 + 3Q_2^2) + \hat{N} \left(\tfrac{\hat{N}}{3} - 1 \right) \rangle &= \frac{(N-1)}{2N} [(q_1^2 + p_1^2)^2 + (q_2^2 + p_2^2)^2 + (q_1^2 + p_1^2)(q_2^2 + p_2^2) \\ &\quad - 2N(q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2)] + N(N-1). \end{aligned} \quad (5.1.5')$$

Agora, o último termo de (3.2.20) acrescido de parte do fator do primeiro termo fica:

$$\begin{aligned} \langle Q_1(P_3 - P_1) + \tfrac{Q_2}{2}(P_1 + P_3 - 2P_2) + \tfrac{\hat{N}}{3}(P_1 + P_2 + P_3) \rangle &= \\ \langle a_1^{\dagger} a_1 (a_2^{\dagger} a_3 + a_3^{\dagger} a_2) + a_2^{\dagger} a_2 (a_3^{\dagger} a_1 + a_1^{\dagger} a_3) + a_3^{\dagger} a_3 (a_1^{\dagger} a_2 + a_2^{\dagger} a_1) \rangle &= \\ \frac{N(N-1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} [|w_1|^2 (w_2^* + w_2) + |w_2|^2 (w_1^* + w_1) + w_1^* w_2 + w_2^* w_1]. \end{aligned} \quad (5.1.6)$$

Transformando as variáveis:

$$\begin{aligned} \langle Q_1(P_3 - P_1) + \tfrac{Q_2}{2}(P_1 + P_2 - 2P_2) + \tfrac{\hat{N}}{3}(P_1 + P_2 + P_3) \rangle &= \\ \frac{(N-1)}{2N} \left\{ [q_1(q_2^2 + p_2^2) + q_2(q_1^2 + p_1^2)] \sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2} + (q_1 q_2 + p_1 p_2)(2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2) \right\}. \end{aligned} \quad (5.1.6')$$

Reunindo os termos e descartando as constantes, obtemos a Hamiltoniana análoga clássica do sistema $\mathcal{H}(\vec{w}^*, \vec{w}) = \langle N; \vec{w} | \hat{H} | N; \vec{w} \rangle$ no conjunto de variáveis complexas:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\vec{w}^*, \vec{w}) &= \Omega' N \frac{w_1^* w_2 + w_2^* w_1 + w_1 + w_1^* + w_2 + w_2^*}{1 + |w_1|^2 + |w_2|^2} \\ &\quad + \kappa N(N-1) \frac{|w_1|^4 + |w_2|^4 + 1}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} \\ &\quad - 2\Lambda N(N-1) \frac{|w_1|^2 (w_2^* + w_2) + |w_2|^2 (w_1^* + w_1) + w_1^* w_2 + w_2^* w_1}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2}. \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

Vemos que o estado coerente $|N; w_1 = w_2 = 0\rangle = |0, 0, N\rangle$ possui energia média igual a $\kappa N(N-1)$, o que era esperado, pois temos apenas a energia de interação de bósons aos pares em um mesmo poço.

Reescrevendo (5.1.7) no conjunto de variáveis canônicas de coordenada e momento, também descartando termos constantes, obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(q_i, p_i) = & \Omega' \left[(q_1 q_2 + p_1 p_2) + (q_1 + q_2) \sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2} \right] \\ & + \kappa \frac{(N-1)}{2N} \left[(q_1^2 + p_1^2)^2 + (q_2^2 + p_2^2)^2 + (q_1^2 + p_1^2)(q_2^2 + p_2^2) - 2N(q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2) \right] \\ & - \Lambda \frac{(N-1)}{N} \left\{ [q_1(q_2^2 + p_2^2) + q_2(q_1^2 + p_1^2)] \sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2} \right. \\ & \left. + (q_1 q_2 + p_1 p_2)(2N - q_1^2 - q_2^2 - p_1^2 - p_2^2) \right\}. \end{aligned} \quad (5.1.7')$$

Agora fazemos uma transformação canônica para variáveis de ângulo e ação:

$$\begin{cases} q_i &= \sqrt{2J_i} \cos \phi_i \\ p_i &= -\sqrt{2J_i} \sin \phi_i \end{cases}, \quad i = 1, 2; \quad (5.1.8)$$

cujas transformações inversas são dadas por:

$$\begin{cases} \phi_i &= -\arctan\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \\ J_i &= \frac{1}{2}(q_i^2 + p_i^2) \end{cases}, \quad i = 1, 2. \quad (5.1.9)$$

Neste novo conjunto de variáveis, reescrevemos a Hamiltoniana (5.1.7'):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\phi_i, J_i) = & 2\Omega' \left[\sqrt{J_1 J_2} \cos(\phi_1 - \phi_2) + (\sqrt{J_1} \cos \phi_1 + \sqrt{J_2} \cos \phi_2) \sqrt{N - J_1 - J_2} \right] \\ & + \kappa \frac{(N-1)}{N} \left[2J_1^2 + 2J_2^2 + 2J_1 J_2 - 2N(J_1 + J_2) \right] \\ & - 4\Lambda \frac{(N-1)}{N} \left[(\sqrt{J_1} J_2 \cos \phi_1 + \sqrt{J_2} J_1 \cos \phi_2) \sqrt{N - J_1 - J_2} \right. \\ & \left. + \sqrt{J_1 J_2} \cos(\phi_1 - \phi_2)(N - J_1 - J_2) \right]. \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

Lembremos agora que o número de partículas é uma constante de movimento que foi levada em conta naturalmente quando fizemos a representação $Q^{5.1}$ do Hamiltoniano, pois $\langle N, \vec{w} | \hat{N} | N, \vec{w} \rangle = N$; ou seja, a representação Q do número total de partículas é uma constante. No entanto, podemos colocar a constante de movimento explicitamente na Hamiltoniana, tornando N uma variável de ação cujo ângulo conjugado é cíclico. Desta forma, aumentamos formalmente o número de graus de liberdade do sistema para três, definindo o ângulo θ tal que:

$$\dot{\theta} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial N} \quad \text{e} \quad \dot{N} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta} = 0. \quad (5.1.11)$$

No espaço de fase estendido hexadimensional, fazemos uma nova transformação de variáveis dada pela seguinte geratriz [Gol69]:

^{5.1}Aqui utilizamos “representação Q ” como sinônimo de média nos estados coerentes. Desta maneira, induzimos uma representação dos operadores sobre o espaço de fase generalizado M .

$$G(\phi_1, \phi_2, \theta, I_1, I_2, I_3) = I_1(\phi_1 + \theta) + I_2(\phi_2 + \theta) + I_3\theta. \quad (5.1.12)$$

Então, a transformação canônica é dada por:

$$\varphi_i = \frac{\partial G}{\partial I_i}, \quad J_k = \frac{\partial G}{\partial \phi_k} \quad \text{e} \quad N = \frac{\partial G}{\partial \theta}; \quad \text{para } i = 1, 2, 3 \text{ e } k = 1, 2. \quad (5.1.13)$$

Ou seja:

$$\begin{cases} \varphi_1 = \phi_1 + \theta, & \varphi_2 = \phi_2 + \theta, & \varphi_3 = \theta; \\ I_1 = J_1, & I_2 = J_2, & I_3 = N - J_1 - J_2; \end{cases} \quad (5.1.14)$$

cujas transformações inversas são:

$$\begin{cases} \phi_1 = \varphi_1 - \varphi_3, & \phi_2 = \varphi_2 - \varphi_3, & \theta = \varphi_3; \\ J_1 = I_1, & J_2 = I_2, & N = I_1 + I_2 + I_3. \end{cases} \quad (5.1.14')$$

A função geratriz independente do tempo garante uma transformação canônica, com dinâmica dada pela mesma Hamiltoniana escrita nas novas variáveis.

Se adicionarmos o termo constante $\kappa N(N - 1)$ a (5.1.10), reescrevemos esta Hamiltoniana do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\varphi_i, I_i) &= 2\Omega' [\sqrt{I_1 I_2} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \sqrt{I_1 I_3} \cos(\varphi_1 - \varphi_3) + \sqrt{I_2 I_3} \cos(\varphi_2 - \varphi_3)] \\ &+ \kappa \frac{N-1}{N} [I_1^2 + I_2^2 + I_3^2] \\ &- 4\Lambda \frac{N-1}{N} [I_3 \sqrt{I_1 I_2} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + I_2 \sqrt{I_1 I_3} \cos(\varphi_1 - \varphi_3) + I_1 \sqrt{I_2 I_3} \cos(\varphi_2 - \varphi_3)]. \end{aligned} \quad (5.1.15)$$

Lembremos que Ω' possui um fator $N = I_1 + I_2 + I_3$. Não transformamos os fatores $\frac{N-1}{N}$, primeiramente por simplicidade, mas também porque próximo ao limite clássico exato $N \gg 1$ este fator pode ser facilmente aproximado pela unidade. Neste limite a Hamiltoniana (5.1.15) poderia ser obtida diretamente do Hamiltoniano (3.1.25'), realizando a aproximação semiclássica conhecida com substituição de Heisenberg:

$$a_j^\dagger \rightarrow \sqrt{I_j} e^{i\varphi_j} \quad \text{e} \quad a_j \rightarrow \sqrt{I_j} e^{-i\varphi_j}; \quad j = 1, 2, 3. \quad (5.1.16)$$

A partir desta substituição, podemos simplesmente tratar φ_j e I_j como variáveis canônicas clássicas de ângulo e ação. Esta substituição é justificável, pois fornece a Hamiltoniana clássica exata do oscilador harmônico, quando empregada em seu Hamiltoniano quântico associado, mas descartando a energia de ponto-zero.

Vemos que a Hamiltoniana (5.1.15) pode ser encarada como a Hamiltoniana que descreve três osciladores harmônicos idênticos e acoplados igualmente um a um (tunelamento), mas com a presença de um termo de acoplamento reforçado pela presença do terceiro oscilador (colisão cruzada).

Continuando esta interpretação, vemos que as ações I_j podem ser vistas como as populações médias de cada um dos poços e φ_j como a fase do condensado em cada poço. Como o tunelamento, aos moldes de Josephson, somente depende de diferenças de fase entre os modos, não é por acaso que é possível eliminar uma variável de ângulo na equação (5.1.10). Como também possuímos a grandeza conservada

$N = I_1 + I_2 + I_3$, não é surpreendente que possamos eliminar uma das ações em (5.1.10), reduzindo duas variáveis do sistema ao todo. O ponto interessante é que isto tudo foi feito automaticamente quando restringimos a acessibilidade da dinâmica do sistema ao subespaço não linear $s(M)$ do espaço de Hilbert, parametrizado pelo espaço quociente $SU(3)/U(2)$, considerando como referência o estado de máximo peso da representação totalmente simétrica de $SU(3)$.

Em (5.1.15), a restrição sobre número total de partículas constante foi transformada por (5.1.11) na função conservada $N = I_1 + I_2 + I_3$, tal que:

$$\{\mathcal{H}, N\} = 0. \quad (5.1.17)$$

5.2 Equações de Movimento

Essencialmente, obtemos a Hamiltoniana do sistema em três conjuntos de variáveis. Primeiramente no par de variáveis complexas w_1 e w_2 , dada pela equação (5.1.7), depois nas coordenadas canônicas de posição e momento q_1, q_2, p_1 e p_2 em (5.1.7') e, por fim, nas coordenadas canônicas de ângulo e ação ϕ_1, ϕ_2, J_1 e J_2 em (5.1.10). Cada um destes conjuntos de variáveis tem suas vantagens para algum tipo de cálculo ou interpretação do sistema, como exemplo temos o significado direto de J_i como a média populacional do condensado no poço i .

No caso das Hamiltonianas (5.1.7') e (5.1.10), respectivamente, as variáveis clássicas generalizadas obedecem às equações canônicas de movimento de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \text{ e } \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2; \quad (5.2.1.a)$$

$$\dot{\phi}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J_i} \text{ e } \dot{J}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi_i}, \quad i = 1, 2. \quad (5.2.1.b)$$

Já nas variáveis complexas, as equações de movimento, obtidas de (2.2.19'') invertendo C com (4.2.18), aparentemente são mais complicadas:

$$\begin{cases} \dot{w}_1 &= -i \frac{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1}{N} \left[(|w_1|^2 + 1) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_1^*} + w_1 w_2^* \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_2^*} \right]; \\ \dot{w}_2 &= -i \frac{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1}{N} \left[(|w_2|^2 + 1) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_2^*} + w_2 w_1^* \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_1^*} \right]. \end{cases} \quad (5.2.1.c)$$

Calculando (5.2.1.b), obtemos após algumas manipulações:

$$\begin{aligned}
\dot{\phi}_1 &= \cos(\phi_1 - \phi_2) \sqrt{\frac{J_2}{J_1}} [\Omega' - 2L(N - 3J_1 - J_2)] \\
&+ \cos \phi_1 \left(\sqrt{\frac{N - J_1 - J_2}{J_1}} - \sqrt{\frac{J_1}{N - J_1 - J_2}} \right) (\Omega' - 2LJ_2) \\
&- \cos \phi_2 \sqrt{\frac{J_2}{N - J_1 - J_2}} [\Omega' + 2L(2N - 3J_1 - 2J_2)] + 2k(2J_1 + J_2 - N);
\end{aligned} \tag{5.2.2.a}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\phi}_2 &= \cos(\phi_2 - \phi_1) \sqrt{\frac{J_1}{J_2}} [\Omega' - 2L(N - 3J_2 - J_1)] \\
&+ \cos \phi_2 \left(\sqrt{\frac{N - J_1 - J_2}{J_2}} - \sqrt{\frac{J_2}{N - J_1 - J_2}} \right) (\Omega' - 2LJ_1) \\
&- \cos \phi_1 \sqrt{\frac{J_1}{N - J_1 - J_2}} [\Omega' + 2L(2N - 3J_2 - 2J_1)] + 2k(2J_2 + J_1 - N);
\end{aligned} \tag{5.2.2.b}$$

$$\dot{J}_1 = 2 \sin(\phi_1 - \phi_2) \sqrt{J_1 J_2} [\Omega' - 2L(N - J_1 - J_2)] + 2 \sin \phi_1 \sqrt{J_1(N - J_1 - J_2)} (\Omega' - 2LJ_2); \tag{5.2.2.c}$$

$$\dot{J}_2 = 2 \sin(\phi_2 - \phi_1) \sqrt{J_1 J_2} [\Omega' - 2L(N - J_1 - J_2)] + 2 \sin \phi_2 \sqrt{J_2(N - J_1 - J_2)} (\Omega' - 2LJ_1); \tag{5.2.2.d}$$

onde definimos por conveniência os parâmetros auxiliares:

$$k = \frac{\kappa(N-1)}{N} \quad \text{e} \quad L = \frac{\Lambda(N-1)}{N}. \tag{5.2.3}$$

Vemos que as equações de movimento apresentam divergências em $J_1, J_2 = 0$ e $J_1 + J_2 = N$. Logo, a restrição imposta pela conservação do número de partículas passa de $N \geq J_1 + J_2 \geq 0$, com $J_1, J_2 \geq 0$, a $N > J_1 + J_2 > 0$, com $J_1, J_2 > 0$, quando utilizamos as equações de movimento (5.2.2.a)-(5.2.2.d). Ou seja, devido ao mau comportamento destas equações de movimento, não podemos tratar de órbitas do sistema que passem pela “origem” ($J_1 = J_2 = 0$) ou “borda” ($J_1 + J_2 = N$) de uma superfície com ϕ_1 e ϕ_2 constantes no espaço de fase, representando uma limitação fundamental desta escolha de variáveis.

Agora vamos encontrar as equações de movimento para as variáveis complexas w_1 e w_2 que, apesar de parecerem complicadas à primeira vista, podem ser bastante simplificadas pela simetria do sistema.

Precisamos apenas calcular $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_1^*}$, já que a derivada $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_2^*}$ pode ser obtida permutando os índices 1 e 2 em $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_1^*}$, pois a Hamiltoniana é simétrica nestes índices:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_1^*} &= \Omega' N \left[\frac{w_2 + 1}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} - \frac{w_1(w_1^* w_2 + w_2^* + w_1 + w_1^* + w_2 + w_2^*)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} \right] \\
&+ 2\kappa N(N-1) \left[\frac{w_1 |w_1|^2}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} - \frac{w_1(|w_1|^4 + |w_2|^4 + 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^3} \right] \\
&- 2\Lambda N(N-1) \left\{ \frac{w_1(w_2 + w_2^*) + |w_2|^2 + w_2}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} - \frac{2w_1[|w_1|^2(w_2 + w_2^*) + |w_2|^2(w_1 + w_1^*) + w_2^* w_1 + w_1^* w_2]}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^3} \right\}.
\end{aligned} \tag{5.2.4}$$

Colocando as derivadas em (5.2.2.b), obtemos a equação de movimento:

$$\begin{aligned} \dot{w}_1 = & -i \left\{ \Omega'(1-w_1)(w_1+w_2+1) + 2w_1\kappa(N-1) \frac{|w_1|^2-1}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right. \\ & \left. - 2\Lambda(N-1) \frac{[(1-w_1)w_2^*(w_1+w_2+w_1w_2)-(1+w_1)w_2(|w_1|^2-1)]}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right\}. \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

Novamente, a equação para $\dot{w}_2$ pode ser obtida de $\dot{w}_1$ apenas permutando os índices 1 e 2, devido à simetria do Hamiltoniano e das equações de movimento (5.2.2.b) nestes dois índices.

Vemos que as equações de movimento para w_1 e w_2 não apresentam singularidades como nas variáveis de ângulo e ação, sendo válidas em todo espaço de fase complexo $\mathbb{C}^2$.

Pretendemos continuar a análise do sistema concomitantemente nos dois conjuntos de variáveis utilizados até aqui na obtenção das equações de movimento. Então, por simplicidade, escrevemos as equações de transformação direta entre eles, compondo (4.1.37) e (5.1.8):

$$w_j = \sqrt{\frac{J_j}{N - J_1 - J_2}} e^{-i\phi_j}, \quad j = 1, 2; \quad (5.2.6)$$

cujas relações inversas são dadas por:

$$\begin{cases} J_i = \frac{N|w_i|^2}{1+|w_1|^2+|w_2|^2} \\ \phi_i = -\arctan\left(\frac{\text{Im}w_i}{\text{Re}w_i}\right) \end{cases}, \quad i = 1, 2. \quad (5.2.7)$$

Com estas transformações podemos demonstrar nossa inferência da seção anterior que as variáveis I_j , conseqüentemente também as ações J_i devido a (5.1.14), são as médias ocupacionais dos modos locais nos estados coerentes. Empregando as relações (4.2.11) nos operadores de população no k -ésimo modo $\hat{n}_k = a_k^\dagger a_k$, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\langle N; \vec{w} | \hat{n}_k | N; \vec{w} \rangle}{\langle N; \vec{w} | N; \vec{w} \rangle} &= \frac{N w_k^* w_k}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} = J_k = I_k, \quad \text{para } k = 1, 2; \\ \frac{\langle N; \vec{w} | \hat{n}_3 | N; \vec{w} \rangle}{\langle N; \vec{w} | N; \vec{w} \rangle} &= \frac{N}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} = N - J_1 - J_2 = I_3; \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

onde também comparamos o resultado com as transformações (5.1.14'). Portanto, as relações (5.2.6) e (5.2.7) são importantes, pois fornecem diretamente a relação entre o estado coerente parametrizado pelas variáveis complexas w_1 e w_2 e as populações médias em cada poço da armadilha, além da diferença de fase entre as funções de onda localizadas do condensado.

Vemos, por exemplo, que estados coerentes tais que $J_1 + J_2 = N$, cuja média populacional é nula no terceiro poço, representam um ponto no infinito no espaço $\mathbb{C}^2$ dos parâmetros w_1 e w_2 . Estados tais que $J_1 = 0$ ou $J_2 = 0$, em que a população média em um dos dois primeiros poços é nula, possuem coordenadas no espaço complexo $w_1 = 0$ e $w_2 = 0$, respectivamente.

Estados clássicos tais que $J_j = N - J_1 - J_2$, para $j = 1, 2$, representam estados coerentes cuja média populacional no poço j é idêntica à média do terceiro poço, condição expressa no espaço de fase complexo por $|w_j| = 1$. Já populações médias iguais nos dois primeiros poços, ou $J_1 = J_2$, são representadas também pela condição $|w_1| = |w_2|$.

5.3 Pontos Fixos

Nesta seção vamos localizar os pontos de equilíbrio dos sistemas equivalentes de equações diferenciais encontrados para o modelo análogo clássico de poço triplo. Estes pontos são definidos como aqueles onde as equações de movimento do sistema se anulam identicamente.

Começamos estudando o caso mais simples, no qual desconsideramos as colisões cruzadas, fazendo $\Omega' = \Omega$ e $\Lambda = 0$. Desta forma, obtemos as equações de movimento simplificadas:

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_1 = & \Omega \left[\sqrt{\frac{J_2}{J_1}} \cos(\phi_1 - \phi_2) + \left(\sqrt{\frac{N-J_1-J_2}{J_1}} - \sqrt{\frac{J_1}{N-J_1-J_2}} \right) \cos \phi_1 - \sqrt{\frac{J_2}{N-J_1-J_2}} \cos \phi_2 \right] \\ & + 2k(2J_1 + J_2 - N); \end{aligned} \quad (5.2.2.a')$$

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_2 = & \Omega \left[\sqrt{\frac{J_1}{J_2}} \cos(\phi_2 - \phi_1) + \left(\sqrt{\frac{N-J_1-J_2}{J_2}} - \sqrt{\frac{J_2}{N-J_1-J_2}} \right) \cos \phi_2 - \sqrt{\frac{J_1}{N-J_1-J_2}} \cos \phi_1 \right] \\ & + 2k(2J_2 + J_1 - N); \end{aligned} \quad (5.2.2.b')$$

$$\dot{J}_1 = 2\Omega \left[\sqrt{J_1 J_2} \sin(\phi_1 - \phi_2) + \sqrt{J_1(N - J_1 - J_2)} \sin \phi_1 \right]; \quad (5.2.2.c')$$

$$\dot{J}_2 = 2\Omega \left[\sqrt{J_1 J_2} \sin(\phi_2 - \phi_1) + \sqrt{J_2(N - J_1 - J_2)} \sin \phi_2 \right]. \quad (5.2.2.d')$$

Ou, para as variáveis complexas:

$$\begin{aligned} \dot{w}_1 &= -i \left[\Omega(1 - w_1)(w_1 + w_2 + 1) + 2w_1\kappa(N - 1) \frac{|w_1|^2 - 1}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \right]; \\ \dot{w}_2 &= -i \left[\Omega(1 - w_2)(w_1 + w_2 + 1) + 2w_2\kappa(N - 1) \frac{|w_2|^2 - 1}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \right]. \end{aligned} \quad (5.2.5')$$

Primeiramente, investigamos a localização dos pontos fixos destes sistemas de equações diferenciais nas variáveis de ângulo e ação, que têm interpretação física imediata, deste modo podemos procurar os resultados intuitivamente. As equações (5.2.5') têm estrutura mais simples algebricamente e podem ser usadas para fazer os cálculos finais da localização dos pontos fixos, utilizando as simplificações que obtivermos das igualdades (5.2.2.a)-(5.2.2.d).

Esperamos que o tunelamento entre dois poços seja interrompido se as fases coletivas presentes em cada par de condensados acoplados sejam iguais ou opostas, de maneira que a diferença de fase entre os modos locais seja zero, π , ou múltiplos inteiros destes valores. Note que o acoplamento entre poços na Hamiltoniana do sistema é realizado por meio de termos dependentes dos cossenos das diferenças de fase. Conseqüentemente, as equações de dinâmica populacional (5.2.2.c')-(5.2.2.d') são dependentes dos senos das variáveis angulares.

Portanto, vemos que $\dot{J}_1$ e $\dot{J}_2$ se anulam identicamente se os valores iniciais dos ângulos são $\phi_1, \phi_2 = 0, \pi^{5.2}$, possibilitando quatro conjuntos de pontos de equilíbrio:

^{5.2}Restringindo as variáveis angulares ao intervalo $\phi_1, \phi_2 \in (-\pi, \pi]$, sem perda de generalidade.

$$\begin{aligned}
(\text{i}) \quad & \phi_1 = 0, \phi_2 = 0 \text{ e } \phi_1 - \phi_2 = 0; \\
(\text{ii}) \quad & \phi_1 = 0, \phi_2 = \pi \text{ e } \phi_1 - \phi_2 = -\pi; \\
(\text{iii}) \quad & \phi_1 = \pi, \phi_2 = 0 \text{ e } \phi_1 - \phi_2 = \pi; \\
(\text{iv}) \quad & \phi_1 = \pi, \phi_2 = \pi \text{ e } \phi_1 - \phi_2 = 0.
\end{aligned} \tag{5.3.1}$$

Lembrando que as variáveis ϕ_1 e ϕ_2 representam as diferenças de fase entre os condensados locais, notamos que os pontos fixos ocorrem quando as funções de onda coletivas localizadas em pelo menos dois poços distintos estão em fase, que por sua vez devem também estar em fase, como no caso (i), ou em fase oposta, como nos casos (ii), (iii) e (iv), com o condensado restante.

Os casos (ii), (iii) e (iv) são idênticos, pois os três modos locais são equivalentes devido à simetria de rotação em torno do eixo preferencial da armadilha por múltiplos inteiros de $\frac{2\pi}{3}$. Vemos também que o caso (i) é fundamentalmente distinto dos demais.

Aplicando as condições do caso (i), as equações (5.2.2.a') e (5.2.2.b') fornecem pontos fixos se:

$$\begin{cases} \left(\sqrt{\frac{J_2}{J_1}} + \sqrt{\frac{N-J_1-J_2}{J_1}} - \sqrt{\frac{J_1}{N-J_1-J_2}} - \sqrt{\frac{J_2}{N-J_1-J_2}} \right) \Omega + (4J_1 + 2J_2 - 2N)k = 0; \\ \left(\sqrt{\frac{J_1}{J_2}} + \sqrt{\frac{N-J_1-J_2}{J_2}} - \sqrt{\frac{J_2}{N-J_1-J_2}} - \sqrt{\frac{J_1}{N-J_1-J_2}} \right) \Omega + (4J_2 + 2J_1 - 2N)k = 0. \end{cases} \tag{5.3.2}$$

Devido novamente à simetria do sistema relacionada à equivalência dos poços, visto que os condensados estão acoplados dois a dois de maneira idêntica, temos que a diferença de fase entre dois poços não deve se alterar se estes poços possuem a mesma população, de forma que esperamos que os pontos fixos ocorram para valores tais que $J_1 = J_2$, $J_1 = N - J_1 - J_2$ ou $J_2 = N - J_1 - J_2$ quando todos os poços estão em fase.

Se $J_1 = N - J_1 - J_2$, obtemos que a primeira equação de (5.3.2) é identicamente nula, enquanto a segunda igualdade assume a forma^{5.3}:

$$(2J_2 - J_2 - \sqrt{J_1 J_2}) + 2\beta\sqrt{J_1 J_2}(J_2 - J_1) = 0, \text{ com } J_2 = N - 2J_1. \tag{5.3.3}$$

Logo, temos uma única equação para a variável J_1 . Por conveniência, definimos temporariamente o parâmetro $\beta = \frac{k}{\Omega}$, onde assumimos que $\Omega \neq 0$, pois caso contrário a interação entre os poços é nula e a dinâmica populacional inexistente.

Se $J_2 = N - J_1 - J_2$, a segunda equação (5.3.2) é identicamente nula, enquanto a primeira fornece equação idêntica a (5.3.3), mas permutando os índices 1 e 2. Já se $J_1 = J_2$ as duas equações de (5.3.2) ficam idênticas e também equivalentes a (5.3.3).

Resumindo, temos pontos fixos sempre que dois poços têm populações idênticas e a condição sobre a ocupação média em um destes é dada pela equação:

$$(\sqrt{y(N-2y)} + N - 4y) + 2\beta\sqrt{y(N-2y)}(3y - N) = 0; \tag{5.3.4}$$

^{5.3}Também lembrando que sempre devemos ter $J_1 \neq 0$, $J_2 \neq 0$ e $N - J_1 - J_2 \neq 0$, de acordo com a natureza das equações de movimento nestas variáveis.

onde y é J_1 , J_2 ou $N - J_1 - J_2$, dependendo de quais dois poços possuem populações iguais. Então, deve ficar claro que para cada raiz de (5.3.4) podemos ter até três pontos fixos, representando cada um dos casos $J_1 = J_2$, $J_1 = N - J_1 - J_2$ e $J_2 = N - J_1 - J_2$.

Por inspeção vemos que $y = \frac{N}{3}$ é solução de (5.3.4) e representa o ponto de equilíbrio onde os três poços estão em fase com o mesmo número médio de bósons. Observe que $y = \frac{N}{3}$ é um ponto comum aos três casos $J_1 = J_2$, $J_1 = N - J_1 - J_2$ e $J_2 = N - J_1 - J_2$.

Antes de prosseguirmos na busca por raízes de (5.3.4), vamos encontrar as equações semelhantes para os casos (ii), (iii) e (vi) de (5.3.1). Para o caso (ii), as equações (5.2.2.a') e (5.2.2.b') fornecem pontos fixos se:

$$\begin{cases} \left(-\sqrt{\frac{J_2}{J_1}} + \sqrt{\frac{N-J_1-J_2}{J_1}} - \sqrt{\frac{J_1}{N-J_1-J_2}} + \sqrt{\frac{J_2}{N-J_1-J_2}} \right) + 2\beta(2J_1 + J_2 - N) = 0; \\ \left(-\sqrt{\frac{J_1}{J_2}} - \sqrt{\frac{N-J_1-J_2}{J_2}} + \sqrt{\frac{J_2}{N-J_1-J_2}} - \sqrt{\frac{J_1}{N-J_1-J_2}} \right) + 2\beta(2J_2 + J_1 - N) = 0. \end{cases} \quad (5.3.5)$$

No caso (ii), os condensados no primeiro e terceiro poços estão em fase^{5.4}, de maneira que esperamos a existência de pontos de equilíbrio somente se $J_1 = N - J_1 - J_2$. Considerando esta restrição, obtemos que a primeira equação de (5.3.5) é identicamente nula, enquanto a segunda fornece:

$$(2J_1 + J_2 - \sqrt{J_1 J_2}) + 2\beta\sqrt{J_1 J_2}(J_2 - J_1), \text{ com } J_2 = N - 2J_1. \quad (5.3.6)$$

Novamente encontramos uma única equação para a variável J_1 . Se tentarmos igualar as populações de dois poços de fases opostas em (5.3.5), fazendo $J_1 = J_2$ ou $J_2 = N - J_1 - J_2$, chegamos em duas equações que não podem ser satisfeitas simultaneamente para $J_1 \neq 0$ e $J_1 + J_2 \neq 0$, que são as restrições impostas por nossas equações de movimento.

Para o caso (iii), os poços de população média J_2 e $N - J_1 - J_2$ estão em fase. Igualando as populações nestes poços, obtemos uma equação idêntica a (5.3.6), mas permutando os índices 1 e 2. Se igualarmos as ocupações de outro par de modos locais, chegamos novamente a equações que não podem ser satisfeitas, agora considerando as restrições $J_2 \neq 0$ e $J_1 + J_2 \neq N$.

Por fim, no caso (iv), os poços de população J_1 e J_2 estão em fase. Fazendo $J_1 = J_2$ em (5.2.2.a') e (5.2.2.b'), chegamos em duas equações idênticas equivalentes a (5.3.6). Se tentarmos igualar outras ocupações médias, para esta escolha de fases, chegamos a um sistema de equações que não pode ser satisfeito para $J_1 \neq 0$ e $J_2 \neq 0$.

Enfim, sempre que as funções de onda coletivas de dois modos locais estão em fase entre si e em fase oposta à função localizada no poço restante, temos pontos de equilíbrio para populações idênticas nos condensados em fase. A condição sobre a ocupação média y em um dos dois modos locais em fase é dada pela seguinte equação:

$$(\sqrt{y(N-2y)} - N + 4y) + 2\beta\sqrt{y(N-2y)}(3y - N) = 0. \quad (5.3.7)$$

Note que esta equação representa simultaneamente as restrições sobre as fases dos casos (ii), (iii) e (iv). Portanto, cada uma de suas raízes deve fornecer três pontos fixos equivalentes pela simetria de rotação do potencial de aprisionamento. Observe também que $y = \frac{N}{3}$ não é solução em (5.3.7), indicando a inexistência de pontos de equilíbrio com ocupações médias iguais nos três modos quando um par de condensados locais está em fase oposta.

^{5.4}Devemos sempre ter em mente que a ordem entre os três modos locais é arbitrária, de acordo com a simetria de rotação do potencial de aprisionamento.

Podemos reunir os resultados (5.3.4) e (5.3.7) em uma única equação, escrevendo:

$$\sqrt{y(N-2y)}[1 + 2\beta(3y - N)] = \pm(4y - N); \quad (5.3.8)$$

onde o sinal superior refere-se a (5.3.4), ao passo que (5.3.7) é denotada pelo sinal inferior. Elevando esta equação ao quadrado, obtemos um polinômio em y de quarto grau, cujas raízes são soluções de (5.3.4) ou (5.3.7), lembrando que somente raízes reais com $N > y > 0$ são válidas:

$$-72\beta^2 y^4 + (84\beta^2 N - 24\beta)y^3 + (-32\beta^2 N^2 + 20\beta N - 18)y^2 + (9N + 4\beta^2 N^3 - 4\beta N^2)y - N^2 = 0. \quad (5.3.9)$$

Eliminando a solução $y = \frac{N}{3}$ presente em (5.3.4), dividindo (5.3.9) pelo monômio $3(\frac{N}{3} - y)$, obtemos uma equação cúbica em y com soluções para os casos de (5.3.1):

$$24\beta^2 y^3 + (8\beta - 20\beta^2 N)y^2 + (4\beta^2 N^2 - 4\beta N + 6)y - N = 0. \quad (5.3.10)$$

Agora que conhecemos o caminho para encontrar muitos dos pontos fixos do sistema, seguindo a interpretação física das variáveis ϕ_i e J_i , vamos aplicá-lo às variáveis complexas w_1 e w_2 , que nos permitem algumas facilidades algébricas. Não estamos jogando fora todo trabalho feito até aqui nas coordenadas de ângulo e ação, pois vamos aproveitar toda linguagem desenvolvida intuitivamente nestas variáveis.

5.3.1 Localização dos Pontos de Equilíbrio Reais

A grande vantagem das variáveis complexas w_i é que os quatro casos de (5.3.1) se resumem ao plano dado pelas condições $\text{Im}(w_1) = 0$ e $\text{Im}(w_2) = 0$, como podemos ver nas transformações (5.2.6). Ou seja, restringindo as fases de w_1 e w_2 a 0 e π , que equivale a restringi-los aos reais, temos que cada quadrante do plano $w_1(\phi_1 = 0, \pi) \times w_2(\phi_2 = 0, \pi) = \mathbb{R}^2$, excluindo as coordenadas sobre os eixos coordenados, representa um dos casos de supressão de tunelamento estudados, como mostrado na figura 5.3.1. Outra vantagem destas variáveis é que podemos considerar os casos $J_1 = 0$ e $J_2 = 0$, que representam respectivamente as retas $w_1(\phi_1 = 0, \pi) = 0$ e $w_2(\phi_2 = 0, \pi) = 0$. Apenas os pontos de equilíbrio com $J_1 + J_2 = N$ ainda apresentam dificuldades, pois representam pontos no infinito, $w_i \rightarrow \infty$. Entretanto, utilizando a simetria entre os três poços, sabemos que os pontos fixos com a condição de terceiro modo local vazio possuem equivalentes para os dois primeiros poços, mas em regiões acessíveis do plano.

Para simplificar a notação, nesta subseção vamos restringir w_1 e w_2 aos reais, exceto quando especificado o contrário. Impondo esta restrição e fazendo $\dot{w}_1 = \dot{w}_2 = 0$ em (5.2.5'), obtemos as equações que fornecem os **pontos fixos reais** nestas variáveis, desconsiderando os efeitos das colisões cruzadas:

$$\begin{cases} (w_1 - 1)(w_1 + w_2 + 1)(w_1^2 + w_2^2 + 1) = 2\chi w_1(w_1^2 - 1); \\ (w_2 - 1)(w_1 + w_2 + 1)(w_1^2 + w_2^2 + 1) = 2\chi w_2(w_2^2 - 1). \end{cases} \quad (5.3.11)$$

Aqui definimos o **parâmetro reduzido de autocolisão**:

$$\chi \equiv \kappa \frac{(N-1)}{\Omega}. \quad (5.3.12)$$

As equações (5.3.11) fornecem três pontos fixos imediatos:

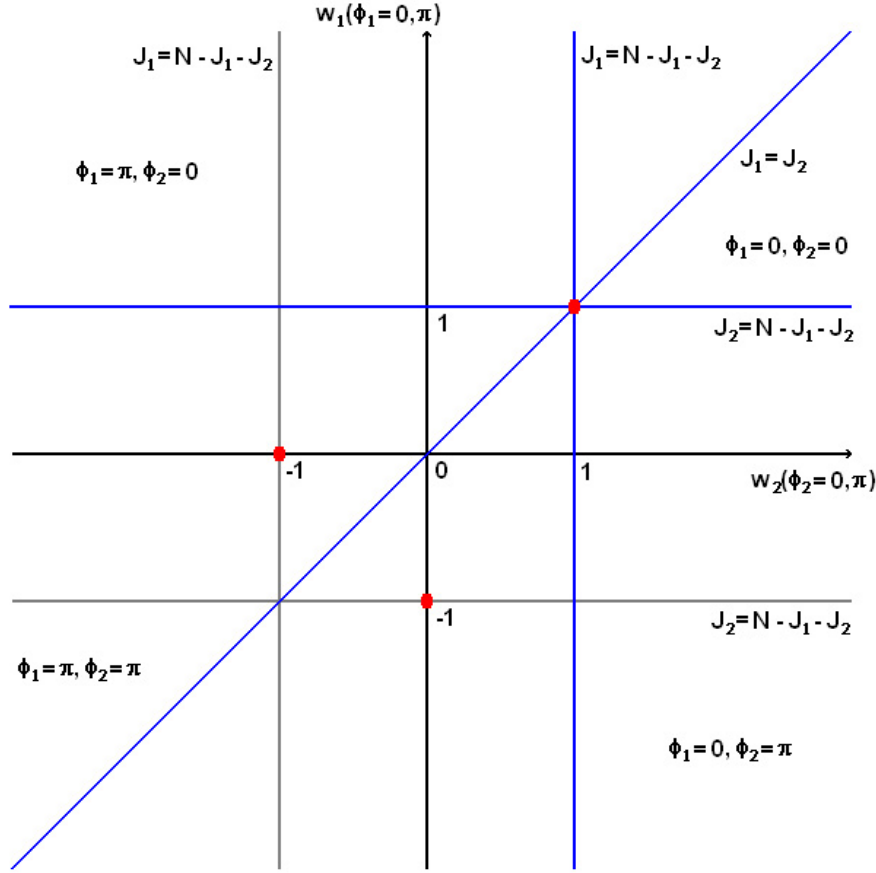


Figura 5.3.1: Acima indicamos os quadrantes no plano $\text{Im}(w_1) = \text{Im}(w_2) = 0$ correspondentes a cada caso de (5.3.1). Em azul temos as retas onde estão localizados os pontos de equilíbrio referentes às soluções das equações quárticas (5.3.14) e (5.3.16). Em vermelho mostramos os pontos fixos independentes de parâmetros, determinados em (5.3.13.a)-(5.3.13.c).

$$w_1 = w_2 = 1 \rightarrow J_1 = J_2 = \frac{N}{3}; \quad (5.3.13.a)$$

$$w_1 = 0, w_2 = -1 \rightarrow J_1 = 0, J_2 = \frac{N}{2}; \quad (5.3.13.b)$$

$$w_1 = -1, w_2 = 0 \rightarrow J_1 = \frac{N}{2}, J_2 = 0. \quad (5.3.13.c)$$

O ponto (5.3.13.a) já foi encontrado nas variáveis de ângulo e ação. No entanto, os pontos fixos determinados em (5.3.13.b) e (5.3.13.c) não poderiam ser obtidos anteriormente, pois devíamos respeitar as restrições $J_1 \neq 0$ e $J_2 \neq 0$. Também podemos afirmar a existência de um terceiro ponto fixo equivalente a estes dois últimos, de acordo com a simetria de rotação entre os três poços. Contudo, vemos que a condição sobre a ocupação média do terceiro modo local neste ponto de equilíbrio simé-

trico seria dada por $N - J_1 - J_2 = 0$, de forma que este ponto “oculto” se encontra em $w_1, w_2 \rightarrow \infty$ e conseqüentemente não podemos encontrá-lo usando este conjunto de variáveis.

Por analogia ao trabalho nas variáveis ϕ_i e J_i ($i = 1, 2$), vamos procurar mais pontos fixos sobre as retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$, que representam respectivamente os casos $J_1 = J_2$, $J_1 = N - J_1 - J_2$ e $J_2 = N - J_1 - J_2$. As retas $w_1 = -1$ e $w_2 = -1$ também representam as condições $J_1 = N - J_1 - J_2$ e $J_2 = N - J_1 - J_2$, colocadas nesta ordem, mas não possuem pontos de equilíbrio, pois sobre elas temos condensados em fase oposta com população idêntica, caso já analisado anteriormente.

Também é fácil ver de (5.3.11) que não existem mais pontos fixos, além de (5.3.13.b) e (5.3.13.c), sobre as retas $w_1 = 0$ ou $w_2 = 0$. Observamos também que nenhum ponto de equilíbrio pode ser encontrado na reta $w_1 = -w_2$, pois ela representa a situação na qual $J_1 = J_2$ e as fases coletivas entre os dois primeiros modos locais são opostas. Enfim, dividindo uma equação por outra em (5.3.11) e exigindo que $w_1, w_2 \neq -1, 0, 1$, obtemos que este sistema só possui outras soluções reais, nestas condições, se $w_1 = w_2$.

Portanto, pelo que foi dito nos últimos parágrafos, os pontos fixos restantes no plano $w_1 \times w_2$ devem estar sobre as retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ ou $w_2 = 1$, que representam as condições com pelo menos dois modos locais em fase e com ocupações médias idênticas. Note também que a interseção destas três retas é o ponto (5.3.13.a).

Fazendo $w_1 = w_2$, temos que as duas equações de (5.3.11) ficam idênticas:

$$4w_1^4 - 2(1 + \chi)w_1^3 + (2\chi - 1)w_1 - 1 = 0. \quad (5.3.14)$$

Agora, dividimos esta equação pelo monômio $4(w_1 - 1)$, no intuito de retirar a raiz conhecida de (5.3.13.a):

$$w_1^3 + \frac{1 - \chi}{2}w_1^2 + \frac{1 - \chi}{2}w_1 + \frac{1}{4} = 0. \quad (5.3.15)$$

As raízes reais deste polinômio cúbico são os pontos de equilíbrio sobre a reta $w_1 = w_2$ na restrição real, excetuando $w_1 = w_2 = 1$. Porém, devemos lembrar da possibilidade que, para algum valor de χ , $w_1 = 1$ possa ser novamente raiz de (5.3.15).

Então, fazendo $w_2 = 1$ em (5.3.11), temos que a segunda equação é identicamente nula, enquanto a primeira torna-se:

$$w_1^4 + (1 - 2\chi)w_1^3 + 2(1 + \chi)w_1 - 4 = 0. \quad (5.3.16)$$

Dividindo esta equação por $(w_1 - 1)$, para excluir a raiz já conhecida (5.3.13.a), obtemos:

$$w_1^3 + 2(1 - \chi)w_1^2 + 2(1 - \chi)w_1 + 4 = 0. \quad (5.3.17)$$

A equação acima fornece os pontos de equilíbrio sobre a reta $w_2 = 1$, excetuando uma vez o ponto (5.3.13.a). Há uma equação idêntica para pontos fixos na reta $w_1 = 1$, que encontramos ao trocar w_1 por w_2 em (5.3.17), devido à equivalência entre os poços.

Agora precisamos apenas resolver as equações cúbicas (5.3.15) e (5.3.17) para encontrar os pontos de equilíbrio, lembrando que apenas as raízes reais destas equações devem ser usadas. Da equação (5.3.15), obtemos o discriminante:

$$\Delta_1 = \frac{1}{1728}(-\chi^4 - 6\chi^3 + 6\chi^2 + 10\chi + 18). \quad (5.3.18)$$

Para $\Delta_1 > 0$ a equação (5.3.15) possui apenas uma raiz real em w_1 , $\Delta_1 = 0$ indica duas raízes reais, enquanto $\Delta_1 < 0$ significa a presença de três raízes reais. Já a equação $\Delta_1 = 0$ possui somente duas raízes reais em χ , dadas por:

$$\chi_+ = \frac{1}{2} \left(-3 - \sqrt{13 - 3(6)^{\frac{2}{3}}} + \sqrt{26 + 3(6)^{\frac{2}{3}} + \frac{70}{\sqrt{13 - 3(6)^{\frac{2}{3}}}}} \right) \cong 1,9708; \quad (5.3.19.a)$$

$$\chi_- = \frac{1}{2} \left(-3 - \sqrt{13 - 3(6)^{\frac{2}{3}}} - \sqrt{26 + 3(6)^{\frac{2}{3}} + \frac{70}{\sqrt{13 - 3(6)^{\frac{2}{3}}}}} \right) \cong -6,7298. \quad (5.3.19.b)$$

Não é difícil verificar que $\Delta_1 > 0$ quando $\chi_- < \chi < \chi_+$ e $\Delta_1 < 0$ no caso contrário. As fórmulas analíticas para as raízes de (5.3.15) não são muito iluminadoras, por este motivo exibimos de forma gráfica as soluções na figura 5.3.2.

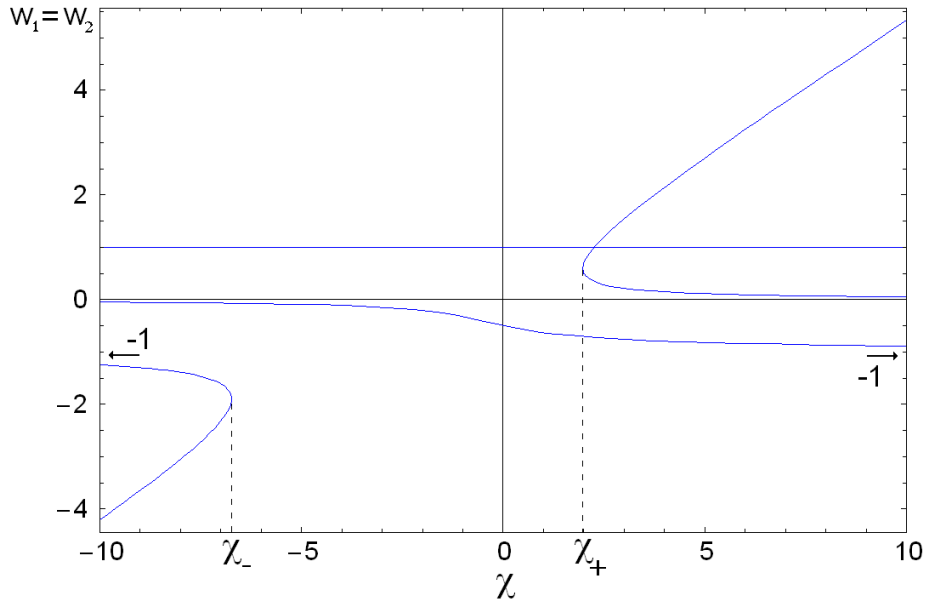


Figura 5.3.2: Pontos de equilíbrio sobre a reta $w_1 = w_2$, determinados na equação (5.3.14), em função do parâmetro χ . Note as bifurcações em χ_+ e χ_- .

Vemos na figura 5.3.2 a presença de duas bifurcações dinâmicas que acontecem para sistemas distintos. Lembrando da definição do parâmetro reduzido (5.3.12) e que geralmente $\Omega < 0$, de acordo com (3.1.16), temos que para $\chi > 0$ o sistema apresenta interações atrativas ($\kappa < 0$) e a bifurcação ocorre em χ_+ , enquanto para $\chi < 0$ as colisões bosônicas são repulsivas ($\kappa > 0$) e a bifurcação aparece em χ_- . Logo, em um mesmo sistema físico não podemos observar as duas bifurcações, pois o sinal do parâmetro κ é idêntico ao do comprimento de espalhamento a e portanto uma característica intrínseca da espécie bosônica condensada. Ou seja, não podemos mudar o sinal de χ apenas mudando os parâmetros do potencial de aprisionamento.

Na tabela 5.3.1 classificamos cada um dos pontos apresentados na figura 5.3.2, utilizando como base seu comportamento assintótico quando $\chi \rightarrow \pm\infty$. É útil na interpretação desta tabela lembrar que a origem do plano definido por w_1 e w_2 restritos aos reais representa a situação em que o terceiro modo local tem em média N partículas. O oposto acontece para $w_1 = w_2 \rightarrow \pm\infty$, quando o terceiro poço fica vazio.

Tabela 5.3.1: Classificação dos pontos fixos sobre a reta $w_1 = w_2$ de acordo com o comportamento assintótico em $|\chi| \rightarrow \infty$.

Classe	Localização assintótica	Interpretação populacional do ponto fixo
1^+	$w_1 = w_2 = 1$, existe para todo $\chi \geq 0$	Os três modos locais têm ocupações médias idênticas e estão todos em fase.
2^+	$w_1 = w_2 \rightarrow -1$ quando $\chi \rightarrow \infty$. Existe para todo $\chi \geq 0$.	Os dois primeiros modos locais têm ocupações médias idênticas e estão em fase entre si, mas em fase oposta ao terceiro. Temos que $J_1 = J_2 = \frac{N}{3}$ quando $\chi \rightarrow \infty$.
3^+	$w_1 = w_2 \rightarrow \infty$ quando $\chi \rightarrow \infty$. Presente para $\chi \geq \chi_+$.	Os dois primeiros modos locais têm ocupações médias idênticas e todos os três modos estão em fase. Temos que $J_1 = J_2 = \frac{N}{2}$ quando $\chi \rightarrow \infty$.
4^+	$w_1 = w_2 \rightarrow 0$ quando $\chi \rightarrow \infty$. Presente para $\chi \geq \chi_+$.	Os dois primeiros modos locais têm ocupações médias idênticas e todos os três modos estão em fase. Temos que $J_1 = J_2 = 0$ quando $\chi \rightarrow \infty$.
1^-	$w_1 = w_2 = 1$, existe para todo $\chi < 0$.	Os três modos locais têm ocupações médias idênticas e estão em fase.
2^-	$w_1 = w_2 \rightarrow 0$ quando $\chi \rightarrow -\infty$. Existe para todo $\chi < 0$.	Os dois primeiros modos locais têm ocupações médias idênticas e estão em fase entre si, mas em fase oposta ao terceiro. Temos que $J_1 = J_2 = 0$ quando $\chi \rightarrow -\infty$.
3^-	$w_1 = w_2 \rightarrow -1$ quando $\chi \rightarrow -\infty$. Presente para $\chi \leq \chi_-$.	Os dois primeiros modos locais têm ocupações médias idênticas e estão em fase entre si, mas em fase oposta ao terceiro. Temos que $J_1 = J_2 = \frac{N}{3}$ quando $\chi \rightarrow -\infty$.
4^-	$w_1 = w_2 \rightarrow -\infty$ quando $\chi \rightarrow -\infty$. Presente para $\chi \leq \chi_-$.	Os dois primeiros modos locais têm ocupações médias idênticas e estão em fase entre si, mas em fase oposta ao terceiro. Temos que $J_1 = J_2 = \frac{N}{2}$ quando $\chi \rightarrow -\infty$.

Os pontos denominados 3^+ e 4^+ (3^- e 4^-) são aqueles que surgem da bifurcação para $\chi > 0$ ($\chi < 0$). Já o ponto $1^\pm$ representa a situação em que as funções de onda coletivas localizadas nos três poços têm média populacional $\frac{N}{3}$ e todas estão em fase, para todo valor de χ .

O ponto fixo indicado por 2^+ no espalhamento atrativo possui extensão contínua para $\chi < 0$, que denominamos 2^- . No entanto, estas duas classes de pontos de equilíbrio apresentam comportamento assintótico distinto quando $|\chi| \rightarrow \infty$, revelando a diferente natureza física dos dois domínios de parâmetros.

Calculando as raízes reais da equação (5.3.17), esperamos obter outros três pontos de equilíbrio do modelo sobre a reta $w_2 = 1$, com interpretação física equivalente aos pontos $2^\pm$, $3^\pm$ e $4^\pm$, dependendo

da escolha do sinal de χ . Notando que a condição $w_2 = 1$ equivale a $J_2 = N - J_1 - J_2$, concluímos que devemos encontrar em (5.3.17) os mesmos pontos fixos da equação (5.3.15), apenas invertendo os papéis entre o primeiro e terceiro modos locais. Para comprovarmos esta afirmação, calculamos o discriminante de (5.3.17):

$$\Delta_2 = \frac{4}{27}(-\chi^4 - 6\chi^3 + 6\chi^2 + 10\chi + 18). \quad (5.3.20)$$

A menos de um fator constante positivo, vemos que o discriminante Δ_2 é idêntico a Δ_1 . Logo, ambos possuem o mesmo comportamento de sinal e as mesmas raízes χ_+ e χ_- .

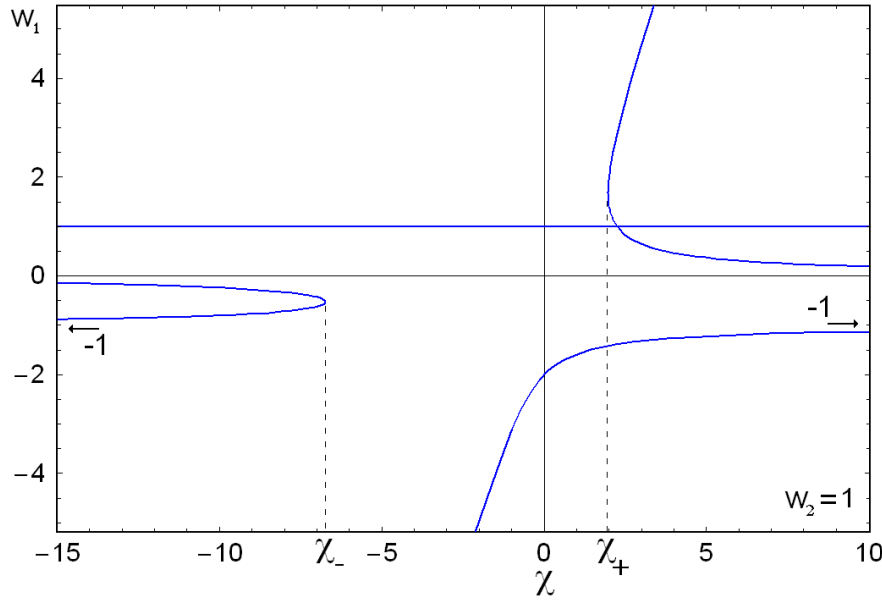


Figura 5.3.3: Localização dos pontos de equilíbrio sobre a reta $w_2 = 1$ em função do parâmetro χ . Novamente vemos as bifurcações em χ_+ e χ_- .

Se calcularmos as raízes de (5.3.17), em função do parâmetro χ , obtemos os pontos fixos mostrados na figura 5.3.3. É fácil notar que os pontos de equilíbrio exibidos têm significado idêntico aos da tabela 5.3.1, quando invertemos os papéis representados pelos condensados localizados no primeiro e terceiro poços.

Segundo as transformações (5.2.6) e (5.2.7), vemos que as condições $w_1 \rightarrow \pm\infty$ e $w_2 = 1$ correspondem a $N - J_1 - J_2 = J_2 \rightarrow 0$, o limite onde o segundo e o terceiro modos ficam vazios, ao passo que $J_1 \rightarrow N$. Analogamente, podemos observar que $w_1 \rightarrow 0$ equivale a $J_1 \rightarrow 0$ e $N - J_1 - J_2 = J_2 \rightarrow \frac{N}{2}$. Note também que $w_1 > 0$ ($w_1 < 0$) representa a circunstância na qual o condensado no primeiro poço está em fase (fase oposta) aos outros dois modos locais, que já encontram-se em fase devido à restrição $w_2 = 1$. Com todas estas considerações chegamos aos resultados da tabela 5.3.2, onde comparamos os dados da tabela 5.3.1 aos cálculos exibidos na figura 5.3.3.

Há ainda um terceiro conjunto de pontos de equilíbrio, que são raízes da equação (5.3.17), mas trocando w_1 por w_2 . Entretanto, estes são exatamente idênticos aos mostrados na figura 5.3.3 ou na tabela 5.3.2, exceto por uma permutação dos índices 1 e 2.

Podemos dividir naturalmente a maioria dos pontos fixos reais em três conjuntos equivalentes, situados sobre suas respectivas retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$. Estes três conjuntos possuem o ponto

Tabela 5.3.2: Comparação dos pontos fixos sobre $w_2 = 1$, mostrados na figura 5.3.3, aos seus equivalentes na tabela 5.3.1.

Descrição do ponto sobre $w_2 = 1$	Comparação com os pontos da tabela 5.3.1
$w_1 = w_2 = 1$, existe para $\chi \geq 0$.	Idêntico a 1^+ .
$w_1 \rightarrow -1$ quando $\chi \rightarrow \infty$. $w_1 < 0$ para todo $\chi \geq 0$	Equivalente a 2^+ , mas com primeiro modo local em fase oposta aos outros. No limite $\chi \rightarrow \infty$ temos $J_1 = J_2 = \frac{N}{3}$.
$w_1 \rightarrow \infty$ quando $\chi \rightarrow \infty$. $w_1 > 0$ para $\chi \geq \chi_+$.	Equivalente a 4^+ . Porém, desta vez temos $J_1 \rightarrow N$ e $N - J_1 - J_2 = J_2 \rightarrow 0$ no limite $\chi \rightarrow \infty$.
$w_1 \rightarrow 0$ quando $\chi \rightarrow \infty$. $w_1 > 0$ para $\chi \geq \chi_+$.	Equivalente a 3^+ . Porém, desta vez temos $J_1 \rightarrow 0$ e $N - J_1 - J_2 = J_2 \rightarrow \frac{N}{2}$ no limite $\chi \rightarrow \infty$.
$w_1 = w_2 = 1$, existe para $\chi < 0$.	Idêntico a 1^- .
$w_1 \rightarrow -\infty$ quando $\chi \rightarrow -\infty$. $w_1 < 0$ para todo $\chi < 0$.	Equivalente a 2^- , mas com primeiro modo local em fase oposta aos outros. Temos que $J_1 \rightarrow N$ no limite $\chi \rightarrow -\infty$.
$w_1 \rightarrow 0$ quando $\chi \rightarrow -\infty$. $w_1 < 0$ para $\chi \leq \chi_-$.	Equivalente a 4^- , mas com primeiro modo local em fase oposta aos outros. Temos que $J_1 \rightarrow 0$ no limite $\chi \rightarrow -\infty$.
$w_1 \rightarrow -1$ quando $\chi \rightarrow -\infty$. $w_1 < 0$ para $\chi \leq \chi_-$.	Equivalente a 3^- , mas com primeiro modo em fase oposta aos outros. Temos que $J_1 = J_2 \rightarrow \frac{N}{3}$ no limite $\chi \rightarrow -\infty$.

de equilíbrio $w_1 = w_2 = 1$ em comum, pois ele se localiza na interseção das três retas. Além deste ponto fixo de alta simetria, cada conjunto possui mais um ponto fixo se $\chi_- < \chi < \chi_+$ ou mais três se $\chi > \chi_+$ ou $\chi < \chi_-$.

Devemos lembrar também da existência de mais dois pontos de equilíbrio reais em $(w_1, w_2) = (-1, 0)$ e $(w_1, w_2) = (0, -1)$, que denominamos **estados de poço vazio**, pois representam configurações do condensado com ocupação média nula em um dos poços.

5.3.2 Pontos de Equilíbrio Reais na Presença de Colisões Cruzadas

Agora que conhecemos bem a localização dos pontos de equilíbrio em função do parâmetro χ , que basicamente representa a energia de autocolisão por partícula em unidades da frequência de tunelamento Ω , passamos a procurar pelas correções existentes devido à modificação da taxa de tunelamento efetiva, causada pela presença das colisões cruzadas. De acordo com a condição $|\kappa| \gg |\Lambda|$, não esperamos que o terceiro termo da Hamiltoniana (5.1.7) seja responsável pelo surgimento de novos pontos fixos ou novos regimes dinâmicos no sistema. Contudo, podemos supor que a presença de $\Lambda(N-1)$, dentro de Ω' , provoque deslocamentos consideráveis nos parâmetros críticos do sistema, quando comparados aos valores obtidos considerando somente a autocolisão.

De maneira análoga à definição do parâmetro reduzido χ , definimos agora o **parâmetro reduzido de colisão cruzada**:

$$\mu \equiv \frac{\Lambda(N-1)}{\Omega} = \frac{\kappa \varepsilon^{\frac{3}{2}}(N-1)}{\Omega} = \varepsilon^{\frac{3}{2}} \chi; \quad (5.3.21)$$

onde usamos o resultado (3.1.22.c') para relacionar κ e Λ por meio do parâmetro perturbativo $\varepsilon \ll 1$. Observamos em (5.3.21) que devemos analisar o comportamento do sistema apenas sob a restrição $|\mu| \ll |\chi|$, respeitando as hipóteses do modelo.

Igualando $\dot{w}_1$ a zero em (5.2.5) e fazendo o mesmo para $\dot{w}_2$ em equação análoga, obtemos o seguinte sistema de equações, também restringindo w_1 e w_2 aos reais, devido às condições de fase sobre funções

de onda coletivas para a localização dos pontos fixos conhecidos:

$$\begin{cases} (w_1 - 1)(w_1 + w_2 + 1)(w_1^2 + w_2^2 + 1) = 2\chi w_1(w_1^2 - 1) - 2\mu(w_1^4 - w_2^3 + 3w_1w_2 - 3w_1^2w_2 + w_1w_2^3 - 1); \\ (w_2 - 1)(w_1 + w_2 + 1)(w_1^2 + w_2^2 + 1) = 2\chi w_2(w_2^2 - 1) - 2\mu(w_2^4 - w_1^3 + 3w_1w_2 - 3w_2^2w_1 + w_2w_1^3 - 1). \end{cases} \quad (5.3.22)$$

Claramente os pontos dados em (5.3.13.a)-(5.3.13.c) ainda são pontos fixos simples do sistema, independentes de χ e μ .

Agora vamos procurar equações semelhantes a (5.3.15) e (5.3.17), supondo a localização de pontos de equilíbrio sob as condições $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$. Colocando $w_1 = w_2$ em (5.3.22), temos que as duas igualdades se tornam idênticas, novamente exibindo acordo com a equivalência dos três poços. Então, obtemos uma única equação real para apenas uma variável:

$$4(1 + \mu)w_1^4 - 2(1 + \chi + 4\mu)w_1^3 + 6\mu w_1^2 + (2\chi - 1)w_1 - (1 + 2\mu) = 0. \quad (5.3.23)$$

Excluindo a raiz já conhecida $w_1 = 1$, dividindo o polinômio por $4(1 + \mu)(w_1 - 1)$, obtemos uma equação cúbica para os pontos fixos dependentes de χ e μ . Não precisamos nos importar com a possível divergência em $\mu = -1$, pois trabalharemos com $|\chi|$ da ordem das unidades, de maneira que $|\mu|$ não deve ultrapassar valores da ordem de décimos, devido à restrição $|\chi| \gg |\mu|$. Também devemos lembrar que apesar de utilizarmos χ e μ como parâmetros independentes, sabemos que eles estão relacionados em (5.3.21) por $\varepsilon^{\frac{3}{2}} > 0$. Logo, a liberdade em $|\mu|$ é uma consequência da possível variação de ε causada pelo ajuste dos parâmetros do potencial de aprisionamento. Contudo, os sinais de μ e χ devem ser iguais, ambos negativos (positivos) para interações repulsivas (atrativas) entre os bósons condensados. Então, a equação cúbica obtida é:

$$w_1^3 + \frac{(1 - \chi - 2\mu)}{2(1 + \mu)}w_1^2 + \frac{(1 - \chi + \mu)}{2(1 + \mu)}w_1 + \frac{(1 + 2\mu)}{4(1 + \mu)} = 0. \quad (5.3.24)$$

A segunda condição para pontos de equilíbrio é encontrada fazendo $w_2 = 1$ em (5.3.22), deste modo temos que a segunda equação deste sistema se anula identicamente, enquanto a primeira fornece:

$$(1 + 2\mu)w_1^4 + (1 - 2\chi)w_1^3 - 6\mu w_1^2 + 2(1 + \chi + 4\mu)w_1 - 4(1 + \mu) = 0. \quad (5.3.25)$$

Novamente, no intuito de excluir a raiz $w_1 = 1$ já conhecida, dividimos a igualdade por $(1 + 2\mu)(w_1 - 1)$. Também não nos preocupamos com a possível divergência em $\mu = -\frac{1}{2}$, devido à imposição $|\mu| \ll |\chi|$. A cúbica resultante de (5.3.25) é:

$$w_1^3 + \frac{2(1 - \chi + \mu)}{(1 + 2\mu)}w_1^2 + \frac{2(1 - \chi - 2\mu)}{(1 + 2\mu)}w_1 + \frac{4(1 + \mu)}{(1 + 2\mu)} = 0. \quad (5.3.26)$$

Lembramos que os pontos fixos sobre a reta $w_1 = 1$ também são dados pela equação acima, mas trocando w_1 por w_2 .

Com o propósito de obter os valores dos parâmetros de transição $\chi_{\pm}$ em termos da taxa de colisão cruzada, calculamos os discriminantes dos polinômios de (5.3.24) e (5.3.26) em função das taxas χ e μ . Os novos discriminantes para (5.3.24) e (5.3.26) são respectivamente Δ'_1 e Δ'_2 :

$$\begin{aligned}
\Delta'_1 &= -\frac{1}{1728(1+\mu)^4} [\chi^4 + 2(3+7\mu)\chi^3 + (-6+33\mu^2)\chi^2 + 2(-5-12\mu+18\mu^2+52\mu^3)\chi \\
&\quad - 2(9+76\mu+228\mu^2+264\mu^3+76\mu^4)] \\
&= \frac{27(1+2\mu)^4}{4} \frac{1}{1728(1+\mu)^4} \Delta'_2.
\end{aligned} \tag{5.3.27}$$

Como esperado, $\Delta'_1 = 0$ e $\Delta'_2 = 0$ possuem as mesmas raízes em χ , tomando μ ainda como um parâmetro; ou seja, desta vez as raízes reais $\chi_{\pm}(\mu)$ dependem da taxa de colisão cruzada. No entanto, devemos lembrar que o sinal de μ não é independente, devendo ser o mesmo de χ . Desta forma, daqui em diante tratamos os sistemas com $\chi > 0$ e $\chi < 0$ separadamente, pois suas correções devem ser dadas por $\mu > 0$ e $\mu < 0$, respectivamente. Portanto, conceitualmente devemos dividir os gráficos dados nas figuras 5.3.2 e 5.3.3 em $\chi = 0$, devido às diferentes correções presentes nos dois domínios de parâmetros, causadas pelas interações cruzadas.

As correções nos parâmetros de bifurcação $\chi_{\pm}$ são dadas pelas raízes reais do seguinte polinômio quártico:

$$\begin{aligned}
\Delta &= -\chi^4 - 2(3+7\mu)\chi^3 + 3(2-11\mu^2)\chi^2 + 2(5+12\mu-18\mu^2-52\mu^3)\chi \\
&\quad + 2(9+76\mu+228\mu^2+264\mu^3+76\mu^4).
\end{aligned} \tag{5.3.28}$$

Somente a raiz real positiva (negativa) de $\Delta = 0$ é útil se $\mu > 0$ ($\mu < 0$), quando representa o parâmetro de bifurcação $\chi_+(\mu)$ ($\chi_-(\mu)$). Não vamos exibir a solução analítica para as raízes do polinômio (5.3.28), devido à complexidade de sua dependência em μ , que de nenhuma forma nos possibilitaria melhor compreensão do problema. No entanto, podemos observar o comportamento de $\chi_{\pm}$ em função de μ na figura 5.3.4.

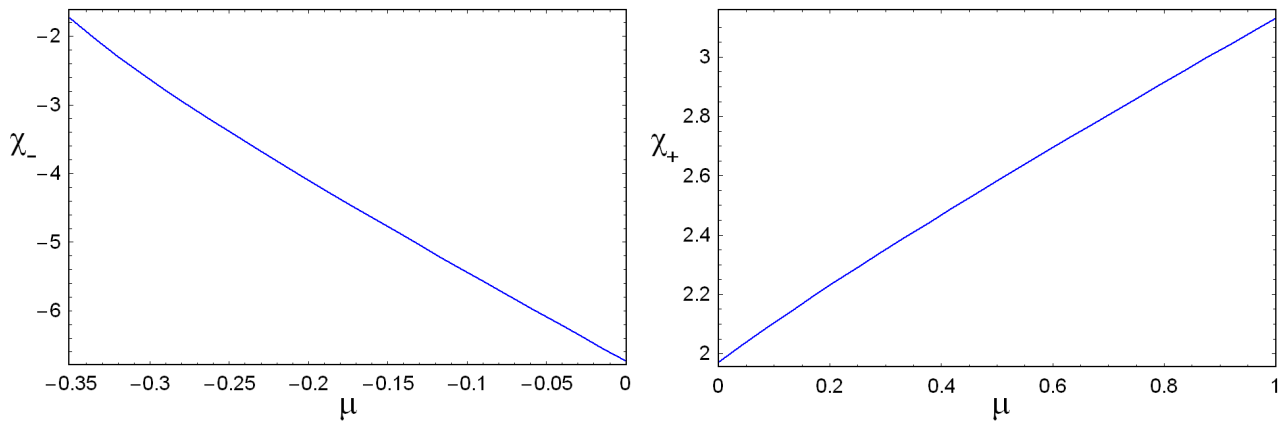


Figura 5.3.4: Comportamento dos parâmetros de bifurcação $\chi_{\pm}$ com a taxa de colisão cruzada μ .

Apesar de as colisões cruzadas representarem um efeito de menor grandeza sobre a dinâmica do condensado em poço triplo, temos que pequenos valores de μ podem alterar significativamente o regime do sistema. Na figura 5.3.4 vemos que um pequeno intervalo de variação em μ pode deslocar sensivelmente o parâmetro de bifurcação, significando que muitas órbitas do sistema tiveram sua dinâmica profundamente alterada.

Para $\chi > 0$, temos que $|\chi_+|$ cresce com o aumento de $|\mu|$, indicando que acréscimo das interações cruzadas ao tunelamento efetivo retarda a ocorrência da bifurcação dinâmica. Ou seja, μ favorece as famílias de trajetórias presentes antes da bifurcação, ao passo que valores crescentes de χ , associados à intensidade da autocolisão, são responsáveis pela existência dos regimes dinâmicos provenientes da bifurcação.

De maneira distinta, observamos que $|\chi_-|$ diminui com o aumento de $|\mu|$, quando κ e Ω têm sinais opostos. Ou seja, as colisões cruzadas favorecem a bifurcação e o aparecimento de novos regimes dinâmicos na presença de colisões repulsivas. Também vemos que a variação relativa de χ_- em função de $\mu < 0$ é muito mais intensa que no caso de χ_+ para $\mu > 0$.

Então, vamos entender a razão destas variações dinâmicas mais intensas provocadas pelas colisões cruzadas no regime de espalhamento repulsivo. Segundo a definição (3.1.26'), observamos que o tunelamento efetivo pode se anular quando Ω e Λ têm sinais opostos, visto que $\Lambda = \varepsilon^{\frac{3}{2}}\kappa$ e $\varepsilon > 0$:

$$\Omega' = 0 \rightarrow \Omega + 2\Lambda(N - 1) = \Omega(1 + 2\mu) = 0 \quad \therefore \quad \mu = -\frac{1}{2}. \quad (5.3.29)$$

Portanto, o tunelamento efetivo se anula em $\mu = -\frac{1}{2}$, caso somente possível quando $\Omega\kappa < 0$. Esta inequação somente é satisfeita para bósons interagindo repulsivamente, pois as hipóteses do modelo geralmente garantem que $\Omega < 0$. Logo, a quase anulação do tunelamento explica a variação brusca de comportamento do sistema quando μ se aproxima de $-\frac{1}{2}$. De maneira semelhante justificamos o aparecimento precoce da bifurcação para $-\frac{1}{2} < \mu < 0$, pois temos que $|\Omega'|$ decresce neste intervalo, favorecendo a autocolisão e seus regimes dinâmicos associados.

Na equação (5.3.29), observamos que Ω' aumenta em uma unidade de Ω para cada meia unidade de $\mu > 0$ acrescida ao sistema. Então, concluímos novamente que os efeitos da colisão cruzada não devem ser ignorados, tendo em vista também a presença bastante significativa do fator linear em N na definição (5.3.21).

Resumimos os resultados desta subseção na figura 5.3.5, onde exibimos o número de pontos de equilíbrio sobre cada uma das retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$, $w_2 = 1$, em função dos parâmetros de colisão χ e μ . Note que também mostramos os resultados nos quadrantes inacessíveis fisicamente, tais que $\chi\mu < 0$, de modo a relacionar continuamente as soluções nos quadrantes de interesse.

As retas tracejadas horizontais representam os valores de μ onde as equações (5.3.24) e (5.3.26) não podem ser utilizadas corretamente, devido à presença nos denominadores dos monômios $(1 + \mu)$ e $(1 + 2\mu)$. Portanto, para estes valores da taxa de colisão cruzada, devemos retornar às igualdades (5.3.23) e (5.3.25).

Entretanto, observamos que para $\mu = -1$ ($\mu = -\frac{1}{2}$) obtemos apenas uma equação cúbica para a localização dos pontos fixos sobre a reta $w_1 = w_2$ ($w_2 = 1$), enquanto a equação equivalente para $w_2 = 1$ ($w_1 = w_2$) continua a apresentar comportamento quártico em w_1 . Este fato parece contradizer a equivalência entre os pontos de equilíbrio fornecidos pelas duas equações, pois indica que o número máximo de raízes reais é diferente em cada uma delas.

No entanto, a aparente contradição acontece porque os estados clássicos com ocupação média nula no terceiro modo local não possuem coordenadas finitas nas variáveis w_1 e w_2 . Portanto, a solução “oculta” sobre a reta $w_1 = w_2$ ($w_2 = 1$) representa um ponto fixo com o terceiro poço vazio, cujas coordenadas divergem na parametrização utilizada do espaço de fase, ao passo que ponto de equilíbrio equivalente sobre $w_2 = 1$ ($w_1 = w_2$) apresenta a desocupação no primeiro modo, cujas coordenadas são finitas.

Resumindo, a equação (5.3.23) exibe uma raiz real finita a mais que (5.3.25) quando $\mu = -\frac{1}{2}$, mas esta situação é invertida em $\mu = -1$. Porém, não estudaremos mais profundamente este caso, que

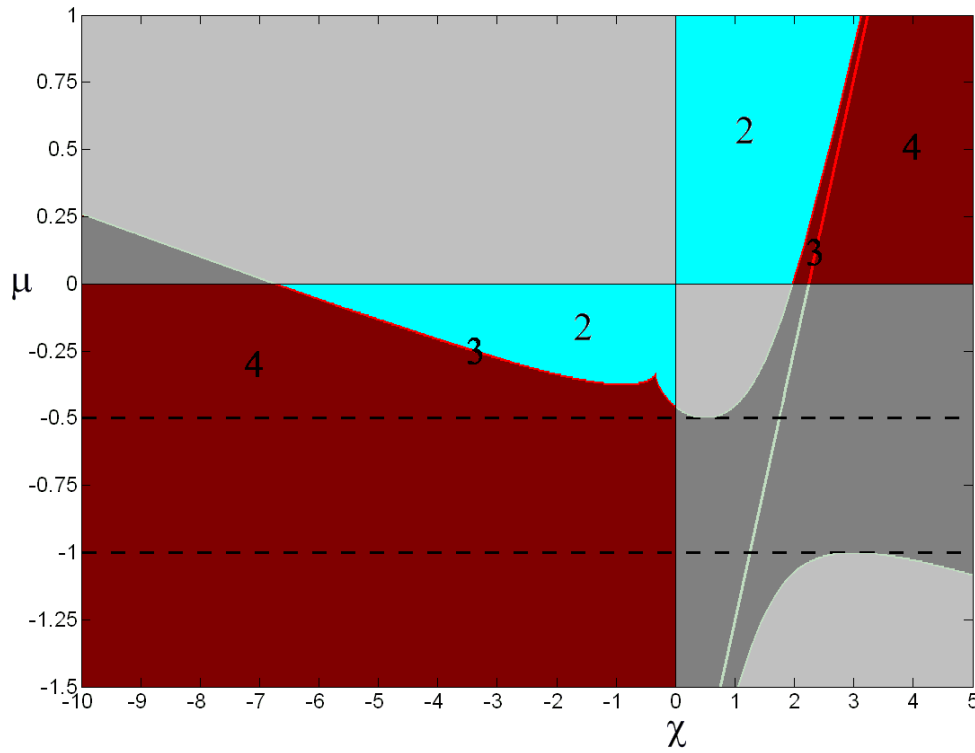


Figura 5.3.5: Diagrama indicando o número de pontos de equilíbrio em função dos parâmetros de colisão sobre cada uma das retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$, $w_2 = 1$, considerando as variáveis w_1 e w_2 restritas aos reais. Os quadrantes onde $\chi\mu < 0$ não são acessíveis fisicamente, mas exibimos os resultados nestas regiões em cores diferenciadas para relacionar de maneira contínua as soluções nos quadrantes de interesse. A linha horizontal tracejada em $\mu = -1$ ($\mu = -0,5$) indica a região onde a reta $w_1 = w_2$ ($w_1 = 1$ ou $w_2 = 1$) apresenta uma solução divergente.

geralmente não estará presente em nossas análises do modelo devido à condição $|\chi| \gg |\mu|$.

5.3.3 Estados de Vórtice

Até agora consideramos apenas os pontos de equilíbrio nos quais a parte imaginária das variáveis complexas w_1 e w_2 eram nulas. Estes pontos, quando escritos nas variáveis de ângulo e ação, têm em comum que os ângulos somente assumem os valores $\phi_1, \phi_2 = 0, \pi$, anulando imediatamente os senos nas equações de movimento das populações J_1 e J_2 .

Como vimos em (3.2.9), o operador de momento angular do condensado em torno do eixo de simetria, que na dedução do modelo escolhemos como o eixo z do potencial de aprisionamento, é proporcional a $J_s = J_x + J_y + J_z$. A média deste operador em um estado coerente pode ser encontrada por (4.2.12), utilizando as representações padrões dos geradores J_i de (8.1.75):

$$\begin{aligned}
\langle N; \vec{w} | J_S | N; \vec{w} \rangle &= \frac{iN}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \begin{pmatrix} w_1^* & w_2^* & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{iN}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} [(w_1^* - w_2^*) - (w_1 - w_2) + w_2^* w_1 - w_1^* w_2] \\
&= \frac{2N}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \text{Im}(w_1 - w_2 + w_1^* w_2).
\end{aligned} \tag{5.3.30}$$

Conseqüentemente, para nenhum dos pontos fixos encontrados anteriormente a média do momento angular do condensado é diferente de zero:

$$\langle N; \vec{w} | J_S | N; \vec{w} \rangle_{w_1, w_2 \in \mathbb{R}} = 0. \tag{5.3.31}$$

Já que o potencial de aprisionamento do condensado é efetivamente bidimensional^{5.5} esperamos que, diferentemente do caso de poço duplo, existam estados de momento angular não nulo, também na aproximação semi-clássica. No entanto, os pontos de equilíbrio associados às órbitas dotadas de rotação do condensado devem ter parte imaginária diferente de zero. Analisando cuidadosamente as equações de movimento (5.2.2.c) e (5.2.2.d), vemos que para $J_1 = J_2 = \frac{N}{3}$ os pré-fatores de todos os termos em seno de uma diferença de fase entre condensados ficam idênticos e as equações de movimento das populações se anulam identicamente se:

$$\sin(\phi_1 - \phi_2) = -\sin \phi_1 = \sin \phi_2 \quad \rightarrow \quad \phi_1 = \pm \frac{2\pi}{3} \text{ e } \phi_2 = \mp \frac{2\pi}{3}. \tag{5.3.32}$$

Os valores angulares $\pm \frac{2\pi}{3}$ são justamente os ângulos de rotação do potencial de aprisionamento em torno de seu eixo de simetria que deixam o sistema invariante. Então, aproveitando as configurações altamente simétricas do sistema, podemos encontrar os outros pontos fixos do problema. Retornando às variáveis complexas, procuramos por pontos de equilíbrio sob as condições $|w_1| = |w_2|$, que corresponde aos dois primeiros poços com média populacional idêntica, e $w_1 + w_2 + 1 = 0$, que anula identicamente o termo de tunelamento nas equações de movimento provenientes de (5.2.5). Destas imposições, obtemos imediatamente que:

$$w_1 = w_2^* \quad \text{e} \quad \text{Re}(w_1) = \text{Re}(w_2) = -\frac{1}{2}. \tag{5.3.33}$$

Fazendo $\dot{w}_1 = \dot{w}_2 = 0$ nas equações de movimento (5.2.5), juntamente com as imposições adotadas e os resultados de (5.3.33), chegamos na seguinte condição para pontos fixos:

$$(|w_1|^2 - 1)(N - 1) \{ \kappa w_1 - \Lambda[(1 - w_1^*)w_1^* - (1 + w_1^*)w_1] \} = 0. \tag{5.3.34}$$

A equação anterior tem a solução simples $|w_1| = 1$ que, juntamente com os resultados (5.3.33), resulta no seguinte par de pontos fixos independentes dos parâmetros do sistema:

$$w_1 = e^{\pm i \frac{2\pi}{3}}, \quad w_2 = e^{\mp i \frac{2\pi}{3}} \quad \rightarrow \quad J_1 = J_2 = \frac{N}{3}, \quad \phi_1 = \pm \frac{2\pi}{3} \text{ e } \phi_2 = \mp \frac{2\pi}{3}. \tag{5.3.35}$$

Estes são justamente os valores esperados da discussão anterior, onde anulamos identicamente as equações para $\dot{J}_1$ e $\dot{J}_2$ fazendo a escolha de ângulos (5.3.32).

^{5.5}Pois o potencial é harmônico simples na direção do eixo de simetria da armadilha.

Os estados coerentes com parâmetros dados em (5.3.35) podem ser obtidos do estado com $w_1 = w_2 = 1$, que também possui alta simetria entre os condensados localizados, da aplicação do seguinte operador de $SU(3)$:

$$\mathcal{R}\left(\pm\frac{2\pi}{3}\right) = \exp\left[\pm i\frac{2\pi}{3}(2Q_1)\right]. \quad (5.3.36)$$

Ou seja:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\pm\frac{2\pi}{3})|N; w_1 = w_2 = 1\rangle &= \exp[\pm i\frac{2\pi}{3}(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)] \sum_{n_1+n_2+n_3=N} \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!n_3!}} |n_1, n_2, n_3\rangle \\ &= \sum_{n_1+n_2+n_3=N} \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!n_3!}} \left(e^{\pm i\frac{2\pi}{3}}\right)^{n_1} \left(e^{\mp i\frac{2\pi}{3}}\right)^{n_2} |n_1, n_2, n_3\rangle \quad (5.3.37) \\ &= |N; w_1 = e^{\pm i\frac{2\pi}{3}}, w_2 = e^{\pm i\frac{2\pi}{3}}\rangle. \end{aligned}$$

Lembrando que $\{Q_1, P_2, J_z\}$ gera uma álgebra isomorfa a $su(2)$, podemos associar os pontos fixos de (5.3.35) a rotações do ponto $w_1 = w_2 = 1$, também de equilíbrio, pois são relacionados pela simetria de rotação de $\frac{2\pi}{3}$ do potencial.

O momento angular médio do estado coerente parametrizado por (5.3.35) é calculado utilizando (5.3.30):

$$\langle J_s \rangle_{w_1=e^{\pm i\frac{2\pi}{3}}, w_2=w_1^*} = \pm\sqrt{3}N. \quad (5.3.38)$$

Ou seja, os estados de (5.3.35) são conhecidos na literatura como **estados de vórtice** [FP03], pois representam excitações de rotação do condensado sobre o estado não girante $w_1 = w_2 = 1$. Os estados de vórtice são interessantes na análise da dinâmica de rotação no modelo, como veremos em capítulos posteriores.

Agora que conhecemos todos os pontos de equilíbrio, podemos calcular a energia total do sistema em cada um deles, como uma função das taxas de colisão. Desta maneira, podemos encontrar os pontos de mínimo e máximo global de $\mathcal{H}(\vec{w}^*, \vec{w})$. O comportamento do mínimo global, ou estado fundamental semiclássico, pode indicar transições de regime no sistema.

Na figura 5.3.6 temos o comportamento da Hamiltoniana de (5.1.7) calculada nos pontos fixos em função do parâmetro χ e, por simplicidade, para $\mu = 0$. O estado $w_1 = w_2 = 1$ é o mínimo global para $\chi < 2$, acima deste valor os três pontos de equilíbrio da classe 4^+ se tornam os estados fundamentais, como vemos em destaque na figura. Para $\chi < 0$ os pontos da classe 2^- são os de maior energia, enquanto os estados de vórtice são máximos na região $\chi > 0$. Quando $\mu \neq 0$ esperamos apenas um deslocamento do parâmetro de transição $\chi = 2$ ($\chi = 0$) para o mínimo (máximo) global do modelo. Estas conclusões são confirmadas na análise de estabilidade dos pontos de equilíbrio, assunto da próxima seção.

5.4 Análise de Estabilidade

Linearizando as equações de movimento para $\dot{w}_1$ e $\dot{w}_2$ podemos analisar a dinâmica do modelo na vizinhança de um ponto fixo. Simplificando a notação, escrevemos:

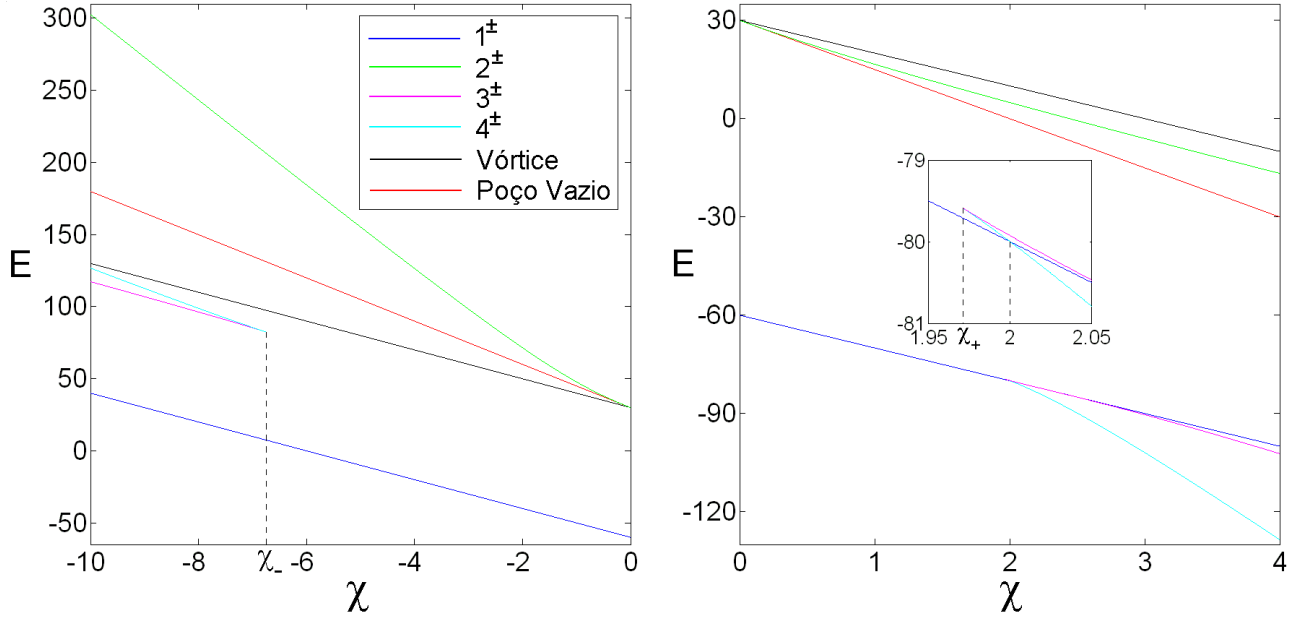


Figura 5.3.6: Energia total do sistema calculada nos pontos de equilíbrio, desconsiderando as colisões cruzadas por simplicidade. À esquerda, para interações repulsivas, com $\chi < 0$, e à direita para atrativas, com $\chi > 0$. A denominação “Poço Vazio” é dada aos pontos de equilíbrio que, para todos valores dos parâmetros, têm a população média nula em um dos poços, parametrizados por $w_1 = -1$ e $w_2 = 0$ ou $w_1 = 0$ e $w_2 = -1$. As unidades são escolhidas tais que $|\Omega| = 1$. Em destaque à direita, temos a região de parâmetros onde há troca do estado fundamental, exatamente em $\chi = 2$.

$$\dot{\vec{w}} = \vec{f}(\vec{w}^*, \vec{w}); \quad (5.4.1)$$

onde $\vec{w} = (w_1 \ w_2)^T$ e $\vec{f} = (f_1 \ f_2)^T$. As funções f_1 e f_2 são dadas por (5.2.5) e sua equação análoga para $\dot{w}_2$. Agora, expandimos (5.4.1) em séries de Taylor em torno do ponto fixo $\vec{w}_0 = (w_1^0 \ w_2^0)^T$:

$$\begin{aligned} \dot{w}_i &= f_i(\vec{w}_0, \vec{w}_0^*) + \left. \frac{\partial f_i}{\partial \vec{w}} \right|_{\vec{w}=\vec{w}_0} \cdot (\vec{w} - \vec{w}_0) + \left. \frac{\partial f_i}{\partial \vec{w}^*} \right|_{\vec{w}=\vec{w}_0} \cdot (\vec{w}^* - \vec{w}_0^*) + O(|\vec{w} - \vec{w}_0|^2) \\ &= \sum_{k=1}^2 \left\{ \left. \frac{\partial f_i}{\partial w_k} \right|_{\vec{w}=\vec{w}_0} (w_k - w_k^0) + \left. \frac{\partial f_i}{\partial w_k^*} \right|_{\vec{w}=\vec{w}_0} (w_k^* - w_k^{0*}) \right\} + O(|\vec{w} - \vec{w}_0|^2), \quad i = 1, 2; \end{aligned} \quad (5.4.2)$$

Note que tratamos w_k e w_k^* como variáveis formalmente independentes, para $k = 1, 2$. Logo, calculando as derivadas de $\vec{f}(\vec{w}, \vec{w}^*)$, temos um sistema linearizado do tipo:

$$\dot{\vec{w}} \cong F_1(\vec{w}_0)(\vec{w} - \vec{w}_0) + F_2(\vec{w}_0)(\vec{w}^* - \vec{w}_0^*). \quad (5.4.3)$$

As matrizes F_1 e F_2 são definidas por:

$$[F_1(\vec{w}_0)]_{ij} \equiv \left. \frac{\partial f_i}{\partial w_j} \right|_{\vec{w}=\vec{w}_0} \quad \text{e} \quad [F_2(\vec{w}_0)]_{ij} \equiv \left. \frac{\partial f_i}{\partial w_j^*} \right|_{\vec{w}=\vec{w}_0}; \quad i, j = 1, 2. \quad (5.4.4)$$

Analizamos a estabilidade dos pontos de equilíbrio dividindo $\vec{w}$ em parte real e imaginária:

$$w_j = x_j + iy_j, \text{ para } x_j, y_j \in \mathbb{R} \text{ e } j = 1, 2. \quad (5.4.5)$$

Também separamos F_1 e F_2 em matrizes reais:

$$\begin{cases} F_1(\vec{w}_0) = g_1(\vec{w}_0) + ih_1(\vec{w}_0), \\ F_2(\vec{w}_0) = g_2(\vec{w}_0) + ih_2(\vec{w}_0); \end{cases} \quad g_j \text{ e } h_j \text{ matrizes reais, para } j = 1, 2. \quad (5.4.6)$$

Deste modo, utilizando (5.4.5) e (5.4.6), reescrevemos (5.4.2):

$$\begin{aligned} \dot{\vec{x}} + i\dot{\vec{y}} &\cong (g_1 + ih_1)[(\vec{x} - \vec{x}_0) + i(\vec{y} - \vec{y}_0)] + (g_2 + ih_2)[(\vec{x} - \vec{x}_0) - i(\vec{y} - \vec{y}_0)] \\ &= [(g_1 + g_2)(\vec{x} - \vec{x}_0) + (-h_1 + h_2)(\vec{y} - \vec{y}_0)] + i[(h_1 + h_2)(\vec{x} - \vec{x}_0) + (g_1 - g_2)(\vec{y} - \vec{y}_0)]. \end{aligned} \quad (5.4.7)$$

Observe que representamos as coordenadas do ponto fixo como $\vec{w}_0 = \vec{x}_0 + i\vec{y}_0$, com $\vec{x}_0, \vec{y}_0 \in \mathbb{R}$. Podemos reescrever (5.4.7) em forma ainda mais compacta:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \dot{\vec{x}} \\ \dot{\vec{y}} \end{pmatrix} &\cong \begin{pmatrix} g_1 + g_2 & -h_1 + h_2 \\ h_1 + h_2 & g_1 - g_2 \end{pmatrix} \Big|_{\vec{w}=\vec{w}_0} \begin{pmatrix} \vec{x} - \vec{x}_0 \\ \vec{y} - \vec{y}_0 \end{pmatrix} \\ &\equiv A(\vec{w}_0) \begin{pmatrix} \vec{x} - \vec{x}_0 \\ \vec{y} - \vec{y}_0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.4.8)$$

Os autovalores da matriz A classificam a estabilidade do ponto fixo $\vec{w}_0$. Como tratamos de um sistema conservativo Hamiltoniano, temos apenas quatro possibilidades para os autovalores λ de A [dA95], descritos na tabela 5.4.1.

Tabela 5.4.1: Possibilidades de autovalores da matriz A para um sistema Hamiltoniano.

- I. Valores nulos, $\lambda = 0$.
- II. Pares de valores reais, $\lambda = \pm\alpha$ para $\alpha \in \mathbb{R}$.
- III. Pares de valores puramente imaginários, $\lambda = \pm i\beta$ para $\beta \in \mathbb{R}$.
- IV. Quartetos de valores complexos, $\lambda = \pm\alpha \pm i\beta$ para $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$.

O ponto fixo é estável se todos autovalores de $A(\vec{w}_0)$ são do tipo III, caso contrário $\vec{w}_0$ é instável.

De acordo com (5.4.1), a função $f_1(\vec{w}, \vec{w}^*)$ é encontrada em (5.2.5), enquanto $f_2(\vec{w}, \vec{w}^*)$ é dada pela mesma equação permutando os índices 1 e 2. Contudo, vamos começar novamente estudando o caso mais simples, onde desprezamos os efeitos das colisões cruzadas, fazendo $\Lambda = 0$ nas equações de movimento. Começamos reescrevendo a equação (5.2.5') e definindo as funções f'_1 e f'_2 , nas quais as interações cruzadas estão ausentes:

$$\begin{aligned} \dot{w}_1 &= -i \left[\Omega(1 - w_1)(w_1 + w_2 + 1) + 2w_1\kappa(N - 1) \frac{|w_1|^2 - 1}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \right] \equiv f'_1(\vec{w}, \vec{w}^*); \\ \dot{w}_2 &= -i \left[\Omega(1 - w_2)(w_1 + w_2 + 1) + 2w_2\kappa(N - 1) \frac{|w_2|^2 - 1}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \right] \equiv f'_2(\vec{w}, \vec{w}^*). \end{aligned} \quad (5.4.9)$$

Então, calculando as derivadas das funções f'_1 e f'_2 , encontramos as matrizes $F_1(\vec{w})$ e $F_2(\vec{w})$:

$$\begin{aligned}
(F_1)_{11} &= -i \left\{ -\Omega(2w_1 + w_2) + \frac{2\kappa(N-1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (|w_1|^4 + 2|w_1|^2 - |w_2|^2 + 2|w_1|^2|w_2|^2 - 1) \right\}; \\
(F_1)_{12} &= -i \left\{ \Omega(1 - w_1) - \frac{2\kappa(N-1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} w_1 w_2^* (|w_1|^2 - 1) \right\}; \\
(F_2)_{11} &= -i \left\{ \frac{2\kappa(N-1)(|w_2|^2 + 2)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} w_1^2 \right\}; \\
(F_2)_{12} &= -i \left\{ -\frac{2\kappa(N-1)(|w_1|^2 - 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} w_1 w_2 \right\}.
\end{aligned} \tag{5.4.10}$$

Os elementos $(F_1)_{22}$, $(F_1)_{21}$, $(F_2)_{22}$ e $(F_2)_{21}$ são obtidos pela permutação das variáveis w_1 e w_2 em $(F_1)_{11}$, $(F_1)_{12}$, $(F_2)_{11}$ e $(F_2)_{12}$, respectivamente. Separando w_i e F_i em suas partes reais e imaginárias, obtemos as matrizes:

$$\begin{aligned}
g_1 &= \begin{pmatrix} -\Omega(2y_1 + y_2) & -\Omega y_1 - \frac{2\kappa(N-1)(|w_1|^2 - 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (y_1 x_2 - y_2 x_1) \\ -\Omega y_2 - \frac{2\kappa(N-1)(|w_2|^2 - 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (y_2 x_1 - y_1 x_2) & -\Omega(2y_2 + y_1) \end{pmatrix}; \\
g_2 &= \begin{pmatrix} \frac{4\kappa(N-1)(|w_2|^2 + 2)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} x_1 y_1 & -\frac{2\kappa(N-1)(|w_1|^2 - 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (x_1 y_2 + x_2 y_1) \\ -\frac{2\kappa(N-1)(|w_2|^2 - 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (x_1 y_2 + x_2 y_1) & \frac{4\kappa(N-1)(|w_1|^2 + 2)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} x_2 y_2 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{5.4.11}$$

Na grande maioria dos pontos de equilíbrio encontrados nas seções anteriores temos que w_1^0 e w_2^0 são reais, com exceção dos estados de vórtice. Então, a maior parte dos valores de $\vec{w}_0$ em nosso problema possui parte imaginária dada por $y_1 = y_2 = 0$. Como todos elementos de matriz de g_1 e g_2 somente possuem termos múltiplos de y_i , obtemos:

$$g_1(\vec{w}_0) = g_2(\vec{w}_0) = 0 \text{ para todo } \vec{w}_0, \text{ exceto os estados de vórtice.} \tag{5.4.12}$$

Agora escrevemos os elementos das matrizes restantes h_1 e h_2 , definidas em (5.4.6):

$$\begin{aligned}
(h_1)_{11} &= \Omega(2x_1 + x_2) - \frac{\kappa(N-1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (|w_1|^4 + 2|w_1|^2 - |w_2|^2 + 2|w_1|^2|w_2|^2 - 1); \\
(h_1)_{12} &= \Omega(x_1 - 1) + \frac{2\kappa(N-1)(|w_1|^2 - 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (x_1 x_2 + y_1 y_2); \\
(h_2)_{11} &= -\frac{2\kappa(N-1)(|w_2|^2 + 2)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (x_1^2 - y_1^2); \\
(h_2)_{12} &= \frac{2\kappa(N-1)(|w_1|^2 - 1)}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^2} (x_1 x_2 - y_1 y_2).
\end{aligned} \tag{5.4.13}$$

Novamente, $(h_1)_{22}$, $(h_1)_{21}$, $(h_2)_{22}$ e $(h_2)_{21}$ são obtidos por permutação dos índices 1 e 2 no lado direito de $(h_1)_{11}$, $(h_1)_{12}$, $(h_2)_{11}$ e $(h_2)_{12}$, nesta ordem. Mais uma vez excluindo o caso dos estados de vórtice, reescrevemos as matrizes h_1 e h_2 com a substituição $y_1 = y_2 = 0$:

$$h_1 = \Omega \begin{pmatrix} (2x_1 + x_2) - \frac{2\chi(x_1^4 + 2x_1^2 - x_2^2 + 2x_1^2 x_2^2 - 1)}{(x_1^2 + x_2^2 + 1)^2} & (x_1 - 1) + \frac{2\chi x_1 x_2 (x_1^2 - 1)}{(x_1^2 + x_2^2 + 1)^2} \\ (x_2 - 1) + \frac{2\chi x_1 x_2 (x_2^2 - 1)}{(x_1^2 + x_2^2 + 1)^2} & (2x_2 + x_1) - \frac{2\chi(x_2^4 + 2x_2^2 - x_1^2 + 2x_1^2 x_2^2 - 1)}{(x_1^2 + x_2^2 + 1)^2} \end{pmatrix}; \quad (5.4.14)$$

$$h_2 = \frac{\Omega}{(x_1^2 + x_2^2 + 1)^2} \begin{pmatrix} -2\chi x_1^2 (x_2^2 + 2) & 2\chi x_1 x_2 (x_1^2 - 1) \\ 2\chi x_1 x_2 (x_2^2 - 1) & -2\chi x_2^2 (x_1^2 + 2) \end{pmatrix}.$$

Utilizando (5.4.12) e (5.4.14), podemos encontrar a matriz $A(\vec{w}_0)$, definida em (5.4.8), para todos os pontos de equilíbrio reais do sistema. Começando pelo o ponto fixo 1^+ , cujas coordenadas são $w_1 = w_2 = 1$, obtemos:

$$A(w_1 = w_2 = 1) = \frac{\Omega}{9} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -27 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -27 \\ 27 - 12\chi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 27 - 12\chi & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (5.4.15)$$

que possui os seguintes autovalores de multiplicidade dois:

$$\lambda = \pm |\Omega| \sqrt{4\chi - 9}. \quad (5.4.16)$$

Ou seja, o ponto 1^+ é instável somente se $\chi \geq \frac{9}{4}$, caso contrário é estável.

Outros pontos de equilíbrio reais com localização independente dos parâmetros de colisão são os estados de poço vazio, cujas coordenadas são $(w_1, w_2) = (-1, 0)$ e $(w_1, w_2) = (0, -1)$. Devido à simetria de rotação do potencial de aprisionamento, esperamos encontrar autovalores idênticos para estas duas possíveis escolhas de modo local desocupado. Portanto, sem perda de generalidade, exibimos a matriz A para $w_1 = -1$ e $w_2 = 0$:

$$A(w_1 = -1, w_2 = 0) = \frac{\Omega}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 8 & 8 \\ 0 & 0 & 4 & 4 - 4\chi \\ -8 - 8\chi & -8 & 0 & 0 \\ -4 & -4 + 4\chi & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (5.4.17)$$

cujos autovalores são iguais a:

$$\lambda = \pm \frac{|\Omega|}{\sqrt{2}} \sqrt{-\chi^2 - 2\chi - 9 \pm \sqrt{(\chi - 9)(\chi^3 - 3\chi^2 - 5\chi - 9)}}. \quad (5.4.18)$$

Observando que $\delta \equiv -\chi^2 - 2\chi - 9 < 0$ para todo χ , ao passo que $\Delta \equiv (\chi - 9)(\chi^3 - 3\chi^2 - 5\chi - 9)$ é negativo apenas entre $a = 1 + \frac{1}{3} \sqrt[3]{216 - 24\sqrt{57}} + 2\sqrt[3]{\frac{9 + \sqrt{57}}{9}} \cong 4,539$ e $b = 9$, chegamos às seguintes conclusões:

$$\begin{aligned}
\lambda_+ &\equiv \pm\sqrt{\delta + \sqrt{\Delta}} \begin{cases} \text{real se } \chi \leq 0, \\ \text{puramente imaginário se } \chi \in (0, a] \cup [b, \infty), \\ \text{do tipo } \alpha + i\beta, \text{ com } \alpha, \beta \in \mathbb{R} - \{0\}, \text{ se } \chi \in (a, b); \end{cases} \\
\lambda_- &\equiv \pm\sqrt{\delta - \sqrt{\Delta}} \begin{cases} \text{puramente imaginário se } \chi \in (-\infty, a] \cup [b, \infty), \\ \text{do tipo } \alpha + i\beta, \text{ com } \alpha, \beta \in \mathbb{R} - \{0\}; \text{ se } \chi \in (a, b). \end{cases}
\end{aligned} \tag{5.4.19}$$

Logo, os estados de poço vazio representam pontos fixos estáveis para $\chi \in (0, a] \cup [b, \infty)$, caso contrário o equilíbrio é instável.

Agora consideremos a estabilidade dos pontos de equilíbrio pertencentes às classes $2^\pm$, $3^\pm$ e $4^\pm$, discutidas nas tabelas 5.3.1 e 5.3.2. Lembrando que os três pontos fixos relativos a cada uma destas três classes são equivalentes, devido novamente à simetria de rotação da armadilha bosônica, podemos tratar apenas um dos pontos em cada classe e estender o resultado a todo conjunto. Por simplicidade, vamos estudar a estabilidade dos pontos sobre a reta $w_1 = w_2$, com as variáveis w_i restritas aos reais, e por simetria obtemos facilmente os resultados para os pontos sobre as retas $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$.

Considerando $w_1 = w_2 \in \mathbb{R}$, temos que os blocos $g_1 + g_2$ e $g_1 - g_2$ da matriz A são novamente nulos, enquanto os blocos $B \equiv h_2 - h_1$ e $C \equiv h_1 + h_2$ tornam-se simétricos, como podemos ver em (5.4.14). Devido à forma de blocos de A , também podemos utilizar a seguinte identidade matemática para facilitar os cálculos de seus autovalores nos pontos fixos dependentes das taxas de colisão:

$$\begin{aligned}
\det(A - \lambda) &= \det(BC - \lambda^2) \\
&= \lambda^4 - (b_1c_1 + 2bc + b_2c_2)\lambda^2 + (b_1b_2c_1c_2 - b_1b_2c^2 - b^2c_1c_2 + b^2c^2).
\end{aligned} \tag{5.4.20}$$

Devemos advertir que a primeira equação de (5.4.20) também vale se B e C não são blocos simétricos. Já na segunda igualdade utilizamos a notação:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B \\ C & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 & b \\ b & b_2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad C = \begin{pmatrix} c_1 & c \\ c & c_2 \end{pmatrix}. \tag{5.4.21}$$

Então, os autovalores de A são raízes de uma equação biquadrada de coeficientes reais, como podemos ver substituindo os resultados de (5.4.14) em (5.4.20). Neste caso fica evidente que $-\lambda$ e λ^* também são autovalores, se λ é uma das raízes de (5.4.20), recuperando os resultados da tabela 5.4.1.

Tendo em vista que os autovalores de A são raízes quadradas dos dois autovalores λ^2 de BC , podemos determinar facilmente a estabilidade dos pontos fixos calculando somente autovalores de matrizes 2×2 . Ainda mais, facilitamos os critérios de classificação, pois o ponto de equilíbrio é estável apenas se ambos autovalores λ^2 são reais negativos, caso contrário é instável.

Então, calculando os autovalores de BC para os pontos fixos dos tipos $2^\pm$, $3^\pm$ e $4^\pm$, usando como protótipo os pontos sobre a reta $w_1 = w_2 \in \mathbb{R}$, obtemos os resultados da tabela 5.4.2.

Em $\chi = \frac{9}{4}$ acontece o fenômeno de coalescência dos pontos de equilíbrio 1^+ e 3^+ ; ou seja, as coordenadas dos três pontos fixos da classe 3^+ se igualam a $w_1 = w_2 = 1$ neste valor da taxa de autocolisão, onde observamos também que $\lambda_1^2(3^+) = \lambda_2^2(3^+) = 0$. Comparando este resultado à análise

Tabela 5.4.2: Estabilidade dos pontos de equilíbrio das classes $2^\pm$, $3^\pm$ e $4^\pm$, cuja localização é dependente das taxas de colisão bosônicas.

$\chi > 0$			$\chi < 0$		
Classe	Sinais de λ^2	Equilíbrio	Classe	Sinais de λ^2	Equilíbrio
2^+	$\lambda_1^2 > 0$ e $\lambda_2^2 < 0$	Instável	2^-	$\lambda_1^2 < 0$ e $\lambda_2^2 < 0$	Estável
3^+	$\lambda_1^2 > 0$ e $\lambda_2^2 < 0$	Instável	3^-	$\lambda_1^2 > 0$ e $\lambda_2^2 < 0$	Instável
4^+	$\lambda_1^2 < 0$ e $\lambda_2^2 < 0$	Estável	4^-	$\lambda_1^2 < 0$ e $\lambda_2^2 < 0$	Estável

de estabilidade de 1^+ , vemos que este ponto “absorve” a instabilidade de 3^+ quando suas localizações se encontram no espaço de fase.

Falta apenas a análise de estabilidade dos estados de vórtice, que possuem coordenadas $\vec{w}_0$ complexas. Logo, não podemos zerar as partes imaginárias y_i nos blocos de A e devemos retornar às expressões completas das matrizes g_i e h_i , encontradas em (5.4.11) e (5.4.13). No entanto, ainda podemos simplificar a forma destas matrizes, fazendo $|w_1| = |w_2| = 1$, $x_1 = x_2 \equiv x$ e $y_1 = -y_2 \equiv y$, de maneira a obter:

$$A = \Omega \begin{pmatrix} -y + \frac{4\chi xy}{3} & -y & -3x - \frac{2\chi(x^2 - y^2 - 1)}{3} & 1 - x \\ y & y - \frac{4\chi xy}{3} & 1 - x & -3x - \frac{2\chi(x^2 - y^2 - 1)}{3} \\ 3x - \frac{2\chi(x^2 - y^2 + 1)}{3} & x - 1 & -y - \frac{4\chi xy}{3} & -y \\ x - 1 & 3x - \frac{2\chi(x^2 - y^2 + 1)}{3} & y & y + \frac{4\chi xy}{3} \end{pmatrix}. \quad (5.4.22)$$

Para as coordenadas dos estados de vórtice, devemos substituir os valores $x = -\frac{1}{2}$ e $y = \pm \frac{\sqrt{3}}{2}$ em (5.4.22). Então, independentemente da escolha de sinal para y , adquirimos os seguintes autovalores de A :

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{|\Omega|^2}{2} \left(-9 - 4\chi \pm 3\sqrt{9 + 8\chi} \right). \quad (5.4.23)$$

A raiz $\sqrt{9 + 8\chi}$ em (5.4.23) é real se $\chi \geq -\frac{9}{8}$, ao passo que o termo externo $-(9 + 4\chi)$ é positivo se $\chi < -\frac{9}{4}$. Logo, a parte externa é negativa no intervalo de parâmetros onde a raiz é real. Então, observamos que $\lambda_{\pm}^2$ sempre fornece dois pares de autovalores imaginários puros quando $\sqrt{9 + 8\chi}$ é real, exceto em $\chi = 0$, pois neste valor da taxa de autocolisão temos que $\lambda_+ = 0$. Portanto, os estados de vórtice são estáveis somente para $\chi \geq -\frac{9}{8}$, excluindo $\chi = 0$.

5.4.1 Estabilidade na Presença de Colisões Cruzadas

Devemos agora acrescentar o efeito das colisões cruzadas na caracterização da estabilidade, mas novamente utilizando valores do parâmetro μ bastante inferiores a χ , preservando as hipóteses do modelo. Deste modo não esperamos que as interações cruzadas alterem drasticamente os resultados já conhecidos para a estabilidade dos pontos de equilíbrio em função da taxa de autocolisão. Prevemos apenas um deslocamento dos parâmetros críticos de transição de caráter de estabilidade, devido à alteração significativa da frequência efetiva de tunelamento causada pela taxa μ .

Retornando à equação de movimento (5.2.5), separamos os termos referentes à dinâmica de colisão cruzada, inclusive aquele presente no tunelamento efetivo, definido em (3.1.26’):

$$\begin{aligned}
\dot{w}_1 &= -i\Omega \left\{ (1-w_1)(w_1+w_2+1) + \frac{2\chi w_1(|w_1|^2-1)}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right. \\
&\quad \left. - 2\mu \frac{[(1-w_1)w_2^*(w_1+w_2+w_1w_2)-(1+w_1)w_2(|w_1|^2-1)-(1-w_1)(w_1+w_2+1)(|w_1|^2+|w_2|^2+1)]}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right\} \\
&= f_1(\vec{w}, \vec{w}^*) \equiv f_1'(\vec{w}, \vec{w}^*) + f_1''(\vec{w}, \vec{w}^*).
\end{aligned} \tag{5.4.24}$$

Lembramos que a equação análoga para $\dot{w}_2$ é obtida pela permutação dos dois índices em (5.4.24). Então, basta acrescentar às matrizes $A(\vec{w}_0)$ já calculadas os termos dependentes de μ provenientes das derivadas de $f_i''(\vec{w}, \vec{w}^*)$, para a determinação da estabilidade com a inclusão de interações cruzadas.

As novas expressões obtidas considerando colisões cruzadas são significativamente maiores que as anteriores, de maneira que escrevê-las aqui não acrescentaria muito à discussão. Considerando os pontos de equilíbrio sobre a reta $w_1 = w_2 \in \mathbb{R}$, podemos escrever fórmulas relativamente sucintas para tratar da estabilidade das classes $1^\pm$, $2^\pm$, $3^\pm$ e $4^\pm$, pois a matriz A assume novamente a forma de blocos mostrada em (5.4.21), com os elementos de B e C dados por:

$$\begin{aligned}
b_1 = b_2 &= \Omega \frac{(\chi+2\mu-3w_1(1+\mu))(2w_1^2+1)-(3\chi+2\mu+7\mu w_1)}{2w_1^2+1}; \\
b &= \Omega \frac{(1-w_1)(1+2w_1(\mu(w_1-1)+w_1))}{2w_1^2+1}; \\
c_1 = c_2 &= \Omega \frac{(-2\mu+3(1+\mu)w_1)(2w_1^2+1)^2+\chi(2-6w_2^2-8w_1^4)+\mu(2+w_1(7-2w_1(2+w_1)))}{(2w_1^2+1)^2}; \\
c &= \Omega \frac{(w_1-1)(1+4w_1^2(1+\chi(1+w_1)+w_1^2))+2\mu w_1(-5+w_1(1+2(w_1-1)w_1))}{(2w_1^2+1)^2}.
\end{aligned} \tag{5.4.25}$$

Substituindo $w_1 = w_2 = 1$ em (5.4.25), para o único ponto fixo da classe $1^{\pm 5.6}$, encontramos na matriz BC apenas um autovalor λ^2 de dupla multiplicidade:

$$\lambda^2 = \frac{1}{3}(3+4\mu)(4\chi-9-4\mu). \tag{5.4.26}$$

De acordo com a condição $|\mu| \ll |\chi|$, nas análises posteriores do modelo utilizaremos apenas valores das taxas de colisão tais que $\mu > -\frac{3}{4}$. Considerando esta restrição sobre a taxa de colisão cruzada, temos que o ponto fixo $1^\pm$ é estável se:

$$\chi < \frac{9}{4} + \mu. \tag{5.4.27}$$

Ou seja, o parâmetro de autocolisão crítico para a mudança do caráter de estabilidade do ponto de equilíbrio sofre um pequeno deslocamento linear em μ . Lembrando que os sinais das taxas de colisão não são independentes, observamos que o intervalo de χ para 1^+ estável cresce com o efeito das colisões cruzadas, quando $\chi, \mu > 0$. No espalhamento repulsivo nada se altera, pois a condição $\frac{9}{4} + \mu > 0$ sempre é satisfeita em nosso domínio de interesse, explorado no próximo capítulo.

^{5.6}Denominamos por 1^+ o ponto de equilíbrio de coordenadas $w_1 = w_2 = 1$ no regime de espalhamento atrativo. A classe 1^- representa o ponto fixo de mesmas coordenadas, mas no sistema fisicamente distinto de colisões bosônicas repulsivas.

Os resultados da tabela 5.4.2, referentes às classes de pontos fixos $3^\pm$ e $4^\pm$, não são alterados pela presença de interações cruzadas. Portanto, o ramo $3^\pm$ ($4^\pm$) da bifurcação dinâmica permanece instável (estável), mas o domínio de parâmetros onde estes pontos de equilíbrio existem é modificado pelo deslocamento dos valores críticos $\chi_\pm(\mu)$, descrito na seção 5.3.2.

Considerando as colisões cruzadas, observamos que a coalescência dos pontos pertinentes às classes 1^+ e 3^+ passa a ocorrer em $\chi = \frac{9}{4} + \mu$, exatamente o mesmo valor da taxa de autocolisão onde 1^+ torna-se instável.

Anteriormente encontramos que os pontos fixos 2^+ (2^-) são instáveis (estáveis) para $\chi \geq 0$ ($\chi < 0$), mas este comportamento é alterado de modo pouco trivial na presença de colisões cruzadas. Quando $\mu \neq 0$, observamos que o parâmetro crítico responsável pelo caráter de estabilidade das classes $2^\pm$, que denominamos $\chi_{2^\pm}(\mu)$, é deslocado de zero. Lembrando que devemos tratar deste deslocamento separadamente nos regimes $\chi, \mu > 0$ e $\chi, \mu < 0$, obtemos em ambos os casos que os pontos fixos são instáveis (estáveis) quando $\chi \geq \chi_{2^\pm}(\mu)$ ($\chi < \chi_{2^\pm}(\mu)$). A dependência de $\chi_{2^\pm}$ em μ não é simples, por este motivo exibimos o resultado apenas graficamente na figura 5.4.1.

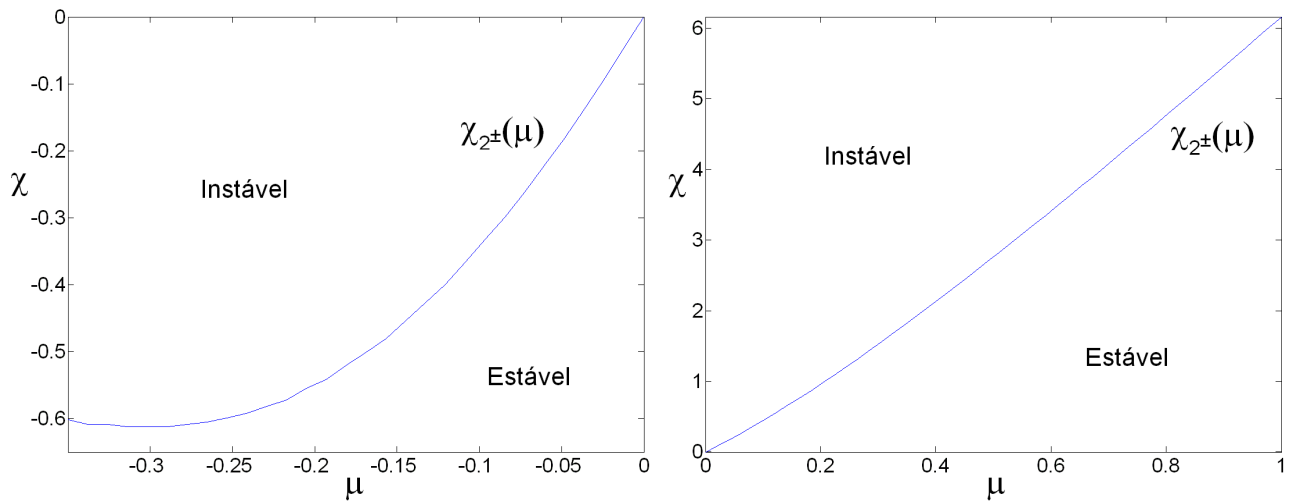


Figura 5.4.1: Deslocamento do parâmetro crítico $\chi_{2^\pm}$ com a adição das colisões cruzadas. Neste valor crítico temos a alteração do comportamento de estabilidade dos pontos de equilíbrio denotados por 2^- (à esquerda) e 2^+ (à direita).

Vemos na figura 5.4.1 que o deslocamento é bastante significativo para $\chi > 0$, onde a colisão cruzada cria uma região na qual 2^+ é estável. No espalhamento repulsivo, os efeitos provocados por $\mu \neq 0$ geram um domínio do parâmetro χ onde 2^- é instável.

Resta apenas analisar a presença das colisões cruzadas na estabilidade dos estados de vórtice e poço vazio, para os quais não podemos utilizar as mesmas simplificações encontradas em (5.4.25), pois a matriz $A(\vec{w}_0)$ não é simétrica nestes dois conjuntos de pontos fixos

Primeiramente, retornamos ao estudo de estabilidade dos estados de vórtice, que possuem coordenadas w_1 e w_2 com parte imaginária não nula. Calculando a matriz A em $w_1 = w_2^* = -\frac{1}{2} \pm i\frac{\sqrt{3}}{2}$, obtemos:

$$A = \Omega \begin{pmatrix} \mp\sqrt{3}\mu \mp \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\chi}{\sqrt{3}}\right) & \mp \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{4\mu}{\sqrt{3}}\right) & \mu + \left(\frac{3}{2} + \chi\right) & \frac{3}{2} + 4\mu \\ \pm \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{4\mu}{\sqrt{3}}\right) & \pm\sqrt{3}\mu \pm \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\chi}{\sqrt{3}}\right) & \frac{3}{2} + 4\mu & \mu + \left(\frac{3}{2} + \chi\right) \\ -\frac{5}{3}\mu + \left(-\frac{3}{2} - \frac{\chi}{3}\right) & -\frac{3}{2} - 4\mu & \mp \frac{5}{\sqrt{3}}\mu \mp \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\chi}{\sqrt{3}}\right) & \mp \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{4\mu}{\sqrt{3}}\right) \\ -\frac{3}{2} - 4\mu & -\frac{5}{3}\mu + \left(-\frac{3}{2} - \frac{\chi}{3}\right) & \pm \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{4\mu}{\sqrt{3}}\right) & \pm \frac{5}{\sqrt{3}}\mu \pm \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\chi}{\sqrt{3}}\right) \end{pmatrix}, \quad (5.4.28)$$

cujos autovalores λ , independentemente da escolha de sinal, são dados por:

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{|\Omega|^2}{6} \left(-104\mu^2 - 16\mu(6 + \chi) - 3(9 + 4\chi) \pm \sqrt{3(3 + 4\mu)(3 + 8\mu)^2(9 + 4\mu + 8\chi)} \right). \quad (5.4.29)$$

Novamente restringindo nosso interesse a $\mu > -\frac{3}{4}$, temos que os valores de $\lambda_{\pm}^2$ são ambos reais negativos se:

$$\chi \geq -\frac{9}{8} - \frac{\mu}{2} \equiv \chi_v(\mu). \quad (5.4.30)$$

Logo, obtemos um novo deslocamento linear de um parâmetro crítico em função de μ . Também vemos que os estados de vórtice são estáveis somente quando $\chi \geq \chi_v(\mu)$, exceto sobre a curva $\chi = 2\mu\frac{6+11\mu}{3+4\mu}$, onde $\lambda_+ = 0$. Então, temos que o comportamento para $\chi > 0$ não foi alterado pelas colisões cruzadas, ao passo que a região estável dos estados de vórtice para $\chi < 0$ é diminuída com $|\mu|$ crescente.

Na figura 5.4.2 construímos um diagrama de estabilidade para os estados de vórtice, no intuito de simplificar a visualização dos resultados anteriores. Note que também incluímos regiões onde $\mu < -\frac{3}{4}$, que não utilizaremos em nossas futuras análises do modelo. Também exibimos os quadrantes fisicamente inacessíveis, onde $\chi\mu < 0$, de maneira a relacionar continuamente a estabilidade nos outros quadrantes.

Por fim, vamos discutir as mudanças provocadas pela colisão cruzada no par de pontos fixos equivalentes de poço vazio. Sem perda de generalidade, podemos estudar a estabilidade de apenas um destes pontos e estender os resultados ao outro, devido à simetria de rotação do potencial de aprisionamento. Então, escolhendo $(w_1^0, w_2^0) = (-1, 0)$, obtemos a seguinte matriz:

$$A = \Omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2(1 + 2\mu) & 2(1 + \mu) \\ 0 & 0 & 1 + \mu & 1 + 4\mu - \chi \\ -2(1 + 2\mu + \chi) & -2(1 + 3\mu) & 0 & 0 \\ -1 - 3\mu & \chi - 4\mu - 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.4.31)$$

Os autovalores de $A(w_1^0 = -1, w_2^0 = 0)$ são dados por:

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{|\Omega|^2}{2} \left\{ -(9 + 4\mu(10 + 11\mu) + \chi(2 + \chi)) \pm \sqrt{(9 + 16\mu - \chi)(9 + 128\mu^3 - 8\mu^2(\chi - 19) + \chi(5 - \chi(\chi - 3)) + 16\mu(4 + \chi + \chi^2))} \right\}. \quad (5.4.32)$$

Comparado aos casos anteriores, o comportamento do sinal de (5.4.32) é bastante complexo. Portanto, resumimos os resultados na figura 5.4.3, onde exibimos o diagrama de estabilidade dos pontos fixos de poço vazio em função dos parâmetros reduzidos de colisão.

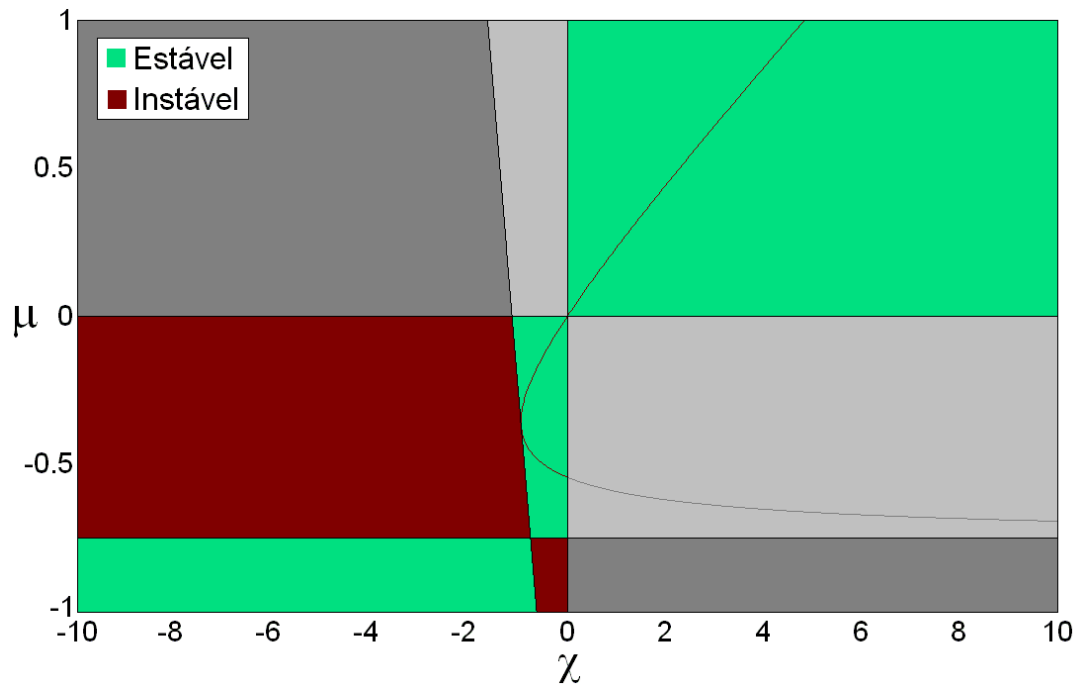


Figura 5.4.2: Diagrama de estabilidade dos pontos fixos de vórtice em função dos parâmetros reduzidos de colisão. Os quadrantes onde $\chi\mu < 0$ não são acessíveis fisicamente, mas nestas regiões exibimos os resultados em cores diferenciadas, de maneira a relacionar continuamente o comportamento de estabilidade nos quadrantes onde $\chi\mu > 0$.

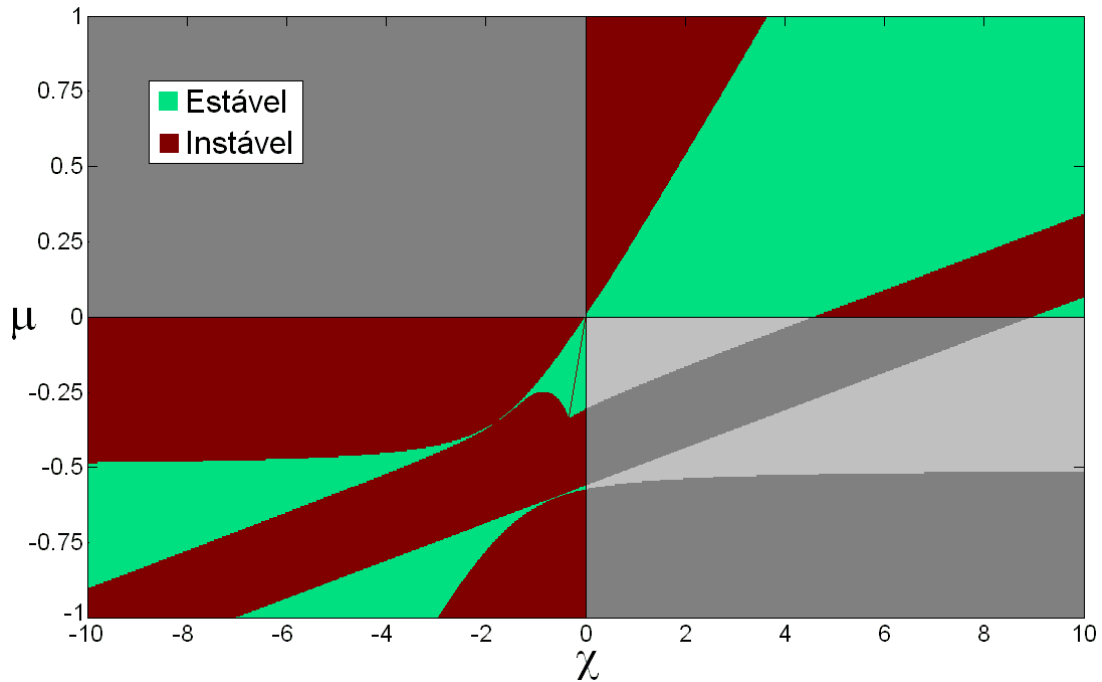


Figura 5.4.3: Diagrama de estabilidade dos pontos fixos de poço vazio em função dos parâmetros reduzidos de colisão. Os quadrantes onde $\chi\mu < 0$ não são acessíveis fisicamente, mas mostramos os resultados matemáticos nestas regiões em cores diferenciadas, de maneira a relacionar continuamente a estabilidade nos quadrantes de interesse.

Note que também mostramos os resultados nos quadrantes inacessíveis fisicamente, onde $\chi\mu < 0$. Deste modo, relacionamos continuamente o comportamento de estabilidade nos quadrantes de interesse.

Diferentemente da situação em que consideramos somente as autocolisões, vemos que as colisões cruzadas no regime de espalhamento repulsivo possibilitam a existência de regiões no espaço de parâmetros onde os estados de poço vazio são pontos de equilíbrio estável.

Em (5.4.32), observamos que os autovalores λ_- não possuem zeros reais, mas a equação $\lambda_+ = 0$ possui duas raízes reais:

$$\begin{aligned}\chi_1 &= \mu; \\ \chi_2 &= \mu \frac{4+7\mu}{1+2\mu}.\end{aligned}\tag{5.4.33}$$

Temos que os estados de poço vazio são pontos fixos instáveis sobre as curvas χ_1 e χ_2 no espaço de parâmetros de colisão, como mostrado no gráfico 5.4.3.

Grande parte dos resultados de nosso trabalho, principalmente aqueles dependentes de resolução numérica ou apresentação gráfica, estão reunidos neste capítulo. Por simplicidade, dividimos a análise dos regimes populacionais do modelo em três grandes partes, associadas às diferentes classes de pontos de equilíbrio presentes no sistema.

Primeiramente, na seção 6.1 estudamos os pontos fixos de localização restrita aos reais sobre as retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$. Todos estes pontos de equilíbrio têm em comum a presença de dois modos locais igualmente populados e em fase, que denominamos **condensados gêmeos**. Neste caso podemos recuperar muitos dos resultados do modelo de dois modos, pois é possível identificar um subregime integrável, cujo subespaço de fase é novamente a esfera de Bloch.

Portanto, reaproveitamos as representações clássicas e quânticas provenientes dos estados coerentes de $SU(2)$, já encontrados na seção 2.1. Também reencontramos os regimes dinâmicos de oscilação Josephson e auto-aprisionamento macroscópico, nos quais novamente analisamos os efeitos das colisões cruzadas.

Todos resultados semiclássicos são comparados aos cálculos quânticos exatos de mesmas condições iniciais, desta maneira buscamos a origem da quebra de correspondência clássico-quântica, que quantificamos utilizando a pureza generalizada como medida de decoerência^{6.1}.

Na seção 6.2 examinamos pela primeira vez um regime populacional inteiramente novo, quando comparado aos resultados da seção 2.1. A dinâmica associada aos estados de poço vazio é discutida para vários valores dos parâmetros de colisão, de modo a relacionar os possíveis comportamentos de estabilidade destes pontos fixos aos cálculos populacionais clássicos e quânticos. Também observamos a presença de órbitas caóticas no espaço de fase, que representa outra nova característica do modelo de três modos.

Utilizando os estados coerentes de $SU(3)$, na seção 6.3 desenvolvemos representações de estados quânticos sobre o espaço de fase generalizado. Entretanto, separamos as distribuições quânticas nos subespaços configuracional e populacional, devido à impossibilidade de visualizar funções sobre um espaço quadridimensional. Definimos também a função semiclássica de fase, que representa uma distribuição probabilística das variáveis angulares do modelo [PB97, BP86].

^{6.1}Utilizamos o termo decoerência como sinônimo de perda de pureza generalizada ou coerência. A pureza generalizada pode ser escrita como o traço $\mathcal{P}_{su(3)}(\rho) = \text{Tr}(\rho_{su(3)}^2)$, resultado mostrado na seção 8.2, justificando o uso da palavra decoerência para o operador densidade $\rho_{su(3)}$, reduzido na álgebra.

Finalmente, consideramos a dinâmica próxima aos estados de vórtice na seção 6.5. Como já discutido, estes pontos de equilíbrio são os únicos do sistema que não apresentam coordenadas reais nas variáveis w_1 e w_2 . Portanto, mostramos que configurações de rotação do condensado podem ser encontradas no regime dinâmico associado a estes pontos fixos.

Além do estudo da dinâmica populacional do condensado em três poços, na seção 6.6 examinamos também os vários aspectos da transição de fase quântica presente no modelo para colisões bosônicas atrativas [SGCS97]. Utilizando as representações sobre o espaço de fase, exibimos uma “fragmentação” do estado fundamental para autocolisão crescente, desconsiderando momentaneamente as interações cruzadas. Também mostramos que a pureza generalizada “sinaliza” a ocorrência da transição para número finito de partículas aprisionadas.

Os últimos resultados de nosso trabalho, apresentados na subseção 6.6.1, relacionam os diferentes regimes dinâmicos populacionais estudados aos estados estacionários do modelo. Por fim, reexaminamos a transição de fase no espectro de auto-energias do sistema.

6.1 Dinâmica de Condensados Gêmeos

Como vimos no capítulo anterior, a maioria dos pontos de equilíbrio do sistema estão contidos no plano onde as variáveis w_1 e w_2 estão restritas aos reais, mais especificamente sobre as retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$ deste plano. Estas condições excluem apenas os estados de vórtice e o par de pontos fixos de poço vazio $(w_1, w_2) = (-1, 0)$ e $(w_1, w_2) = (0, -1)$.

As retas $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$ correspondem todas à situação onde dois poços têm a mesma população média, como podemos ver nas relações de transformação (5.2.7). Temos também que as condições $w_1 = w_2$, $w_1 = 1$ e $w_2 = 1$ correspondem respectivamente a $J_1 = J_2$ com $\phi_1, \phi_2 = 0, \pi$, $J_1 = N - J_1 - J_2$ com $\phi_1 = 0$, $\phi_2 = 0, \pi$ e $J_2 = N - J_1 - J_2$ com $\phi_1 = 0, \pi$, $\phi_2 = 0$, sempre mantendo w_1 e w_2 restritos aos reais.

Podemos relaxar estas condições, que restringem o espaço de fase quadridimensional a um subespaço unidimensional, conservando as condições sobre a igualdade de duas populações, mas permitindo que uma das fases ϕ_i percorra independentemente todo seu domínio, assim restringindo o espaço de fase a um subespaço apenas bidimensional, das seguintes formas:

$$w_1 = w_2, w_1, w_2 \in \mathbb{C} \rightarrow J_1 = J_2, \phi_1 = \phi_2 \in [0, 2\pi); \quad (6.1.1.a)$$

$$w_1 = 1, w_2 \in \mathbb{C} \rightarrow J_1 = N - J_1 - J_2, \phi_1 = 0, \phi_2 \in [0, 2\pi); \quad (6.1.1.b)$$

$$w_2 = 1, w_1 \in \mathbb{C} \rightarrow J_2 = N - J_1 - J_2, \phi_2 = 0, \phi_1 \in [0, 2\pi). \quad (6.1.1.c)$$

Em palavras, estas condições correspondem a:

Primeiro e segundo poços em fase e com mesma população; (6.1.1.a')

Primeiro e terceiro poços em fase e com mesma população; (6.1.1.b')

Segundo e terceiro poços em fase e com mesma população. (6.1.1.c')

Devido à simetria de rotação do potencial de aprisionamento, que torna os três poços dinamicamente equivalentes, temos que as três condições acima são também equivalentes e representam dois poços preenchidos por condensados em estados clássicos completamente idênticos, caracterizados pela mesma fase e ocupação média, deixando o sistema com apenas duas coordenadas livres, representadas pelo balanço de população e a diferença de fase entre os dois poços de estados idênticos e o poço “distinto” ou “solitário”.

Denominamos as restrições (6.1.1.a')-(6.1.1.c') de **condições de poços gêmeos**, por motivos óbvios. Agora, vamos analisar a imposição destas condições às equações de movimento dadas em (5.2.5), que reescrevemos aqui por conveniência:

$$\begin{aligned} \dot{w}_1 = & -i \left\{ \Omega'(1-w_1)(w_1+w_2+1) + 2w_1\kappa(N-1) \frac{|w_1|^2-1}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right. \\ & \left. - 2\Lambda(N-1) \frac{[(1-w_1)w_2^*(w_1+w_2+w_1w_2)-(1+w_1)w_2(|w_1|^2-1)]}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right\}; \end{aligned} \quad (6.1.2.a)$$

$$\begin{aligned} \dot{w}_2 = & -i \left\{ \Omega'(1-w_2)(w_1+w_2+1) + 2w_2\kappa(N-1) \frac{|w_2|^2-1}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right. \\ & \left. - 2\Lambda(N-1) \frac{[(1-w_2)w_1^*(w_1+w_2+w_1w_2)-(1+w_2)w_1(|w_2|^2-1)]}{|w_1|^2+|w_2|^2+1} \right\}. \end{aligned} \quad (6.1.2.b)$$

Impondo a restrição (6.1.1.a) com $w_1 = w_2 = w$ nas equações (6.1.2.a) e (6.1.2.b), vemos que elas se tornam idênticas, ficando claro que, dada uma condição inicial tal que $w_1 = w_2$ em $t = t_0$, a dinâmica do modelo conserva esta condição para todo t . Em outras palavras, o sistema evolui dentro do subespaço $w_1 = w_2$, se ele começa lá. A equação de movimento neste subespaço é dada por:

$$\begin{aligned} \dot{w} = & -i \left\{ \Omega'(1-w)(2w+1) + 2w\kappa(N-1) \frac{|w|^2-1}{2|w|^2+1} \right. \\ & \left. - 2\Lambda(N-1) \frac{[(1-w)w^*(2w+w^2)-(1+w)w(|w|^2-1)]}{2|w|^2+1} \right\}. \end{aligned} \quad (6.1.3.a)$$

Se, em vez de (6.1.1.a), impusermos (6.1.1.b) [(6.1.1.c)] com $w_1[w_2] = 1$ e $w_2[w_1] = w$, temos que a equação (6.1.2.a) [(6.1.2.b)] se anula identicamente, mostrando novamente que a dinâmica conserva a condição de poço gêmeo. Neste caso, a equação (6.1.2.b) [(6.1.2.a)] toma a forma:

$$\begin{aligned} \dot{w} = & -i \left\{ \Omega'(1-w)(w+2) + 2w\kappa(N-1) \frac{|w|^2-1}{|w|^2+2} \right. \\ & \left. - 2\Lambda(N-1) \frac{(1-w)(2w+1)-(1+w)(|w|^2-1)}{|w|^2+2} \right\}. \end{aligned} \quad (6.1.3.b)$$

Então, se o sistema se encontra em $t = t_0$ no subespaço bidimensional dado por $w_1[w_2] = 1$, sua evolução é naturalmente restrita a este subespaço para todo t .

Logo, vemos que as equações de movimento (6.1.2.a) e (6.1.2.b) são tais que se os condensados localizados em dois poços distintos têm mesma população e fase em um ponto da trajetória, então durante toda a órbita clássica do sistema estes dois condensados permanecem em estados idênticos.

Ainda mais, para condensados gêmeos obtemos um sistema com espaço de fase efetivamente bidimensional; ou seja, um problema clássico de apenas um grau de liberdade descrito por uma única equação diferencial para $w \in \mathbb{C}$. Como tratamos de um sistema conservativo, a energia é uma constante de movimento, então a dinâmica de condensados gêmeos constitui um subregime integrável do problema geral em poço triplo.

Então, vamos analisar detalhadamente o problema de condensados gêmeos, tendo em vista que os dois condensados idênticos acoplados podem ser encarados como um único condensado espacialmente distribuído em dois poços do potencial, acoplado a outro condensado em um terceiro poço, de maneira que este sistema se assemelha bastante ao modelo de um condensado em poço duplo, notando que ambos são sistemas clássicos de um grau de liberdade efetivo e integráveis.

Como as equações (6.1.3.a) e (6.1.3.b) são equivalentes, mais uma vez devido à equivalência dinâmica dos três poços do potencial de aprisionamento, podemos estudar apenas uma e estender os resultados a outra. Por conveniência, vamos trabalhar apenas com (6.1.3.a) daqui em diante.

A evolução do sistema é melhor visualizada nas variáveis canônicas de ângulo e ação, que têm a interpretação imediata de diferença de fase dos condensados e populações médias, respectivamente. No caso (6.1.1.a), com $w_1 = w_2 = w$, as transformações (5.2.7) assumem a forma:

$$\begin{cases} J_1 = J_2 = \frac{N|w|^2}{2|w|^2+1}; \\ \phi_1 = \phi_2 = -\arctan\left(\frac{\text{Im}w}{\text{Re}w}\right). \end{cases} \quad (6.1.4)$$

Conhecendo $J_1 = J_2$, sabemos que a população do terceiro poço é $N - 2J_1$, enquanto $\phi_1 = \phi_2$ é a diferença de fase entre os condensados gêmeos e o terceiro condensado.

Exploramos ainda mais as semelhanças entre o sistema de condensados gêmeos e o condensado em poço duplo, verificando o estado coerente que representa o sistema com $w_1 = w_2$. A fim de comparação, reescrevemos aqui os estados coerentes normalizados associados às representações simétricas de $SU(3)$ e a $SU(2)$, no qual todas representações são simétricas por permutação de partículas em problemas de muitos bósons.

$$|N; \vec{w}\rangle = \sum_{0 \leq j+k \leq N} \sqrt{\frac{N!}{j!k!(N-j-k)!}} \frac{w_1^j w_2^k}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{\frac{N}{2}}} |j, k, N-j-k\rangle; \quad (6.1.5)$$

$$|J; \tau\rangle = \sum_{M=-J}^J \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!(J-M)!}} \frac{\tau^{J+M}}{(|\tau|^2 + 1)^J} |J, M\rangle. \quad (6.1.6)$$

Em (6.1.6), $|J, M\rangle$ são os conhecidos estados da base de momento angular bem definido, associados à representação indexada por J de $SU(2)$ e com autovalor M no operador J'_z . Utilizando a teoria de pseudo-spin de Schwinger [Sch65], podemos reescrever estes estados na base de Fock e os operadores

geradores de $SU(2)$ em termos de operadores de criação e aniquilação bosônicos nos modos locais do modelo de poço triplo:

$$|J, M\rangle = \left| \frac{n_1 + n_2}{2}, \frac{n_1 - n_2}{2} \right\rangle \rightarrow |n_1, n_2\rangle = |J + M, J - M\rangle; \quad (6.1.7)$$

$$J'_z \equiv \frac{a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2}{2} = Q_1, \quad J'_x \equiv \frac{a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1}{2} = \frac{P_2}{2} \quad \text{e} \quad J'_y \equiv i \frac{a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2}{2} = \frac{J_z}{2}. \quad (6.1.8)$$

Aqui J'_x , J'_y , J'_z são os conhecidos geradores de $SU(2)$. Já $a_1^\dagger$ (a_1) e $a_2^\dagger$ (a_2) são os operadores de criação (aniquilação) nos dois primeiros modos locais do condensado em poço triplo e Q_1 , P_2 e J_z são três dos geradores de $SU(3)$ que formam uma subálgebra isomorfa a $su(2)$. Ainda lembrando, n_1 e n_2 são as populações dos dois primeiros poços, autovalores de $\hat{n}_1 = a_1^\dagger a_1$ e $\hat{n}_2 = a_2^\dagger a_2$, respectivamente, com auto-estados estados simultâneos $|n_1, n_2\rangle$.

Fazendo $w_1 = w_2 = w$ em (6.1.5), para a condição de poços gêmeos, e $\tau = \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} = 1$ ($\theta = \frac{\pi}{2}$ e $\phi = 0$) em (6.1.6), temos:

$$|N; w_1 = w_2 = w\rangle = \sum_{0 \leq j+k \leq N} \sqrt{\frac{N!}{j!k!(N-j-k)!}} \frac{w^{j+k}}{(2|w|^2 + 1)^{\frac{N}{2}}} |j, k, N-j-k\rangle; \quad (6.1.5')$$

$$|J; \tau = 1\rangle = \frac{1}{2^J} \sum_{M=-J}^J \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!(J-M)!}} |J, M\rangle. \quad (6.1.6')$$

A condição $\tau = 1$ entre dois condensados descritos por (6.1.6') significa que eles estão em fase, $\phi = 0$, e com mesma população. Notamos isto reescrevendo $|J; \tau = 1\rangle$ com a ajuda de (6.1.7):

$$|J; \tau = 1\rangle = \frac{1}{2^{\frac{N'}{2}}} \sum_{n_1+n_2=N'} \sqrt{\frac{N'!}{n_1!n_2!}} |n_1, n_2\rangle; \quad (6.1.9)$$

onde usamos as substituições $J = \frac{n_1+n_2}{2} \equiv \frac{N'}{2}$ e $M = \frac{n_1-n_2}{2}$. Então, é fácil ver que:

$$\begin{aligned} \langle \frac{N'}{2}; \tau = 1 | \hat{n}_1 | \frac{N'}{2}; \tau = 1 \rangle &= \frac{1}{2^{N'}} \sum_{n'_1+n'_2=N'} \sum_{n_1+n_2=N'} \frac{N'!}{\sqrt{n_1!n_2!n'_1!n'_2!}} n_1 \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \\ &= \frac{1}{2^{N'}} \sum_{n_1+n_2=N'-1} \frac{N'!}{n_1!n_2!} = \frac{N'}{2} = \langle \frac{N'}{2}; \tau = 1 | \hat{n}_2 | \frac{N'}{2}; \tau = 1 \rangle. \end{aligned} \quad (6.1.10)$$

Logo, o estado $|J; \tau = 1\rangle$ é o esperado para os dois primeiros modos em (6.1.5'). Isto fica ainda mais claro se fazemos neste a substituição de índices $j = J + M$ e $k = J - M$:

$$|N; w_1 = w_2 = w\rangle = \sum_{2J=0}^N \sqrt{\frac{N!}{(N-2J)!(2J)!}} \frac{w^{2J}}{(2|w|^2 + 1)^{\frac{N}{2}}} \sum_{M=-J}^J \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!(J-M)!}} |J + M, J - M, N - 2J\rangle. \quad (6.1.5'')$$

Usando (6.1.7) e (6.1.6'), podemos reescrever (6.1.5'') ainda como:

$$\begin{aligned}
|N; w_1 = w_2 = w\rangle &= \sum_{2J=0}^N \sqrt{\frac{N!}{(N-2J)!(2J)!}} \frac{w^{2J}}{(2|w|^2+1)^{\frac{N}{2}}} \sum_{M=-J}^J \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!(J-M)!}} |J, M\rangle \otimes |N-2J\rangle \\
&= \sum_{2J=0}^N \sqrt{\frac{N!}{(N-2J)!(2J)!}} \frac{(2w^2)^J}{(2|w|^2+1)^{\frac{N}{2}}} |J; \tau = 1\rangle \otimes |N-2J\rangle.
\end{aligned} \tag{6.1.5'''}$$

Logo, vemos que o estado coerente $|N; w_1 = w_2\rangle$ é uma superposição de estados coerentes de $SU(2)$ nas representações com $2J = N' = 0, 1, \dots, N$ para os condensados localizados nos dois primeiros poços com mesma população e em fase. Então, podemos encarar o sistema como bipartite, onde o primeiro subsistema é um estado coerente de parâmetro fixo $\tau = 1$ em $(N+1)$ possíveis representações, com N' indicando o número de partículas no estado coerente de $SU(2)$, e o segundo subsistema é um estado de número de partículas bem definido, com o restante das partículas do sistema completo.

Agora fazemos uma nova mudança de índices, com $N = 2J'$ e $2J = J' + M'$, além de reescalar a variável w , fazendo $\tau' = \sqrt{2}w$ em (6.1.5'''):

$$|N; w_1 = w_2 = w\rangle = \sum_{M'=-J'}^{J'} \sqrt{\frac{(2J')!}{(J'-M')!(J'+M')!}} \frac{\tau'^{J'+M'}}{(1+|\tau'|^2)^{J'}} |J'+M'; \tau = 1\rangle \otimes |J' - M'\rangle. \tag{6.1.5^{IV}}$$

Comparando (6.1.5^{IV}) com (6.1.6) e (6.1.7), temos:

$$|N; w_1 = w_2 = w\rangle = |J'; \tau'\rangle = \sum_{M'=-J'}^{J'} \sqrt{\frac{(2J')!}{(J'+M')!(J'-M')!}} \frac{\tau'^{J'+M'}}{(1+|\tau'|^2)^{J'}} |J', M'\rangle. \tag{6.1.11}$$

Ou seja, o estado coerente de condensados gêmeos em $SU(3)$ é um estado coerente de $SU(2)$ de parâmetro:

$$\tau' = \sqrt{2}w = \sqrt{\frac{2J_1}{N-2J_1}} e^{-i\phi_1}; \tag{6.1.12}$$

cujo valor absoluto é a raiz quadrada da população dos condensados gêmeos dividida pela população do terceiro poço, ao passo que sua fase é a diferença de fase também entre os gêmeos e o condensado solitário. Os estados $|J', M'\rangle$, para J' fixo, formam agora a base de um espaço que carrega uma representação irredutível se $SU(2)$ e diagonalizam simultaneamente os operadores de número total de partículas $\hat{N}$, com autovalores $N = 2J'$, e de balanço de população J_z'' entre os condensados gêmeos e o modo solitário, este operador possui autovalores $M' = \frac{2n_1-n_3}{2} = -J', -J' + 1, \dots, J' - 1, J'$.

$$\begin{cases} \hat{N}|J', M'\rangle = (a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + a_3^\dagger a_3)|J', M'\rangle = 2J'|J', M'\rangle; \\ J_z''|J', M'\rangle = \frac{(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) - a_3^\dagger a_3}{2}|J', M'\rangle = M'|J', M'\rangle. \end{cases} \tag{6.1.13}$$

Lembrando que $a_3^\dagger (a_3)$ é o operador de criação (aniquilação) de uma partícula localizada no terceiro poço do potencial de aprisionamento.

O espaço de fase generalizado para os estados coerentes de $SU(2)$ é topologicamente equivalente a S^2 , a superfície esférica em três dimensões, parametrizada naturalmente por dois ângulos $\theta' \in [0, \frac{\pi}{2}]$ e $\phi_1 \in [0, 2\pi)$. Estes podem ser vistos como os ângulos usuais das coordenadas esféricas, exceto que,

por conveniência, tomamos a origem de θ' no pólo sul ou no semi-eixo z negativo. Considerando uma esfera de raio unitário, dizemos que estes ângulos parametrizam a esfera de Bloch [ACGT72]:

$$\tau' = \tan \frac{\theta'}{2} e^{-i\phi_1}. \quad (6.1.14)$$

A componente z de um ponto sobre a esfera representa o balanço semiclássico de população, pois podemos mostrar que $\frac{\langle J'_z | J'_z | J'; \tau' \rangle}{J'} = \frac{4\langle \hat{n}_1 \rangle - N}{N} = -\cos \theta' \equiv I_z$, enquanto as componentes x e y indicam a diferença de fase entre o condensado gêmeos e o terceiro modo, por meio do ângulo ϕ_1 .

Poderíamos ter previsto que I_z e ϕ_1 parametrizam a superfície esférica S^2 , apenas analisando os estados clássicos limítrofes. Em $\phi_1 = 0$ e $\phi_1 = 2\pi$, independentemente do valor de I_z , temos estados clássicos indistintos, já que a diferença de fase somente está definida em uma região de período 2π . Agora, os estados com $I_z = \pm 1$ devem independender do valor de ϕ_1 , pois não faz sentido falarmos de diferença de fase entre condensados quando um deles não tem partículas. Portanto, devido a periodicidade de ϕ_1 e a indefinição desta fase nos extremos do intervalo de I_z , vemos que estas grandezas devem parametrizar uma casca esférica.

6.1.1 Elementos de Matriz do Hamiltoniano

A dimensão do espaço $\mathbb{B}_N$ cresce com o quadrado do número de partículas N , segundo (8.1.83). Portanto, os operadores sobre este espaço são representados por matrizes cujo número de elementos cresce proporcionalmente a N^4 . Devido a esta escala apenas polinomial, podemos resolver numericamente com relativa facilidade o problema completo de autovalores dos observáveis do sistema para N significativamente grande.

Diferentemente da dinâmica clássica do modelo, onde somente duas coordenadas complexas do espaço de fase descrevem o estado do sistema e têm evolução determinada por duas equações diferenciais complexas não lineares, a dinâmica quântica do estado é descrita por $\dim \mathbb{B}_N$ coeficientes complexos e cada um deles têm a evolução determinada por uma equação linear complexa proveniente diretamente da equação de Schrödinger.

Para N suficientemente grande, onde o resultado análogo clássico aproxima-se do exato, o método de aproximação semiclássica supera computacionalmente a abordagem quântica exata, pois naquele o número de parâmetros a serem determinados em cada passo de tempo é constante com o número total de partículas, apresentando comportamento distinto da dimensão do espaço de Hilbert. É sempre interessante notar que o número de variáveis necessário para tratar o problema no limite macroscópico $N \rightarrow \infty$ é constante, em nosso caso precisamos apenas de quatro variáveis reais, ao passo que o número de estados quânticos presentes em $\mathbb{B}_N$ continua a crescer de forma ilimitada.

No intuito de comparar as aproximações semiclássicas, presentes nas próximas seções, ao resultado quântico exato, vamos agora encontrar a ação do Hamiltoniano de muitas partículas (3.2.20) nos estados da base $\{|n_1, n_2, n_3\rangle\}$, com o auxílio de (3.2.1) e (4.1.15.a)-(4.1.15.b):

$$\begin{aligned} \hat{H}|n_1, n_2, n_3\rangle &= \Omega' \sum_{i \neq j} \sqrt{(n_i + 1)n_j} |n_1 + \delta_{1,i} - \delta_{1,j}, n_2 + \delta_{2,i} - \delta_{2,j}, n_3 + \delta_{3,i} - \delta_{3,j}\rangle \\ &+ \kappa \left\{ \left[\sum_i n_i(n_i - 1) \right] - N \left(\frac{N}{3} - 1 \right) \right\} |n_1, n_2, n_3\rangle \\ &- 2\Lambda \sum_{i,j,k} \widetilde{n_i} \sqrt{(n_j + 1)n_k} |n_1 + \delta_{1,j} - \delta_{1,k}, n_2 + \delta_{2,j} - \delta_{2,k}, n_3 + \delta_{3,j} - \delta_{3,k}\rangle. \end{aligned} \quad (6.1.15)$$

Aqui usamos novamente a notação $\widetilde{\sum}_{i,j,k}$ para indicar a soma sobre índices não repetidos. Note que o Hamiltoniano somente acopla estados com no máximo uma partícula trocada entre os modos locais. Fazendo uso da relação de ortonormalidade (4.1.16), podemos escrever os elementos de matriz de $\hat{H}$:

$$\begin{aligned} \langle n'_1, n'_2, n'_3 | \hat{H} | n_1, n_2, n_3 \rangle &= \widetilde{\sum}_{i,j,k} (\Omega' - 2\Lambda n_i) \sqrt{(n_j + 1) n_k} \delta_{n'_i, n_i} \delta_{n'_j, n_j+1} \delta_{n'_k, n_k-1} \\ &+ \kappa \left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 - \frac{N^2}{3} \right) \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \delta_{n'_3, n_3}. \end{aligned} \quad (6.1.16)$$

Empregando (6.1.16), podemos encontrar numericamente as auto-energias e os estados estacionários do modelo com a precisão desejada, apenas diagonalizando a representação matricial de $\hat{H}$ para um valor de N fixo. Então, podemos obter facilmente a evolução quântica exata de qualquer estado $|\psi\rangle \in \mathbb{B}_N$, com o objetivo de compará-la aos cálculos realizados utilizando o PVDT.

6.1.2 Análise do Sistema de Condensados Gêmeos

Vimos na seção 5.3 que a grande maioria dos pontos de equilíbrio do sistema análogo clássico associado ao condensado em potencial de poço triplo é encontrada sob as três condições $w_1 = 1$, $w_2 = 1$ e $w_1 = w_2$. Estas três restrições representam os subespaços do espaço de fase generalizado onde dois modos do condensado possuem mesma população e fase. Na seção anterior notamos que a dinâmica do modelo pode ser limitada a um destes subespaços, escolhendo uma condição inicial que respeita uma das três restrições.

Este subregime integrável do condensado em três poços, intitulado de sistema de condensados gêmeos, é bastante análogo ao encontrado para um condensado aprisionado em poço duplo, pois o sistema tem efetivamente apenas dois modos e pode ser descrito por um estado coerente de $SU(2)$, como mostrado em (6.1.11).

Devemos lembrar sempre que, devido à simetria de rotação do modelo, as condições $w_1 = 1$, $w_2 = 1$ e $w_1 = w_2$ são equivalentes. Portanto, um ponto fixo encontrado para uma condição sempre é acompanhado de dois pontos com mesmas características localizados nas outras restrições de condensados gêmeos, exceto o ponto de equilíbrio de localização fixa nos parâmetros $w_1 = w_2 = 1$, que está na interseção dos três subespaços.

Enfim, por simetria, a dinâmica de condensados gêmeos apresenta-se de forma idêntica em três regiões do espaço de fase e, por simplicidade, vamos estudar mais uma vez apenas o caso $w_1 = w_2$, sem perda de generalidade.

Nos cálculos subseqüentes deste trabalho, escolhemos o sistema de unidades tal que $\hbar = |\Omega| = 1$, lembrando que segundo as hipóteses do modelo temos geralmente $\Omega < 0$, como vimos em (3.1.16). Esta escolha significa tomar o valor absoluto da taxa de tunelamento como a unidade de frequência e energia para o sistema.

Supondo que o termo $2\Lambda(N-1)$, encontrado em (3.1.26'), não é suficientemente grande para alterar o sinal da taxa efetiva de tunelamento, de forma que $\Omega' < 0$, podemos dividir a análise da dinâmica em apenas dois regimes de interação. De acordo com (5.3.12) e (5.3.21), o regime $\chi, \mu > 0$ ($\chi, \mu < 0$) representa bósons condensados interagindo atrativamente (repulsivamente), condição equivalente a $\kappa, \Lambda < 0$ ($\kappa, \Lambda > 0$) e $\Omega < 0$.

Doravante, exceto onde especificado, utilizamos para nossos resultados o número total de partículas fixo em $N = 30$. Escolhemos este valor para tornar os cálculos quânticos numéricos não muito onerosos,

já que um espaço de Hilbert de dimensão 496 não é demasiadamente grande ou pequeno para as ferramentas computacionais simples atuais. No entanto, três dezenas de partículas pode ser um número bastante pequeno para que a aproximação semiclássica utilizando o PVDT e os estados coerentes seja quantitativamente adequada. Contudo, um dos objetivos deste trabalho é quantificar o desvio entre os cálculos clássicos e quânticos, identificando as origens deste desvio. Neste escopo, $N = 30$ se mostrou uma boa escolha.

Primeiramente vamos estudar o caso atrativo. Na figura 6.1.1 mostramos várias órbitas do sistema de condensados gêmeos sobre a esfera de Bloch para diversos valores de $\chi > 0$, mas ainda desconsiderando as colisões cruzadas. As trajetórias foram obtidas pela integração numérica da equação diferencial (6.1.3.a), seguida das transformações para as variáveis angulares sobre a esfera de Bloch θ' e ϕ_1 , dadas por (6.1.12) e (6.1.14). Nos três eixos coordenados do gráfico temos as médias normalizadas dos operadores sobre os dois modos efetivos do sistema:

$$\begin{cases} I_z & \equiv -\cos \theta' = \frac{\langle J'; \tau' | J_z'' | J'; \tau' \rangle}{J''} = \frac{4\langle \hat{n}_1 \rangle - N}{N}; \\ I_x & \equiv \sin \theta' \cos \phi_1 = \frac{\langle J'; \tau' | J_x'' | J'; \tau' \rangle}{J''}; \\ I_y & \equiv \sin \theta' \sin \phi_1 = \frac{\langle J'; \tau' | J_y'' | J'; \tau' \rangle}{J''}. \end{cases} \quad (6.1.17)$$

Devemos lembrar que os ângulos θ' e ϕ_1 são definidos sobre a esfera de maneira semelhante aos ângulos das coordenadas esféricas, exceto que o ângulo θ' tem origem no semi-eixo I_z negativo^{6.2}.

Cada esfera na figura 6.1.1 representa a dinâmica do sistema para um valor distinto de χ . Os pontos de equilíbrio estável são marcados com círculos amarelos e os pontos fixos instáveis, **em relação à dinâmica completa do sistema**, são marcados com cruces vermelhas. Note que mostramos apenas a face das esferas destacando a região próxima a $\phi_1 = 0$, mais interessante no regime atrativo. Como vimos na figura 5.3.2, três dos quatro pontos fixos possíveis na reta restrita aos reais $w_1 = w_2$ são encontrados para $w_1 > 0$, equivalente a $\phi_1 = 0$. Além disso, a bifurcação dinâmica em $\chi_+ \cong 1,9708$ é bem observada deste ponto de vista, pois também acontece sobre o meridiano $\phi_1 = 0$.

No gráfico 6.1.1.a temos a dinâmica para $\chi = 1,5$, valor sensivelmente inferior a χ_+ . Nesta figura vemos apenas o ponto de equilíbrio estável $w_1 = w_2 = 1$ ou 1^+ , o estado de mínima energia segundo a figura 5.3.6. Note que todo subespaço de condensados gêmeos apresenta somente órbitas no regime de **Oscilação Josephson** (OJ); ou seja, os bósons oscilam, sem um poço de potencial preferencial, entre os modos locais gêmeos e o terceiro modo, analogamente ao regime homônimo encontrado no modelo de dois modos na seção 2.1. O ponto fixo 2^+ , presente para todo $\chi > 0$, está localizado no meridiano $\phi_1 = \pi$ e não pode ser visto nesta figura, como esperado dos cálculos da seção 5.3, pois para este ponto real $w_1 = w_2 < 0$.

Na figura 6.1.1.b vemos várias trajetórias sobre a esfera de Bloch para $\chi = 1,97$, valor ligeiramente inferior a χ_+ . Note que as órbitas se alongam na direção I_z e algumas delas formam aproximadamente um vértice, indicando claramente o local onde acontece a bifurcação. Dois novos pontos de equilíbrio são encontrados quando $\chi = 1,98 > \chi_+$, como mostrado no gráfico 6.1.1.c, juntamente com uma separatriz que limita dois novos tipos de órbitas no subsistema. O novo ponto fixo instável 3^+ origina a separatriz, enquanto vemos surgir as primeiras órbitas de **auto-aprisionamento macroscópico** (AAM) ao redor do ponto fixo estável 4^+ . As trajetórias periódicas próximas de 4^+ estão localizadas preferencialmente no hemisfério inferior da esfera, oscilando em torno e valores negativos de I_z , que segundo (6.1.17) representam depleção populacional nos condensados gêmeos. As novas trajetórias

^{6.2}Definição idêntica à encontrada no modelo de dois modos, na figura 2.1.3.

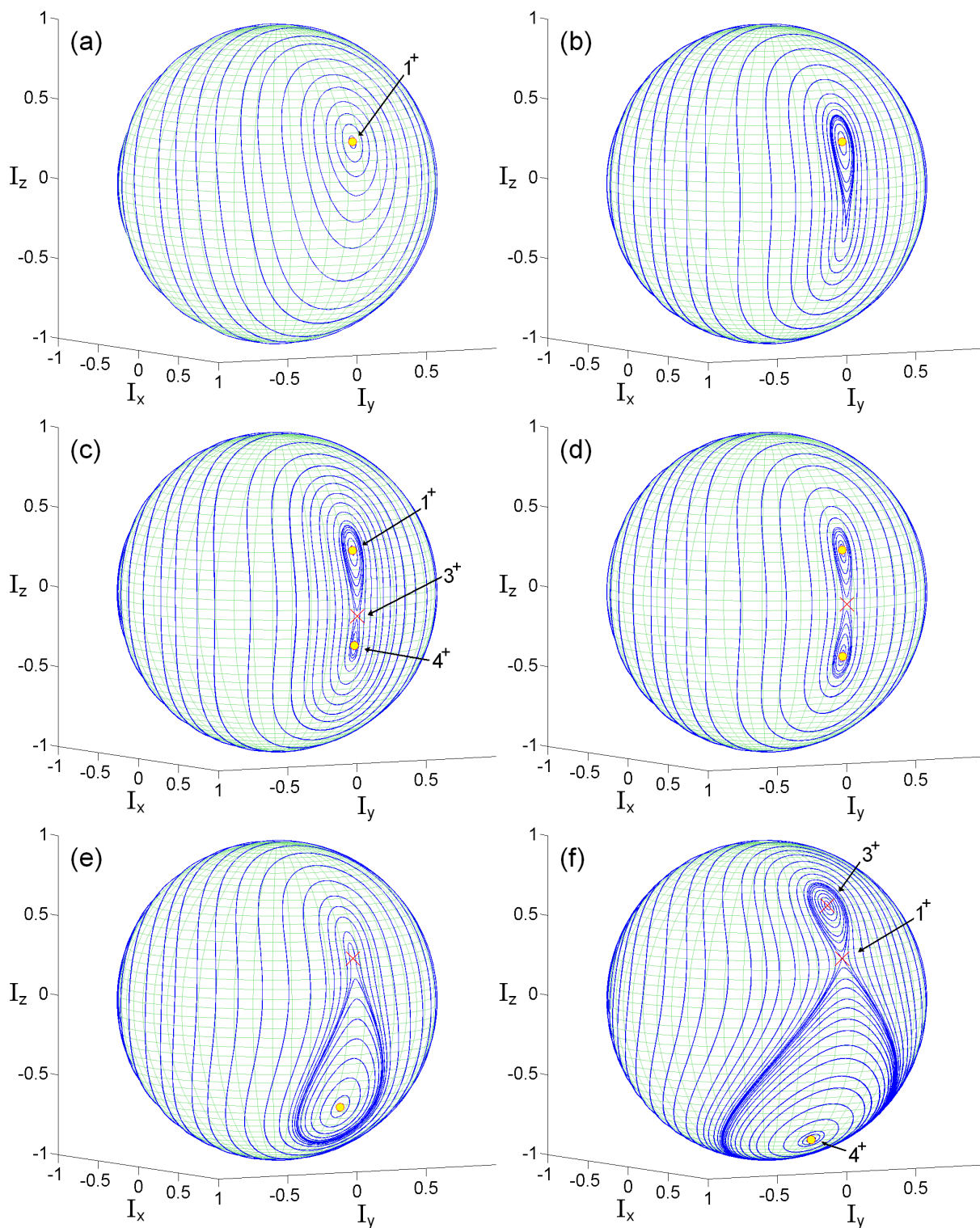


Figura 6.1.1: Órbitas clássicas do sistema de condensados gêmeos sobre a esfera de Bloch para vários valores positivos do parâmetro de autocolisão χ , mas desconsiderando as colisões cruzadas. A dinâmica de $N = 30$ partículas é descrita em cada esfera para diversas condições iniciais. Conservando fixos $\Omega = -1$ e $\mu = 0$, escolhemos os seguintes valores para o parâmetro de autocolisão: (a) $\chi = 1, 5$, (b) $\chi = 1, 97$, (c) $\chi = 1, 98$, (d) $\chi = 2$, (e) $\chi = 2, 25$ e (f) $\chi = 3$. Os círculos amarelos representam pontos fixos estáveis, enquanto as cruzes vermelhas denotam os pontos de equilíbrio instáveis em relação a dinâmica completa do modelo de poço triplo.

periódicas ao redor de 1^+ , apesar da localização preferencial no hemisfério superior, não representam órbitas de AAM, pois devemos lembrar que o ponto fixo $w_1 = w_2 = 1$ simboliza a situação na qual todos os modos locais estão igualmente populados e portanto as órbitas próximas são apenas perturbações desta disposição. Quando os três poços estão igualmente populados, com $\langle \hat{n}_1 \rangle = \langle \hat{n}_2 \rangle = \langle \hat{n}_3 \rangle = \frac{N}{3}$, obtemos:

$$I_z(w_1 = w_2 = 1) = \frac{4\frac{N}{3} - N}{N} = \frac{1}{3}. \quad (6.1.18)$$

Logo, oscilações em torno de $I_z = \frac{1}{3}$ não significam AAM, mas comportamento populacional não preferencial do condensado em relação aos três modos locais.

Quando $\chi = 2$ acontece a degenerescência do estado fundamental clássico, como exposto na figura 5.3.6, os estados 1^+ e 4^+ possuem a mesma energia nesta configuração de parâmetros. Para maiores valores da taxa de autocolisão, conservando $\mu = 0$, há a troca do estado fundamental e os três estados equivalentes 4^+ passam a representar os novos mínimos de energia do sistema. Esta permuta de estado fundamental no limite semiclássico indica claramente um transição de fase no modelo, que exploramos mais detalhadamente em seções posteriores. O gráfico 6.1.1.d exibe as órbitas características do sistema no subespaço preferencial de condensados gêmeos na configuração degenerada, onde é clara a simetria de reflexão das trajetórias em relação ao plano $I_z = 0$.

Retornando à equação cúbica (5.3.24), para pontos fixos sobre a reta real $w_1 = w_2$, excluindo uma vez o ponto de equilíbrio $w_1 = w_2 = 1$, podemos encontrar a região do espaço de parâmetros de colisão onde ocorre a coalescência dos pontos fixos 1^+ e 3^+ . Fazendo $w_1 = 1$ em (5.3.24), obtemos:

$$\chi = \frac{9}{4} + \mu. \quad (6.1.19)$$

Esta reta no espaço de parâmetros, exibida na figura 5.3.5, representa a região de valores das taxas de colisão onde os quatro pontos de equilíbrio 1^+ e 3^+ degeneram no mesmo ponto $w_1 = w_2 = 1$. Excepcionalmente nesta configuração, o sistema possui apenas três conjuntos de pontos fixos no regime pós-bifurcação. Também é interessante notar que após a coalescência, para valores tais que $\chi \geq \frac{9}{4} + \mu$, o ponto fixo 1^+ torna-se instável, como já demonstrado na equação (5.4.27), e passa sua localização à separatriz na esfera de Bloch.

Na figura 6.1.1.e vemos várias órbitas do sistema para o valor de coalescência $\chi = \frac{9}{4}$, quando $\mu = 0$. Note o aumento da região tomada por trajetórias de AAM em torno de 4^+ e o desaparecimento das órbitas periódicas delimitadas pela separatriz em torno de 1^+ .

Se aumentamos ainda mais o valor da taxa de autocolisão, como no gráfico 6.1.1.f para $\chi = 3$, notamos que o ponto 3^+ (4^+) continua seu movimento em direção ao pólo norte (sul) da esfera. A região de AAM no terceiro modo local ao redor de 4^+ tem seu volume no espaço de fase expandido mais uma vez. Em torno de 3^+ surgem novas trajetórias periódicas delimitadas pela separatriz, representando uma nova classe de órbitas de AAM, na qual a dinâmica populacional oscila em torno de valores relativamente elevados de $I_z > 0$, representando preferência pelos modos locais gêmeos e depleção no terceiro modo.

Note que, apesar das órbitas periódicas ao redor indicarem o contrário, o ponto 3^+ é instável em relação à dinâmica quadridimensional completa do modelo. Ou seja, como vimos na seção 5.4, um dos autovalores λ^2 de BC é negativo, indicando que dentro do espaço de fase quadridimensional há um plano preferencial onde os pontos de equilíbrio 3^+ são centros estáveis. No entanto, o outro valor positivo de λ^2 torna a dinâmica instável na proximidade do ponto fixo, pois 3^+ comporta-se como um ponto de sela nas duas direções restantes do espaço. Portanto, o plano preferencial, cuja dinâmica

próxima a 3^+ é regida pelo autovalor negativo, trata-se justamente do subespaço dotado do regime de condensados gêmeos.

Logo, esperamos que uma condição inicial próxima a 3^+ , mas não pertencente aos subespaços do regime de condensados gêmeos, não apresente uma órbita periódica, de forma que a região de estabilidade deste centro tenha medida nula no espaço de fase completo, impossibilitando o acesso experimental a esta classe de AAM.

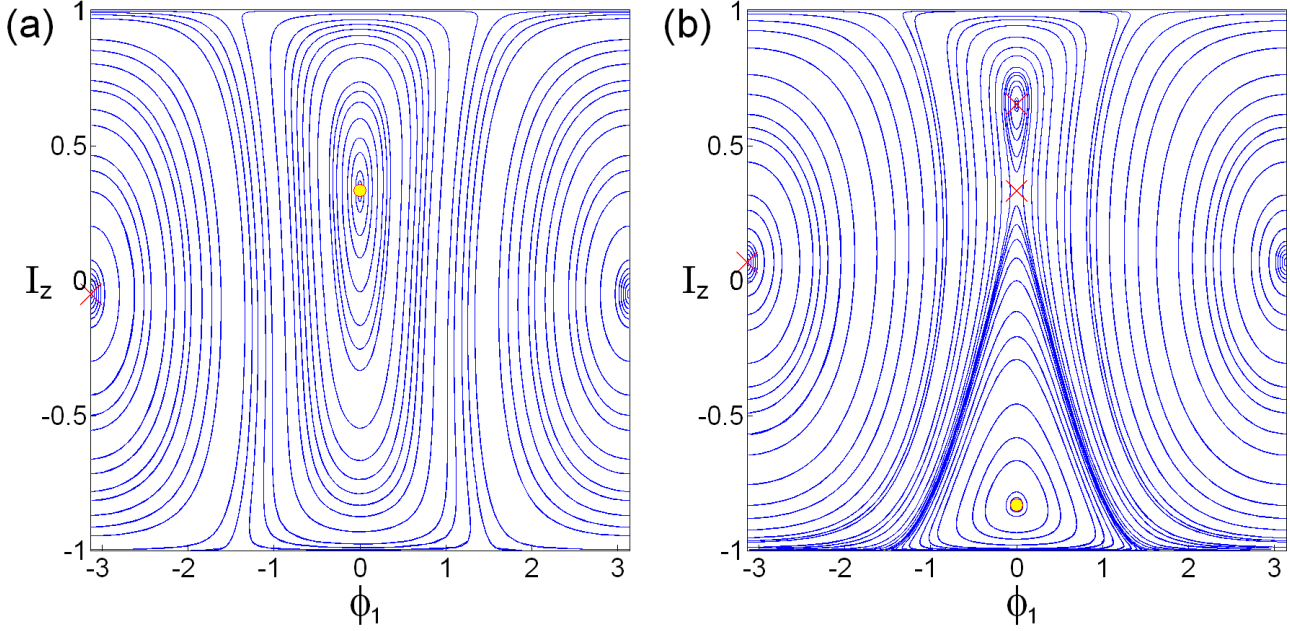


Figura 6.1.2: Projeções cilíndricas das trajetórias do sistema de condensados gêmeos para $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi > 0$ e $\mu = 0$. As órbitas são representadas no plano para dois conjuntos de parâmetros já encontrados na figura 6.1.1: (a) $\chi = 1,5$ e (b) $\chi = 3$.

O ponto fixo 2^+ não foi observado na figura 6.1.1, pois é o único localizado no meridiano $\phi_1 = \pi$ da esfera de Bloch. Para observarmos a dinâmica próxima a este ponto, fazemos as projeções cilíndricas das órbitas para os regimes de colisão anterior e posterior à bifurcação. No gráficos 6.1.2.a e 6.1.2.b exibimos a dinâmica planificada para $\chi = 1,5$ e $\chi = 3$, respectivamente, conservando $\mu = 0$. Comparando estes dois gráficos, vemos que não há grande alteração na forma das trajetórias ao redor de 2^+ em função da taxa de autocolisão, diferentemente das trajetórias que cruzam o meridiano $\phi_1 = 0$.

As órbitas periódicas em torno de 2^+ também apresentam a dinâmica populacional de OJ, pois é visível que os bósons tunelam quase em sua totalidade entre os modos locais gêmeos e o terceiro modo. No entanto, vale aqui a mesma análise que fizemos anteriormente para os pontos fixos 3^+ no regime após a coalescência; ou seja, novamente o regime de condensados gêmeos apresenta-se em um subespaço preferencial, no qual os autovalores da matriz A de (5.4.8) são imaginários quando calculados nos pontos 2^+ , caracterizando um centro estável apenas neste plano. Contudo, na dinâmica completa do modelo, os pontos de equilíbrio 2^+ são instáveis para os valores empregados dos parâmetros de colisão.

Outro fato importante a ser notado na figura 6.1.2 é a aparente presença de uma separatriz, limitando a região do subespaço de fase entre as órbitas em torno de 2^+ e as outras trajetórias características da dinâmica de OJ. Comparando as figuras 6.1.1.a e 6.1.2.a, fica claro que as órbitas em torno 2^+ são da mesma família presente em torno de 1^+ . A aparente separação da família de trajetórias de OJ presente

na projeção 6.1.2.a é causada pela visualização do subespaço de fase em uma forma topológica não adequada. Como vimos na seção anterior, todos pontos com $I_z = 1$ ($I_z = -1$) devem ser identificados como o mesmo estado, independentemente do valor de ϕ_1 que é uma variável de período 2π , de maneira que a topologia correta do espaço parametrizado por estas duas variáveis é uma superfície esférica.

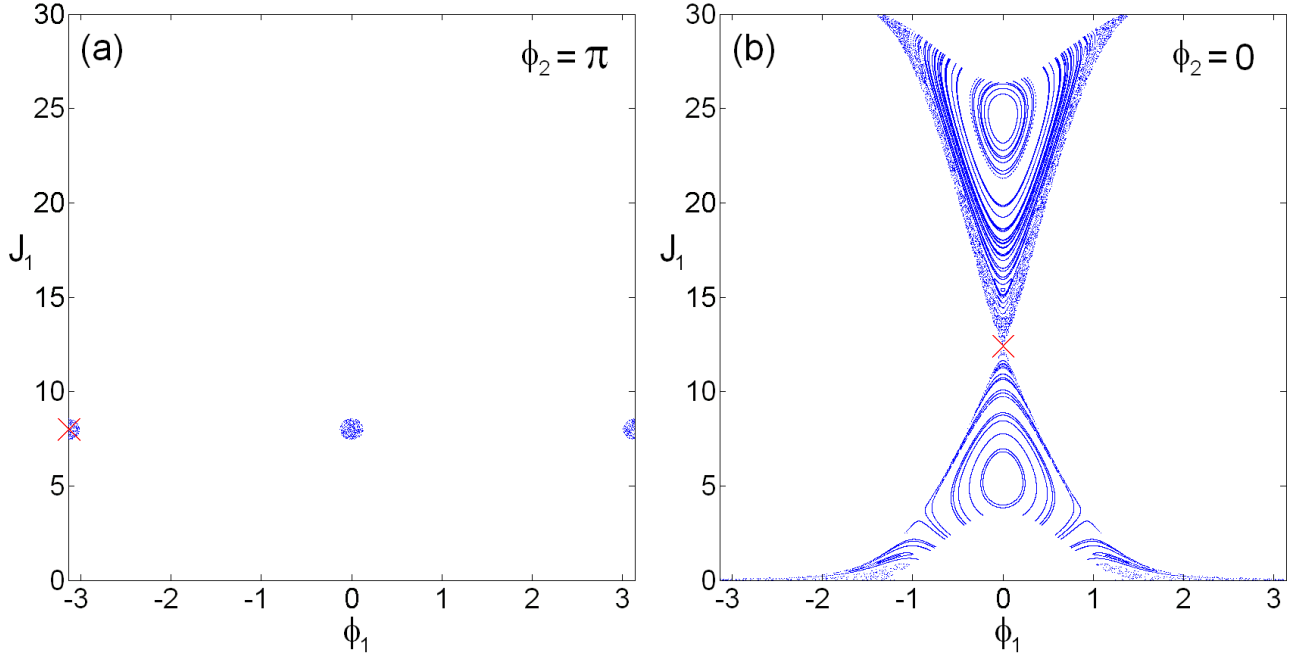


Figura 6.1.3: Seções de Poincaré exibindo a dinâmica nas proximidades dos pontos fixos 2^+ e 3^+ para $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = 3$ e $\mu = 0$. Em (a) temos a seção em $\phi_2 = \pi$ para uma energia próxima do ponto fixo 2^+ , cuja projeção no plano $\phi_1 \times J_1$ é indicada por uma cruz vermelha. À direita mostramos a seção $\phi_2 = 0$ para a energia do ponto fixo 3^+ , também presente no gráfico.

Para demonstrar as afirmações sobre a estabilidade dos pontos de equilíbrio 2^+ e 3^+ na dinâmica completa do sistema, produzimos as seções de Poincaré expostas na figura 6.1.3, integrando numericamente as equações completas de movimento (5.2.5). No gráfico 6.1.3.a temos uma seção em $\phi_2 = \pi$ para trajetórias de energia bastante próxima a do ponto 2^+ , para parâmetros de colisão $\chi = 3$ e $\mu = 0$. Esta seção projetada no plano $\phi_1 \times J_1$, juntamente com a localização do ponto de equilíbrio, mostra claramente que a dinâmica próxima a 2^+ é caótica, diferentemente do que poderíamos inferir observando o gráfico 6.1.2.b.

A seção de Poincaré do gráfico 6.1.3.b mostra dinâmica do sistema próxima do ponto fixo 3^+ para os parâmetros de colisão $\chi = 3$ e $\mu = 0$. A seção é tomada em $\phi_2 = 0$ para condições iniciais de mesma energia do ponto fixo 3^+ . Note que novamente o ponto de equilíbrio instável está localizado em uma região de regime caótico, o que era esperado dos cálculos da seção 5.4, mas não aparente na subdinâmica de condensados gêmeos mostrada na figura 6.1.1.f.

Na figura 6.1.3 exemplificamos pela primeira vez regimes dinâmicos caóticos presentes no modelo de três modos. Diferentemente do modelo de dois modos da seção 2.1, o modelo do condensado em poço triplo não é integrável e exibe caos em sua aproximação semiclássica. Como definido na seção 8.3 dos apêndices, modelos puramente quânticos que possuem caos em seu análogo clássico são aqueles em que dizemos haver caos quântico. Lembramos que a correspondência entre as integrabilidades quântica e clássica, também devidamente definidas na seção 8.3, são garantidas pela consistência entre

as definições dos operadores constantes de movimento não completamente degenerados e as funções constantes de movimento clássicas. Portanto, apenas observando as seções de Poincaré do modelo de poço triplo, podemos afirmar que não existe outro observável que possa ser mensurado simultaneamente ao Hamiltoniano $\hat{H}$, exceto o Casimir quadrático de $SU(3)$ e outros operadores invariantes dependentes deste. Se existissem dois operadores constantes de movimento não invariantes, contando com $\hat{H}$, então a dinâmica análoga clássica do modelo de três modos, que possui dois graus de liberdade, seria integrável e obviamente não apresentaria caos.

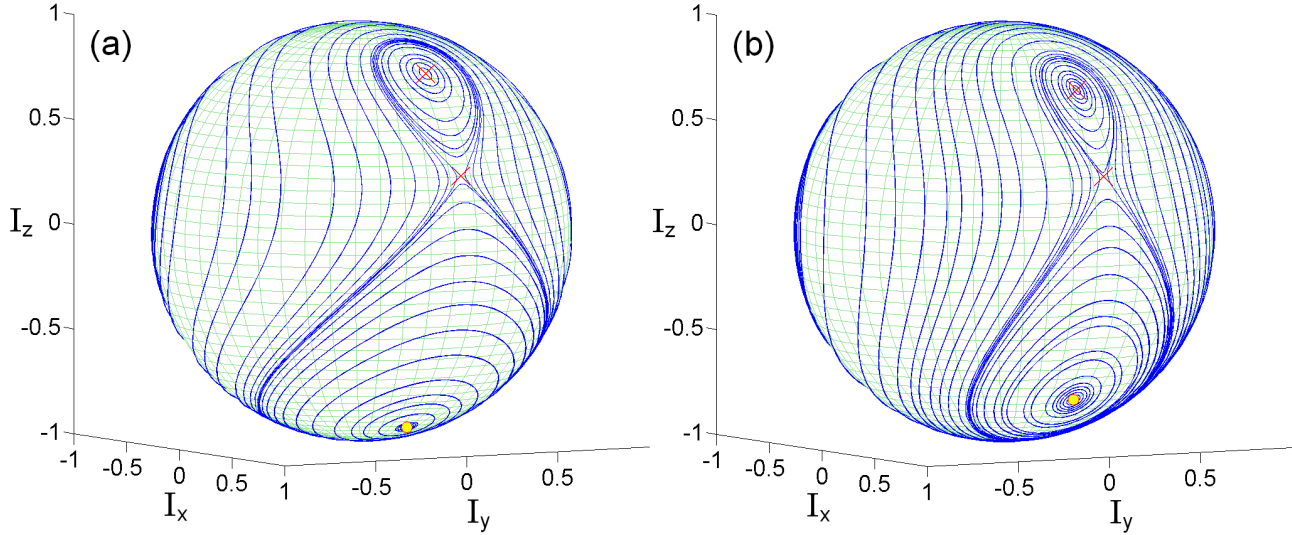


Figura 6.1.4: Trajetórias sobre o espaço de fase generalizado de condensados gêmeos no regime de interações atrativas e na presença de colisões cruzadas. Mantendo fixos os valores $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\chi = 4$, apresentamos a dinâmica sobre a esfera de Bloch para as seguintes intensidades do parâmetro de colisão cruzada: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{10}$.

As esferas de Bloch na figura 6.1.4 mostram o efeito das colisões cruzadas sobre a dinâmica do sistema. No gráfico 6.1.4.a, para $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, vemos que grande parte da superfície esférica é tomada por órbitas associadas ao regime de AAM em torno do ponto fixo 4^+ . Como vimos anteriormente, no regime de interações atrativas o aumento da taxa de autocolisão está associado ao surgimento e crescimento das regiões associadas ao AAM. Neste gráfico podemos notar que o pólo sul da esfera, que representa o estado $|N; w_1 = w_2 = 0\rangle = |J'; \tau' = 0\rangle = |0, 0, N\rangle$, está contido em uma órbita auto-aprisionada.

Já na figura 6.1.4.b aumentamos o peso das interações cruzadas, exibindo a dinâmica de condensados gêmeos para $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$. As colisões cruzadas tem efeito contrário às autocolisões, reduzindo as regiões em regime de AAM e retornando os pontos fixos 3^+ e 4^+ em direção ao equador, sentido inverso ao da bifurcação. A supressão da dinâmica de AAM é consequência evidente do aumento do valor absoluto da taxa efetiva de tunelamento Ω' decorrente da importância crescente das colisões cruzadas no sistema. Note que desta vez o pólo sul da esfera não está presente em uma trajetória de auto-aprisionamento.

A dinâmica populacional semiclássica para o estado inicial $|0, 0, N\rangle$ é destacada no gráfico 6.1.5.a para os dois conjuntos de parâmetros utilizados na figura 6.1.4. A curva azul sólida (verde tracejada) mostra o comportamento da população nos modos locais para $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$). Para $\mu = \frac{\chi}{100}$ vemos o comportamento característico de uma órbita de AAM. Note que I_z oscila em torno de um valor finito negativo, indicando que o terceiro modo local mantém aprisionado grande

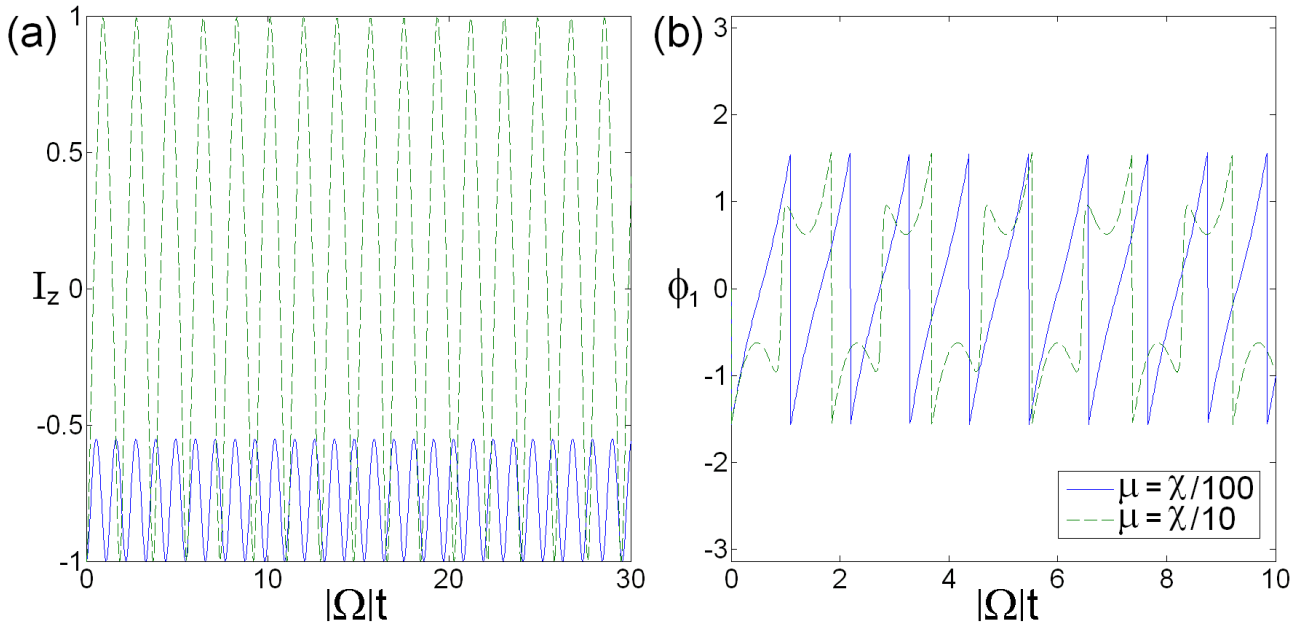


Figura 6.1.5: Considerando como condição inicial o estado coerente $|N; w=0\rangle = |0, 0, N\rangle$ e empregando os valores de parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\chi = 4$, temos à esquerda a dinâmica populacional clássica do sistema e em (b) a evolução da fase ϕ_1 . A curva azul sólida (verde tracejada) apresenta os resultados para $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\mu = \frac{\chi}{10}$).

parte dos bósons do condensado. No entanto, para $\mu = \frac{\chi}{100}$ temos o comportamento do tipo OJ, onde as partículas tunelam periodicamente entre os modos gêmeos e o terceiro, sem uma localização preferencial de parte do condensado.

A evolução temporal da fase ϕ_1 para a condição inicial $|0, 0, N\rangle$ é exibida na figura 6.1.5.b, para os mesmos dois conjuntos de parâmetros da figura 6.1.5.a. Vemos que ϕ_1 oscila limitadamente em torno de zero no dois regimes dinâmicos populacionais estudados anteriormente.

Utilizando os elementos de matriz dados na equação (6.1.16), podemos facilmente encontrar a evolução temporal de qualquer estado, se conhecemos sua expansão na base de população $\{|n_1, n_2, n_3\rangle\}$ para um valor de N fixo, apenas diagonalizando numericamente o operador $\hat{H}$. Em comparação com os resultados semiclássicos obtidos na figura 6.1.5.a, exibimos agora a evolução quântica exata de $I_z = \frac{4\langle \hat{n}_1 \rangle - N}{N}$, para os mesmos conjuntos de parâmetros. A linha azul sólida no gráfico 6.1.6 mostra a dinâmica populacional para as taxas de colisão de valores $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Note que o cálculo quântico está em perfeito acordo qualitativo com o clássico; ou seja, a oscilação ocorre em torno de um valor finito negativo de I_z , caracterizando o regime de AAM no terceiro modo local. No entanto, as oscilações exibem uma complicada modulação não presente na aproximação semiclássica.

A aproximação análoga clássica consiste em restringir a evolução de um estado ao espaço não linear $s(M)$ dos estados coerentes de pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(3)}$, definida em (4.3.30), igual a um. Sendo assim, abrimos mão do princípio de superposição e, conseqüentemente, das possíveis “deformações” geradas no estado, incluindo processos de auto-interferência e compressão, pelos termos não lineares do Hamiltoniano $\hat{H}$. A “deformação” ou delocalização do estado coerente no espaço de fase generalizado origina a modulação das oscilações para N finito.

O grau de delocalização de um estado sobre o espaço de fase generalizado M pode também ser medido utilizando $\mathcal{P}_{su(3)}$, pois os estados coerentes mais próximos aos clássicos são aqueles que ocupam “volume” mínimo em M . Podemos entender isto notando que maximizar a pureza generalizada

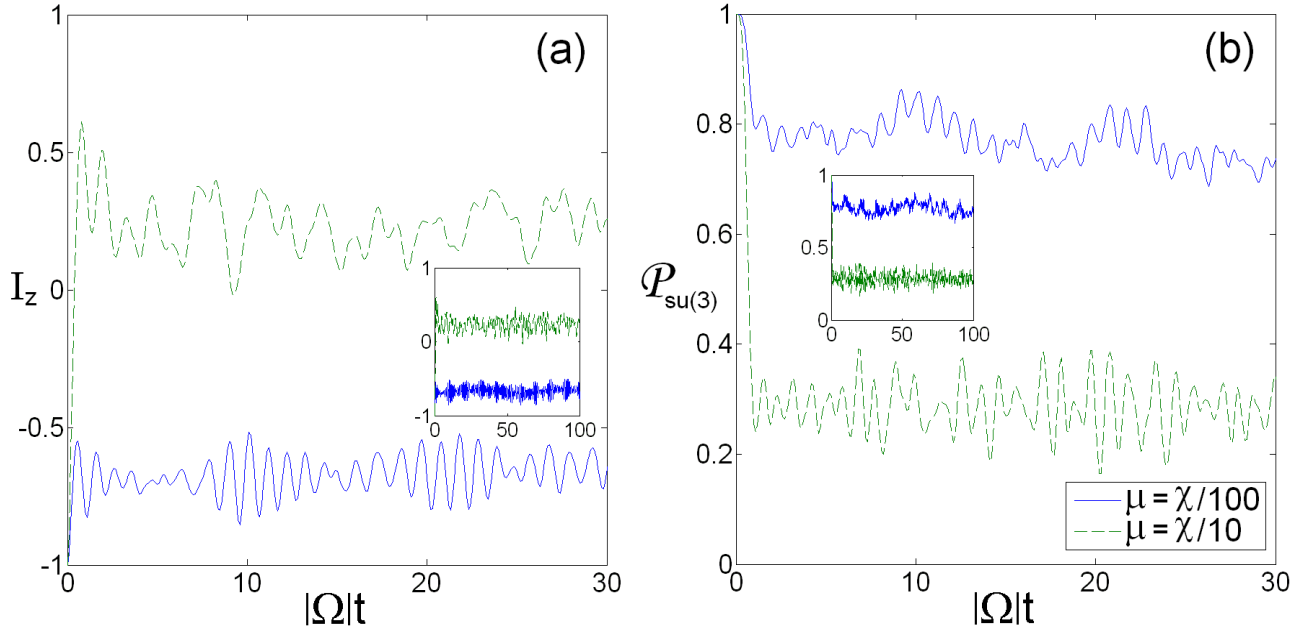


Figura 6.1.6: Em comparação com a figura 6.1.5, exibimos em (a) a dinâmica populacional quântica, novamente tomando como estado inicial $|N; w = 0\rangle = |0, 0, N\rangle$ e fixando $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\chi = 4$. À direita mostramos a evolução da pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(3)}$ do sistema. As linhas azuis sólidas (verdes tracejadas) apresentam os resultados para $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\mu = \frac{\chi}{10}$).

equivale a minimizar a incerteza total da álgebra, que representa a soma das variâncias dos geradores ortonormais do grupo $SU(3)$ ^{6.3}, cujas transformações são aquelas que formam o espaço M quando aplicadas em um estado de referência.

A linha azul sólida na figura 6.1.6.b exibe a evolução temporal de $\mathcal{P}_{su(3)}$ para o estado inicial $|0, 0, N\rangle$ no regime de auto-aprisionamento, com $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Note que rapidamente o sistema perde sua pureza máxima e então passa a oscilar em torno $\mathcal{P}_{su(3)} \approx 0,8$. O primeiro período de decoerência^{6.4}, que dura aproximadamente até $|\Omega|t = 1$, é responsável pela quebra da correspondência quantitativa clássico-quântica. Após este período esperamos que as médias dos operadores tomadas classicamente não possuam mais um bom acordo quantitativo com os resultados quânticos exatos.

No entanto, devido ao caráter de localização do regime de AAM, cujas órbitas clássicas se concentram em uma região bem delimitada do hemisfério sul da esfera de Bloch, temos que a pureza generalizada estabiliza suas oscilações em torno de um valor relativamente elevado. Isto explica o bom acordo qualitativo entre as dinâmicas populacionais de auto-aprisionamento calculadas pelas abordagens semiclássica da figura 6.1.5.a e quântica exata da figura 6.1.6.a.

Agora analisemos a linha verde tracejada do gráfico 6.1.6.a, que mostra a dinâmica populacional para o estado inicial $|0, 0, N\rangle$ e com parâmetros de colisão $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$. As diferenças quantitativas em relação aos resultados clássicos do gráfico 6.1.5.a são bastante evidentes. As oscilações do resultado quântico têm amplitude bem menor e também apresentam uma complicada modulação. No entanto, qualitativamente os resultados estão em acordo, pois no detalhe do gráfico 6.1.6.a vemos que I_z oscila

^{6.3}Mais detalhes no apêndice 8.2.

^{6.4}Aqui novamente utilizamos o termo decoerência com o significado de perda da pureza generalizada em relação à álgebra do grupo dinâmico do sistema; ou seja, o “afastamento” do estado em relação ao subespaço $s(M)$, composto dos estados coerentes mais próximos aos clássicos, causado pela presença de termos não lineares no Hamiltoniano.

em torno de $\frac{1}{3}$, valor que indica comportamento não preferencial do tunelamento em relação aos três modos locais, segundo (6.1.18). Portanto, os cálculos quânticos e clássicos concordam ao manifestar o regime de OJ.

Porém, é visualmente claro que o acordo quantitativo entre os resultados clássicos e quânticos é melhor para a órbita de AAM em comparação com a órbita de OJ. Este fato é comprovado pelo comportamento de $\mathcal{P}_{su(3)}$ para este último regime, mostrado na linha verde tracejada da figura 6.1.6.b. Após um rápido primeiro período de decoerência, que de maneira semelhante ao regime de AAM também dura até $|\Omega|t \approx 1$, vemos que as oscilações da pureza generalizada estabilizam-se em torno de aproximadamente 0,3. Portanto, a decoerência no regime de OJ é bem mais intensa que para o AAM, confirmando a menor validade da aproximação análoga clássica.

As órbitas de OJ percorrem um região bem mais extensa da esfera de Bloch, como vimos na figura 6.1.1 e 6.1.4. Por conseguinte, nos cálculos quânticos esperamos maior delocalização do estado do condensado no espaço de fase generalizado. Podemos confirmar nossas expectativas acerca da relação entre a perda de pureza de um estado e sua delocalização no espaço de fase. Para este fim precisamos estabelecer uma ponte entre estados quânticos arbitrários, não somente os coerentes, e o espaço de fase generalizado M . No regime de condensados gêmeos podemos aproveitar as simetrias do sistema, que permitem descrevê-lo com apenas dois modos locais efetivos, e buscar representações de estados quânticos utilizando os estados coerentes de $SU(2)$, também encontrados na equação (6.1.11).

Primeiramente expandimos um estado arbitrário $|\psi\rangle \in \mathbb{B}_N$ na base de população nos três modos locais:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1+n_2+n_3=N} c_{\vec{n}} |n_1, n_2, n_3\rangle; \quad (6.1.20)$$

Então, definimos o operador densidade para um estado puro $\rho \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$. É natural associarmos o operador ρ a M da mesma forma que fizemos para um observável qualquer na seção 2.2, equação (2.2.32); ou seja, fazendo a média do operador nos estados coerentes. Deste modo, definimos a representação Q_{CG} ou Husimi para condensados gêmeos, utilizando a expansão (6.1.5') para os estados coerentes e as transformações de parametrização (6.1.12) e (6.1.14):

$$\begin{aligned} Q_{CG}(\theta', \phi_1) &= \langle N; w_1 = w_2 = w | \rho | N; w_1 = w_2 = w \rangle \\ &= |\langle N; \tau' | \psi \rangle|^2 \\ &= \left| \sum_{n_1+n_2+n_3=N} \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!n_3!}} \frac{(\tau'^*)^{n_1+n_2}}{2^{\frac{n_1+n_2}{2}} (|\tau'|^2 + 1)^{\frac{N}{2}}} c_{\vec{n}} \right|^2. \end{aligned} \quad (6.1.21)$$

Devemos lembrar que os estados $|N; \tau'\rangle$ são estados coerentes associados ao grupo $SU(2)$, que surgem naturalmente como um subconjunto dos estados coerentes de $SU(3)$ quando restringimos os parâmetros w_1 e w_2 ao subespaço de condensados gêmeos.

Na figura 6.1.7 mostramos a evolução do estado coerente $|0, 0, N\rangle$ para quatro instantes de tempo interessante no regime de AAM, novamente para os parâmetros $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. No gráfico 6.1.7.a temos Q_{CG} **sobre a esfera de Bloch** para o instante inicial. Note que esta é a distribuição Husimi melhor localizada no pólo sul da esfera para $N = 30$ bósons. Quando $|\Omega|t = 2$ estamos ao fim do primeiro período de decoerência, como podemos ver no gráfico 6.1.6.b. Comparando as figuras 6.1.4.a e 6.1.7.b, vemos que os termos não lineares do Hamiltoniano “espalham” a distribuição do estado por toda região

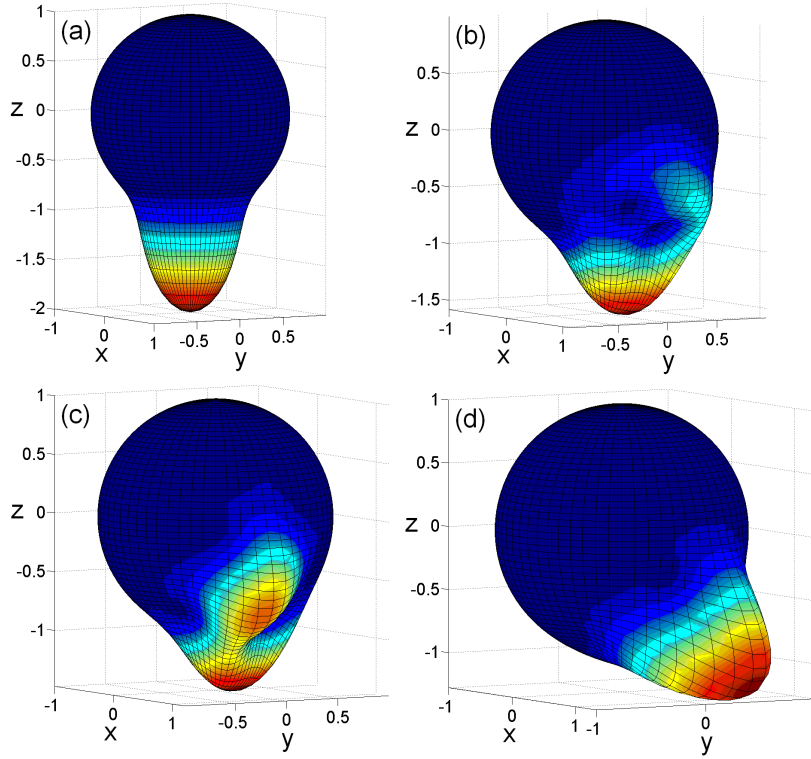


Figura 6.1.7: Representação Q_{CG} nos estados coerentes de $SU(2)$ em vários instantes de tempo para estado inicial $|0, 0, N\rangle$ evoluído sob Hamiltoniano de parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Mostramos a distribuição sobre a esfera de Bloch nos instantes: (a) $|\Omega|t = 0$, (b) $|\Omega|t = 2$, (c) $|\Omega|t = 5$ e (d) $|\Omega|t = 9, 2$.

ocupada por sua órbita semiclássica. A partir deste momento a quebra de correspondência quantitativa clássico-quântica é completa, pois inicia-se o processo de auto-interferência do estado, como vemos no gráfico 6.1.7.c, onde a distribuição forma dois máximos, indicando a formação aproximada de uma superposição de estados coerentes. Por fim, a figura 6.1.7.d mostra a representação Husimi para um máximo local da pureza generalizada, indicando uma recoerência do estado em $|\Omega|t = 9, 2$. Note que Q_{CG} volta a apresentar apenas um máximo bem localizado, mas sua forma ainda é afastada de um estado coerente, de maneira que a pureza é inferior a 0,9.

Todas distribuições da figura 6.1.7 estão aproximadamente limitadas à região ocupada pela órbita clássica encontrada no gráfico 6.1.4.a. As trajetórias de AAM são relativamente bem localizadas no espaço de fase e, por este motivo, a pureza neste regime oscila em torno de valores caracteristicamente altos.

Alguns instantes de interesse da evolução do estado $|0, 0, N\rangle$ no regime de OJ, para parâmetros de colisão $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, são mostrados na figura 6.1.8. Em $|\Omega|t = 0, 7$, o estado está em seu primeiro período de decoerência, como podemos ver na evolução de $\mathcal{P}_{su(3)}$, e a dinâmica do sistema causa o “alargamento” da distribuição. Quando $|\Omega|t = 1, 1$, ao final do primeiro período de decoerência, a distribuição já espalha-se sobre toda a região ocupada por sua órbita semiclássica, comparando com a figura 6.1.4.b, e possui dois máximos indicativos de auto-interferência. No gráfico 6.1.8.c mostramos Q_{CG} para um instante de recoerência de sua pureza, máximo local na figura 6.1.6.b. A representação do estado tem forma bastante distinta do estado coerente inicial e está espalhada em praticamente um hemisfério do subespaço de fase.

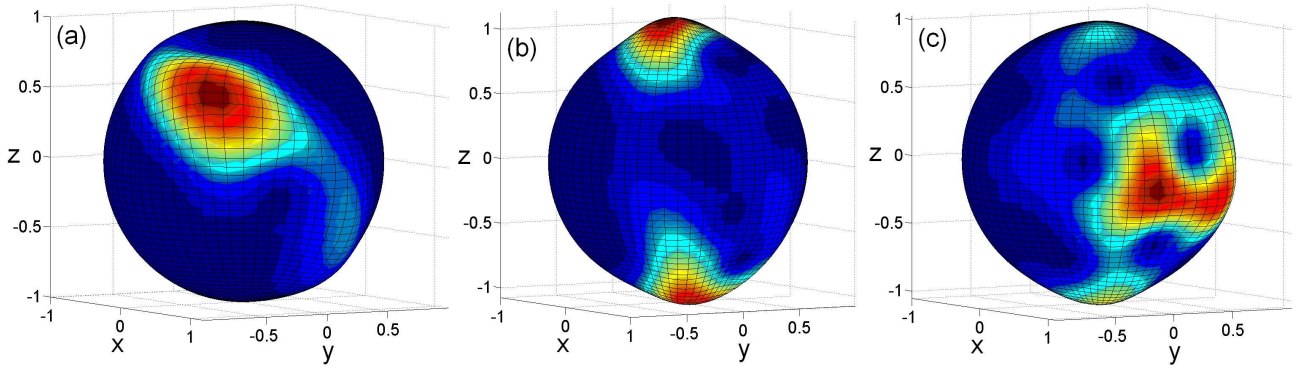


Figura 6.1.8: Distribuição Husimi em vários instantes de tempo para estado inicial $|0, 0, N\rangle$ durante a evolução sob Hamiltoniano de parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = 4$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$. A representação sobre a esfera de Bloch é exibida nos instantes: (a) $|\Omega|t = 0, 7$, (b) $|\Omega|t = 1, 1$ e (c) $|\Omega|t = 6, 8$.

Logo, vemos uma relação direta entre a área da região ocupada pela órbita semi-clássica e a intensidade da decoerência encontrada para os resultados quânticos de mesmas condições iniciais. As trajetórias relacionadas ao regime dinâmico populacional de OJ geralmente percorrem um região bem maior da esfera de Bloch em relação ao regime de AAM, conseqüentemente, a qualidade da aproximação semiclássica é bem melhor neste, que mantém valores maiores da pureza do estado.

Até agora tratamos apenas de interações bosônicas atrativas, mas os resultados das seções 5.3 e 5.4 indicam que os regimes dinâmicos populacionais no caso repulsivo apresentam diferenças sensíveis. Portanto, repetimos as análises anteriores para as taxas de colisão negativas, $\chi, \mu < 0$.

No regime de interações repulsivas a bifurcação dinâmica acontece apenas em $\chi_- \cong -6,7298$ quando $\mu = 0$, mas a diferença mais marcante é que a bifurcação ocorre sobre o meridiano $\phi_1 = \pi$, no qual os modos gêmeos estão em fase oposta ao terceiro modo local, diferentemente do caso atrativo. Como podemos ver na figura 5.3.2, três dos quatro possíveis pontos fixos encontrados sobre a reta restrita aos reais $w_1 = w_2$ têm localização tal que $w_1, w_2 < 0$, de maneira que $\phi_1 = \pi$, segundo as transformações (5.2.6).

As trajetórias semiclássicas sobre a esfera de Bloch para várias condições iniciais e diversos valores de $\chi < 0$ são mostradas na figura 6.1.9, na qual desconsideramos os efeitos das colisões cruzadas. Desta vez exibimos as superfícies esféricas de forma a garantir uma boa visualização das modificações ocorrentes nas proximidades de $\phi_1 = \pi$, a região interessante para interações repulsivas. Note que novamente utilizamos círculos amarelos (cruzes vermelhas) para indicar a localização de pontos de equilíbrio estável (instável).

O gráfico 6.1.9.a mostra a dinâmica de condensados gêmeos para $\chi = -6$, valor consideravelmente inferior ao valor de bifurcação χ_- . Próximo a pólo sul da esfera encontramos o ponto de equilíbrio estável 2^- , que está presente para qualquer valor de χ . Ao redor de 2^- vemos órbitas localizadas inteiramente no hemisfério sul do subespaço de fase, significando que grande parte do condensado fica retida no terceiro modo local. Portanto, novamente encontramos o regime de AAM, no qual os modos gêmeos são menos populados que o modo solitário. Este regime dinâmico é de certa forma contra-intuitivo, pois esperaríamos que as interações repulsivas no condensado dificultassem sua localização em espaços menores, de maneira a distribuir os bósons entre os três modos locais.

Quando aumentamos o valor absoluto da taxa de autocolisão a $|\chi| = 6, 7$, valor próximo e inferior a $|\chi_-|$, vemos que algumas trajetórias se alongam em direção ao pólo norte. No gráfico 6.1.9.b, a formação de um “bico” sobre o meridiano $\phi_1 = \pi$ indica o local onde ocorre a bifurcação.

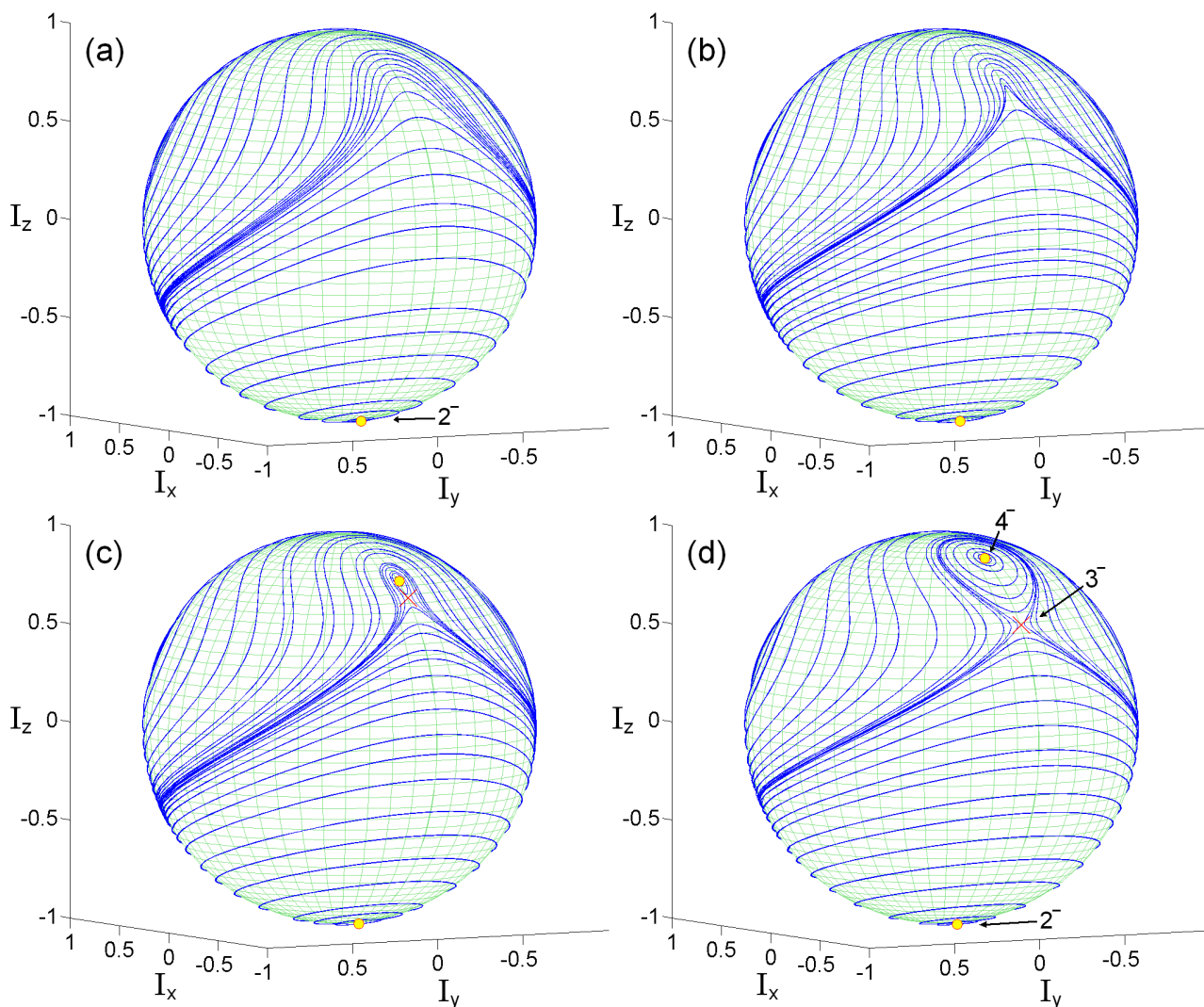


Figura 6.1.9: Trajetórias clássicas do sistema de condensados gêmeos sobre o espaço de fase generalizado para diversos valores negativos do parâmetro de autocolisão, mas para colisões cruzadas desprezadas. Fixando os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\mu = 0$, mostramos a dinâmica clássica do sistema para os seguintes valores da taxa de autocolisão: (a) $\chi = -6$, (b) $\chi = -6, 7$, (c) $\chi = -6, 8$ e (d) $\chi = -8$.

A figura 6.1.9.c exibe a dinâmica logo após a bifurcação, com $\chi = -6, 8$. Ao redor do novo ponto fixo estável 4^- vemos surgir órbitas localizadas inteiramente no hemisfério norte, representando o aparecimento de AAM nos modos locais gêmeos. Diferentemente das trajetórias em torno do ponto de equilíbrio 2^- , órbitas localizadas no topo do hemisfério norte apresentam dinâmica populacional na qual o condensado tem grande parte de seus bósons retidos nos modos gêmeos e apenas uma porção deles tunela ao terceiro modo, que se encontra em fase oposta aos primeiros. Juntamente com o ponto de equilíbrio instável 3^- surge uma separatriz, dividindo o subespaço de fase em três regiões: órbitas de AAM no modo solitário ao redor de 2^- , trajetórias de AAM nos modos gêmeos em torno de 4^- e órbitas em regime de OJ ao redor do ponto fixo estável 1^- , encontrado no meridiano $\phi_1 = 0$.

Se aumentamos ainda mais o valor absoluto da taxa de autocolisão, como vemos no gráfico 6.1.9 para $\chi = -8$, notamos que o ponto fixo 4^- (3^-) desloca-se em direção ao pólo norte (equador), à

medida que a região tomada pelo regime de AAM nos modos gêmeos ocupa maior área da superfície esférica.

Para interações repulsivas não encontramos uma mudança do estado fundamental no limite semi-clássico, representado pelo ponto fixo da dinâmica que minimiza a Hamiltoniana $\mathcal{H}(\vec{w}^*, \vec{w})$. Como vemos na figura 5.3.6, o ponto de equilíbrio 1^- , cuja localização é fixa em $w_1 = w_2 = 1$ para todos valores de χ e μ , sempre representa um mínimo global de energia quando $\chi < 0$.

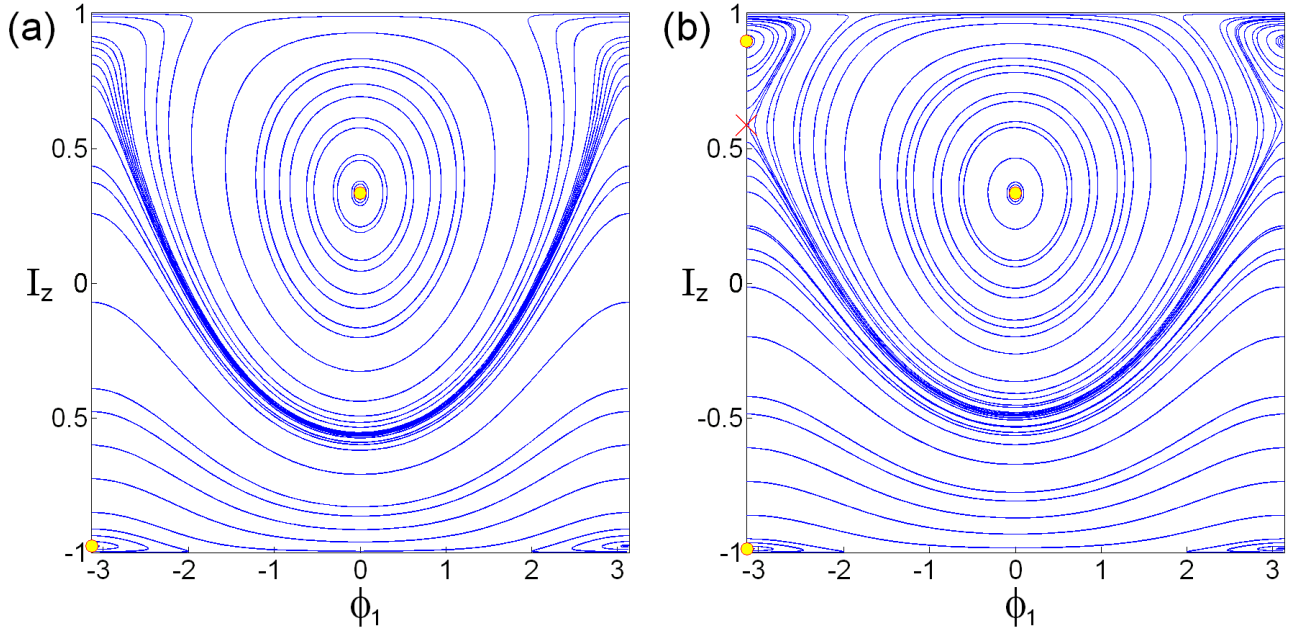


Figura 6.1.10: Projeções cilíndricas da esfera de Bloch para dois conjuntos de parâmetros já encontrados na figura 6.1.9. Aqui exibimos: (a) $\chi = -6$ e (b) $\chi = -8$, mais uma vez conservando fixos $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\mu = 0$

Na figura 6.1.10 mostramos as projeções cilíndricas para dois valores da taxa de autocolisão cuja dinâmica na esfera de Bloch já foi mostrada anteriormente. No gráfico 6.1.10.a podemos ver as órbitas no regime OJ em torno do ponto fixo 1^- , para o parâmetro de colisão anterior à bifurcação, $\chi = -6$. Quando estável, o ponto fixo localizado em $w_1 = w_2 = 1$ sempre sugere a existência de trajetórias em suas proximidades nas quais os bósons condensados mantêm os três modos igualmente populados, exceto por uma porção do condensado que oscila periodicamente entre os condensados gêmeos e o terceiro modo, todos em fase. Notamos também que a região tomada por este regime populacional não sofre grandes alterações decorrentes da bifurcação, quando comparamos as figuras 6.1.10.a e 6.1.10.b, esta última para $\chi = -8$.

As projeções nos permitem visualizar todas as órbitas presentes no subespaço de condensados gêmeos, mas não da maneira mais adequada, devido às aberrações nas formas das trajetórias introduzidas pela planificação da superfície esférica. Como já discutido, a forma topológica correta do subespaço de condensados gêmeos é S^2 , a esfera de Bloch. Novamente a projeção cilíndrica 6.1.10.a nos causa a falsa impressão da existência de uma separatriz entre as órbitas no regime de OJ em torno de 1^- e o restante do espaço de fase, mas o gráfico fidedigno 6.1.9.a mostra uma clara continuidade entre estas trajetórias.

As colisões cruzadas são consideradas no gráfico 6.1.11.a, onde exibimos a dinâmica do sistema para parâmetros de colisão $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Note que este é o mesmo valor de autocolisão encontrado na

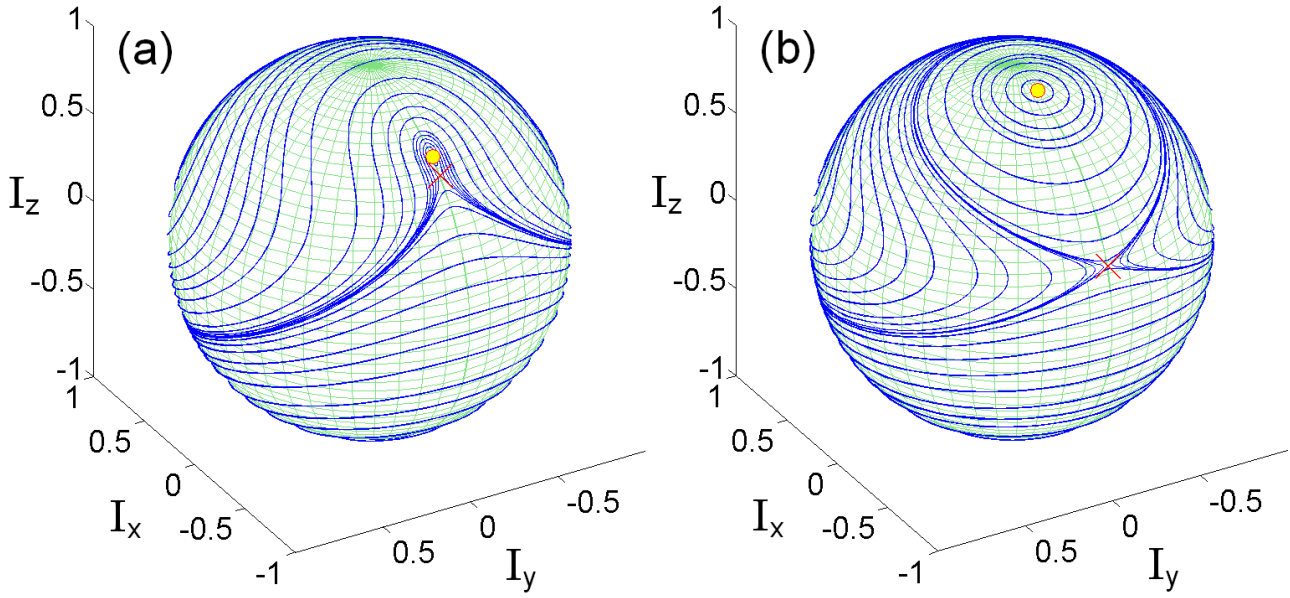


Figura 6.1.11: Dinâmica do sistema de condensados gêmeos no regime de colisões repulsivas e considerando as colisões cruzadas. Desta vez conservamos constantes $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\chi = -6$, enquanto variamos apenas a taxa de colisões cruzadas: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{15}$.

figura 6.1.9.a, mas os efeitos das colisões cruzadas induzem o deslocamento do parâmetro de bifurcação χ_- , como mostrado na figura 5.3.4, de forma que os quatro pontos fixos já estão presentes neste novo gráfico.

Quando aumentamos o peso das interações cruzadas, aumentamos também a região da superfície esférica ocupada pelas órbitas de AAM, como podemos ver na figura 6.1.11.b, com parâmetros de colisão $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{15}$. Em oposição ao caso de interações atrativas já estudado, a presença das colisões cruzadas repulsivas soma-se ao efeito da autocolisão, privilegiando o regime de AAM, pois o fator $2\Lambda(N-1) > 0$ reduz o valor absoluto da taxa efetiva de tunelamento Ω' em relação a taxa $\Omega < 0$, como podemos ver na relação (3.1.26').

Comparando as duas esferas presentes no gráfico 6.1.11, vemos à esquerda que o pólo norte da superfície, o estado coerente $|N; w_1 = w_2 \rightarrow -\infty\rangle \equiv |N; \theta' = \pi\rangle$, está contido em região em regime de OJ, enquanto à direita temos que este mesmo estado faz parte de uma trajetória de AAM. Na figura 6.1.12.a destacamos a dinâmica populacional para o estado inicial $|N; \theta' = \pi\rangle$, onde a linha azul sólida (verde tracejada) representa o comportamento para parâmetros de colisão $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\mu = \frac{\chi}{15}$).

Então, apenas alterando o peso das colisões cruzadas, modificamos o regime populacional para o estado inicial $|N; \theta' = \pi\rangle$, no qual todos os bósons estão localizados nos modos gêmeos. Para $\mu = \frac{\chi}{100}$, vemos que a curva azul sólida oscila em torno de $I_z = \frac{1}{3}$, apresentando tunelamento sem um modo preferencial, caracterizando o regime de OJ. Ao passo que para $\mu = \frac{\chi}{15}$ o balanço populacional concentra-se nos condensados gêmeos e apenas uma pequena porção das partículas tunela periodicamente para o modo solitário, sinalizando um órbita de AAM.

Na figura 6.1.12.b mostramos o comportamento da fase para os dois regimes dinâmicos discutidos. A curva azul sólida (verde tracejada) mostra o comportamento de ϕ_1 para o regime de OJ (AAM), obtido com parâmetro de colisão cruzada $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\mu = \frac{\chi}{15}$). Somente modificando o valor relativo da taxa de colisão cruzada mudamos o comportamento de ϕ_1 de limitado a livre, quando passamos do regime de OJ ao AAM.

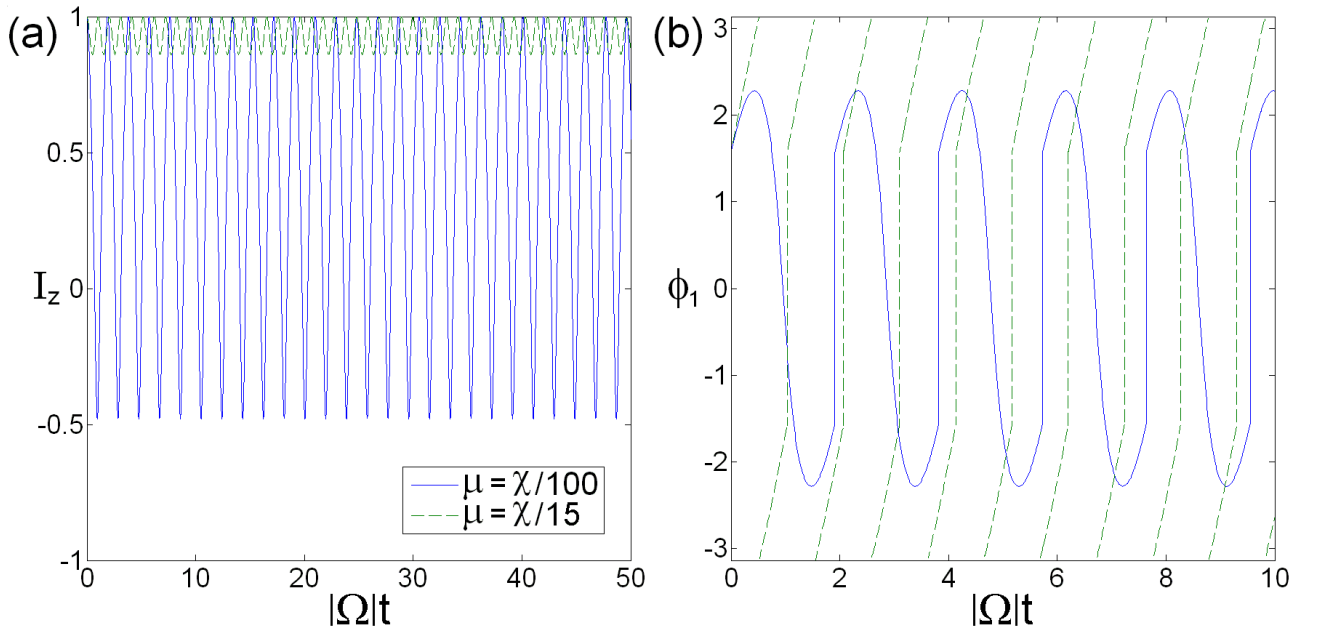


Figura 6.1.12: Considerando os dois conjuntos de parâmetros utilizados na figura 6.1.11, exibimos em (a) e (b), respectivamente, a dinâmica populacional e de fase para condição inicial localizada no pólo norte da esfera de Bloch, o estado coerente $|N; w_1 = w_2 \rightarrow -\infty\rangle \equiv |N; \theta' = \pi\rangle$. Novamente os valores $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\chi = -6$ são constantes, ao passo que as linhas azuis sólidas (verdes tracejadas) representam os resultados para a taxa de colisão cruzada $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\mu = \frac{\chi}{15}$).

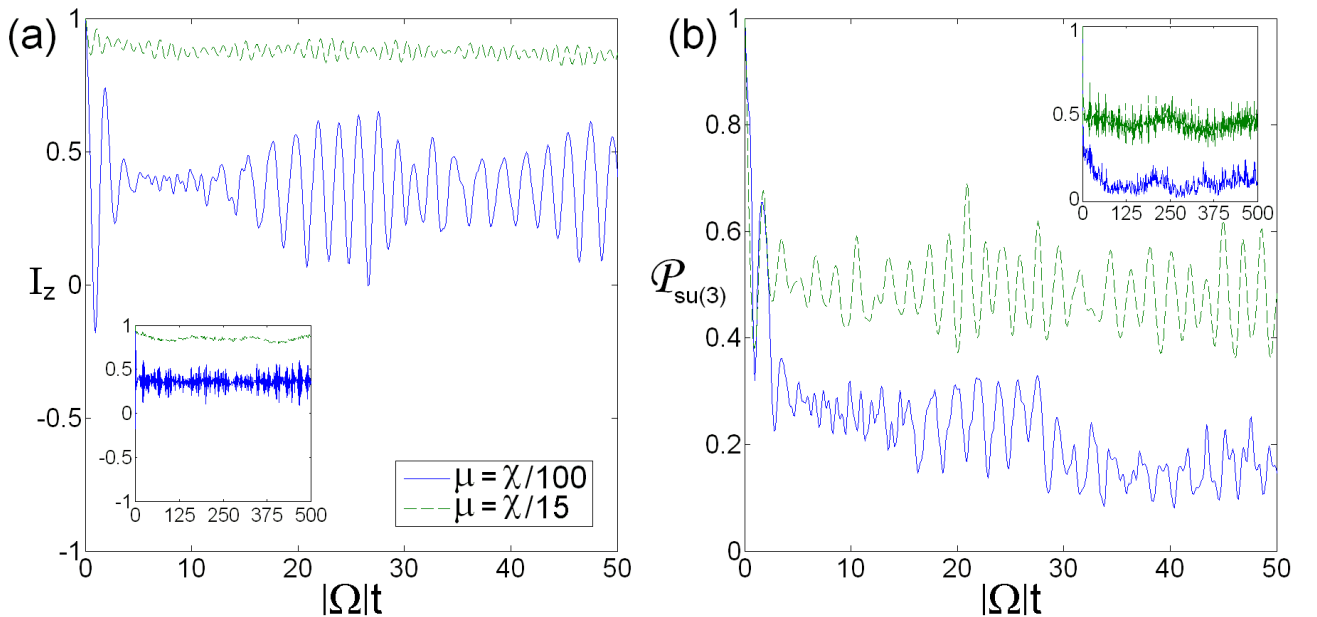


Figura 6.1.13: Em comparação com a figura 6.1.12, mostramos em (a) a dinâmica populacional quântica exata e em (b) a evolução de $P_{su(3)}$ para o estado inicial $|N; w_1 = w_2 \rightarrow -\infty\rangle$. As linhas azuis sólidas (verdes tracejadas) exibem os resultados para o parâmetro de colisão cruzada $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\mu = \frac{\chi}{15}$). Os valores dos outros parâmetros são mais uma vez mantidos em $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\chi = -6$.

Em comparação aos resultados semiclássicos da figura 6.1.12.a, exibimos o cálculo quântico exato do balanço populacional I_z para o estado coerente inicial $|N; \theta' = \pi\rangle$. Mais uma vez a curva azul sólida (verde tracejada) está associada aos parâmetros de colisão $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\mu = \frac{\chi}{15}$). Ambas as curvas exibem bom acordo qualitativo, caracterizando corretamente os regimes de OJ ou de AAM quando comparadas com o resultado análogo clássico. No entanto, novamente o balanço populacional quântico apresenta uma modulação das oscilações inexistente no análogo clássico.

O prejuízo quantitativo nos cálculos é devido à decoerência do estado, determinada pela pureza generalizada do sistema. No gráfico 6.1.13.b expomos a evolução de $\mathcal{P}_{su(3)}$ para as duas órbitas estudadas. A linha azul sólida mostra a decoerência do estado inicial $|N; \theta' = \pi\rangle$ para o regime OJ, enquanto a verde tracejada para a trajetória de AAM. Nos dois casos vemos uma rápida perda de coerência inicial, que dura aproximadamente até $|\Omega|t = 1$. Neste primeiro período de decoerência acontece a quebra da correspondência quantitativa entre as soluções clássica e quântica para o balanço populacional. Contudo, o sistema em regime de AAM estabiliza suas oscilações em torno de um valor mais elevado de $\mathcal{P}_{su(3)}$, em relação à órbita em regime de OJ. Este resultado poderia ser inferido analisando a região do subespaço de fase “varrida” por estas duas trajetórias na figura 6.1.11.

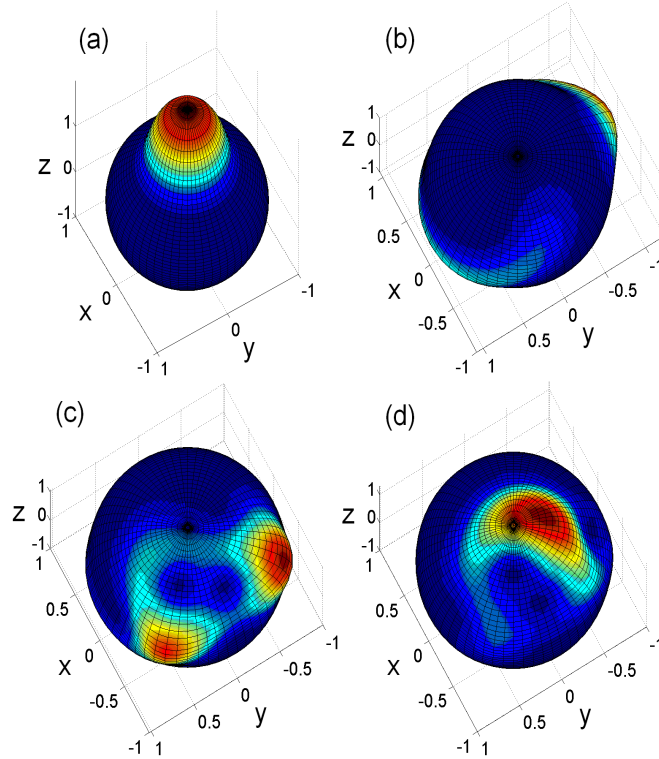


Figura 6.1.14: Representação Q_{CG} nos estados coerentes de $SU(2)$ para o estado inicial $|N; w_1 = w_2 \rightarrow -\infty\rangle$ evoluído no tempo sob Hamiltoniano de parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. O estado do sistema está representado sobre a esfera de Bloch nos instantes: (a) $|\Omega|t = 0$, (b) $|\Omega|t = 1$, (c) $|\Omega|t = 10$ e (d) $|\Omega|t = 27,5$.

A relação entre intensidade da decoerência e área delimitada pela órbita semiclássica é corroborada pelo comportamento da distribuição Q_{CG} das duas trajetórias analisadas. No gráfico 6.1.14.a exibimos a forma do estado coerente $|N; \theta' = \pi\rangle$, maximamente localizado com centro no pólo norte da esfera. A figura 6.1.14.b mostra a representação do estado evoluído sob parâmetros $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ no instante $|\Omega|t = 1$, perto do fim do primeiro período de decoerência. Em comparação com o gráfico 6.1.11.a,

vemos que o estado se distribui por toda sua órbita clássica. Devido aos termos não lineares de $\hat{H}$, o estado coerente não se propaga sem perder sua forma. Esta delocalização na região da trajetória análoga clássica é responsável pelo primeiro período de decoerência, causando divergência entre a aproximação semiclássica e o cálculo quântico exato.

Como discutido na seção 4.3, esperamos a redução do desvio entre os resultados quânticos exatos e do método análogo clássico para N crescente. Quando aumentamos o valor de N , o estado coerente torna-se mais localizado no espaço de fase e menos trajetórias contribuem na evolução do pacote de onda. No limite $N \rightarrow \infty$, a distribuição do estado coerente sobre M tende a uma função delta de Dirac, recuperando o conceito de estado clássico, no qual apenas uma trajetória tem contribuição na evolução, restituindo a correspondência exata entre a mecânica quântica e clássica.

Os termos não lineares no Hamiltoniano possibilitam que órbitas vizinhas no espaço de fase possuam comportamentos distintos, de maneira que um pacote de onda delocalizado propagado por este fluxo perde sua forma devido aos diferentes períodos e direções tomados por cada ponto na distribuição.

No entanto, este não é o único motivo da quebra de correspondência clássico-quântica, pois sabemos que a dinâmica Liouvillian, na qual propagamos **classicamente** distribuições em vez de um único ponto, também exibe o alargamento da função de densidade de estados em sistemas não lineares.

O segundo motivo da quebra de correspondência, não encontrado na dinâmica Liouvillian, é a possibilidade de auto-interferência do pacote de onda, fundamentada no princípio puramente quântico de superposição. Como vemos na figura 6.1.14.c, para $|\Omega|t = 10$, a função Q_{CG} do **estado puro** exibe aproximadamente apenas dois máximos bem definidos, indicando a superposição entre dois estados de distribuição localizada.

No gráfico 6.1.14.d mostramos o sistema em um de seus melhores instantes de recoerência, como observado na evolução de $\mathcal{P}_{su(3)}$. Em $|\Omega|t = 27,5$, a função Q_{CG} recupera sua pureza exibindo apenas um máximo bem pronunciado, mas com forma bastante distante de um estado coerente.

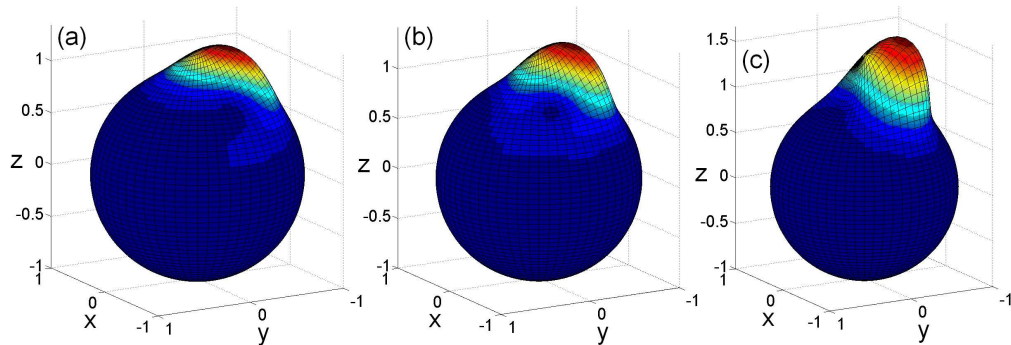


Figura 6.1.15: Representações instantâneas do estado $|N; w_1 = w_2 \rightarrow -\infty\rangle$ propagado no tempo para os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{15}$. A distribuição Q_{CG} é mostrada nos instantes: (a) $|\Omega|t = 0,9$, (b) $|\Omega|t = 10$ e (c) $|\Omega|t = 20,9$.

O estado $|N; \theta' = \pi\rangle$ conserva mais de sua pureza quando propagado no regime de AAM, como vimos no gráfico 6.1.13.b. Observando a figura 6.1.11, também podemos notar que as órbitas semi-clássicas de AAM próximas ao pólo norte ocupam uma área bastante inferior da superfície esférica em relação às trajetórias de OJ. A ponte entre estes dois resultados é mostrada no figura 6.1.15, onde mostramos a evolução de Q_{CG} para parâmetros de colisão $\chi = -6$ e $\mu = \frac{\chi}{15}$. No gráfico 6.1.15.a, no instante $|\Omega|t = 0,9$, vemos o estado durante seu primeiro período de decoerência, alongando-se sobre a região tomada pelas trajetórias de AAM.

Em um de seus momentos de maior decoerência, $|\Omega|t = 10$, a distribuição Husimi do estado está “espalhada” por toda órbita clássica de auto-aprisionamento, comparando os gráficos 6.1.11.b e 6.1.15.b. Por fim, exibimos mais uma vez Q_{CG} em $|\Omega|t = 20, 9$, um de seus melhores instantes de recoerência, onde a função apresenta apenas um máximo de forma bastante semelhante ao estado coerente inicial. É claro que a distribuição do estado sobre o subespaço de fase conserva-se melhor localizada no regime de AAM em relação à OJ. Note também que a auto-interferência parece menos intensa para o estado auto-aprisionado, pois Q_{CG} sempre exhibe apenas um máximo neste regime.

6.2 Dinâmica de Poço Vazio

De certa forma, no subregime de condensados gêmeos reobtivemos para o modelo de três modos os resultados do modelo em poço duplo, pois é evidente na seção anterior o retorno de vários conceitos já encontrados na seção 2.1. Como exemplos, reintroduzimos a integrabilidade, um único grau de liberdade, os estados coerentes de $SU(2)$, a esfera de Bloch e principalmente os regimes dinâmicos populacionais de auto-aprisionamento e oscilação Josephson. Algumas ressalvas devem ser feitas, pois vimos que alguns pontos de equilíbrio aparentemente estáveis na subdinâmica de condensados gêmeos são na realidade instáveis na dinâmica completa, de maneira que o regime populacional associado aos seus arredores é efetivamente caótico.

Portanto, excetuando a dinâmica caótica, o primeiro regime populacional inteiramente novo encontrado no modelo de poço triplo está associado aos estados de poço vazio (EPV). Os pontos de equilíbrio $(w_1 = -1, w_2 = 0)$ e $(w_1 = 0, w_2 = -1)$ têm localização fixa no espaço de fase M , independentemente dos valores dos parâmetros de colisão. Contudo, vemos na figura 5.4.3 que o caráter de estabilidade dos EPV varia de forma bastante complicada como função de χ e μ .

Os pontos fixos de poço vazio representam a situação onde um dos três modos locais está desocupado, enquanto os outros dois modos encontram-se em fase oposta e dividem igualmente todas as partículas entre si. Logo, esperamos associar a estes pontos uma região do espaço de fase tomada por órbitas onde um poço se mantém vazio, salvo pequenas oscilações. A fase oposta nos modos populados distingue claramente a dinâmica de poço vazio do regime de AAM nos modos locais gêmeos, encontrado na seção anterior.

Devido à simetria de rotação da armadilha, sabemos que os estados de poço vazio são todos equivalentes. Assim, sem perda de generalidade, exibimos aqui apenas os resultados para a região de M próxima a $(w_1 = -1, w_2 = 0)$, estado clássico no qual o segundo poço está despopulado.

Novamente vamos estudar os dois tipos de interação bosônica, considerando os dois sinais dos parâmetros de colisão. A figura 6.2.1 mostra duas seções de Poincaré características para colisões atrativas. Em ambos os gráficos mostramos a seção em $\phi_2 = 0$, projetada no plano $\phi_1 \times J_1$, para a energia do estado de poço vazio. O ponto $(w_1 = -1, w_2 = 0)$ também está presente nas seções e é indicado por um círculo amarelo (cruz vermelha) quando estável (instável).

No gráfico 6.2.1.a, para parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, o EPV estável encontra-se no centro de uma ilha de órbitas quasi-periódicas, por sua vez envolta por uma faixa de dinâmica caótica. Note que as variáveis de ângulo e ação facilitam a interpretação da seção em termos das populações nos poços, já que J_1 simboliza a média semiclássica de bósons no primeiro modo.

Aumentando ligeiramente a relevância das colisões cruzadas no sistema, podemos alterar o comportamento de estabilidade do ponto fixo de poço vazio, como vemos na figura 5.4.3. O gráfico 6.2.1.b, para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{200}$, exhibe a seção contendo o EPV instável. Apesar das semelhanças entre esta seção e a anterior, vemos que agora o ponto de equilíbrio não se encontra no centro da ilha, mas em

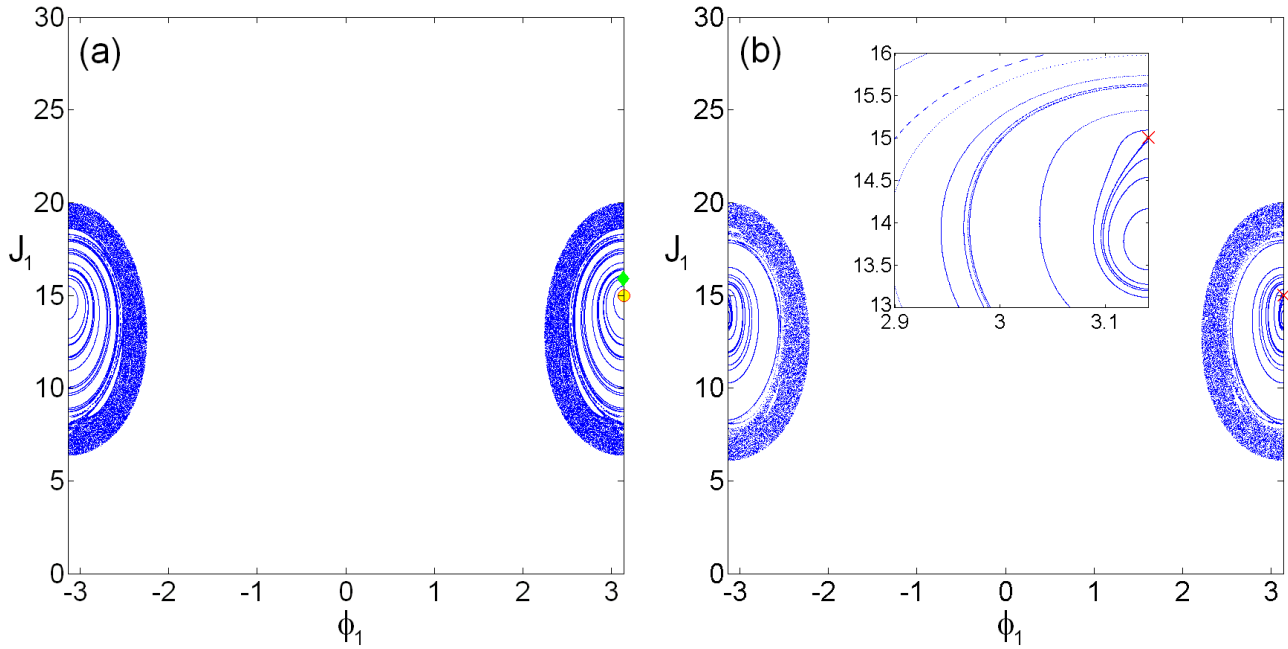


Figura 6.2.1: Seções de Poincaré em $\phi_2 = 0$ que contêm o ponto fixo de poço vazio para o regime de colisões atrativas. Resultados para $N = 30$ e sistema de unidades escolhido tal que $|\Omega| = 1$. A taxa de autocolisão reduzida em ambos gráficos tem valor $\chi = 5$, enquanto a taxa de colisão cruzada é dada por: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{200}$. O ponto fixo de poço vazio está marcado na seção com um círculo amarelo se seu equilíbrio é estável, caso contrário sua localização é marcada por uma cruz vermelha.

um vértice formado por algumas trajetórias próximas, mostrado em detalhe. Este vértice sugere a presença de uma separatriz passando pelo EPV, dividindo a ilha de órbitas quasi-periódicas em uma região exterior e interior.

Seções de Poincaré características do regime de poço vazio para interações bosônicas repulsivas são expostas na figura 6.2.2. À esquerda, vemos a seção em $\phi_2 = 0$ para taxas de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Quando instável, o ponto de equilíbrio de poço vazio faz a conexão entre duas faixas de dinâmica caótica em M . Note a extensa região proibida energeticamente no centro da seção, correspondente a valores intermediários de população no primeiro modo, de maneira a excluir o regime efetivo de poço vazio nas proximidades de $(w_1 = -1, w_2 = 0)$.

O gráfico 6.2.2.b exibe a seção em $\phi_2 = 0$ para $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$. Aumentando o valor absoluto de μ em relação ao gráfico da esquerda, alteramos o caráter do EPV para estável, em oposição ao efeito das colisões cruzadas para o espalhamento atrativo. Ainda comparando com a figura 6.2.2.a, observamos que a região central da seção não é mais proibida. O ponto fixo está agora no meio de uma família de trajetórias quasi-periódicas, que representam o regime populacional efetivo de poço vazio.

A dinâmica populacional de uma órbita próxima ao EPV é exibida no gráfico 6.2.3.a para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. A condição inicial escolhida é mostrada na figura 6.2.1.a pelo losango verde. Como esperado, nas proximidades do ponto fixo estável encontramos uma órbita que demonstra as características do regime de poço vazio. Observe que o segundo poço conserva-se desocupado, omitidas pequenas flutuações de população. As ocupações dos outros dois modos locais oscilam em fase oposta em torno da metade do número total de bósons aprisionados. Note que a amplitude das oscilações nos poços populados é modulada de maneira aproximadamente periódica, sugerindo uma espécie de batimento.

Se tomarmos uma órbita cuja condição inicial é escolhida bastante próxima ao EPV na figura

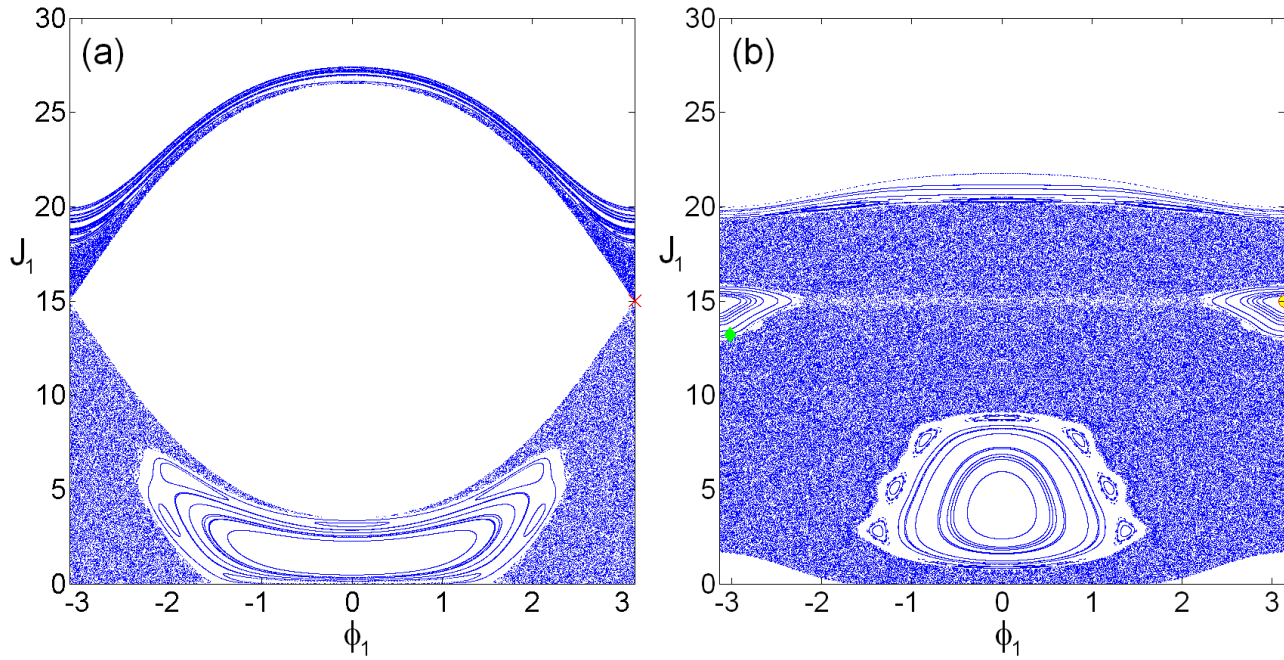


Figura 6.2.2: Seções de Poincaré em $\phi_2 = 0$ que contêm o ponto fixo de poço vazio para o regime de colisões repulsivas. Os valores dos parâmetros comuns entre os dois gráficos são $N = 30$, $|\Omega| = 1$ e $\chi = -5$. Os valores do parâmetro reduzido de colisão cruzada são dados por: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{10}$.

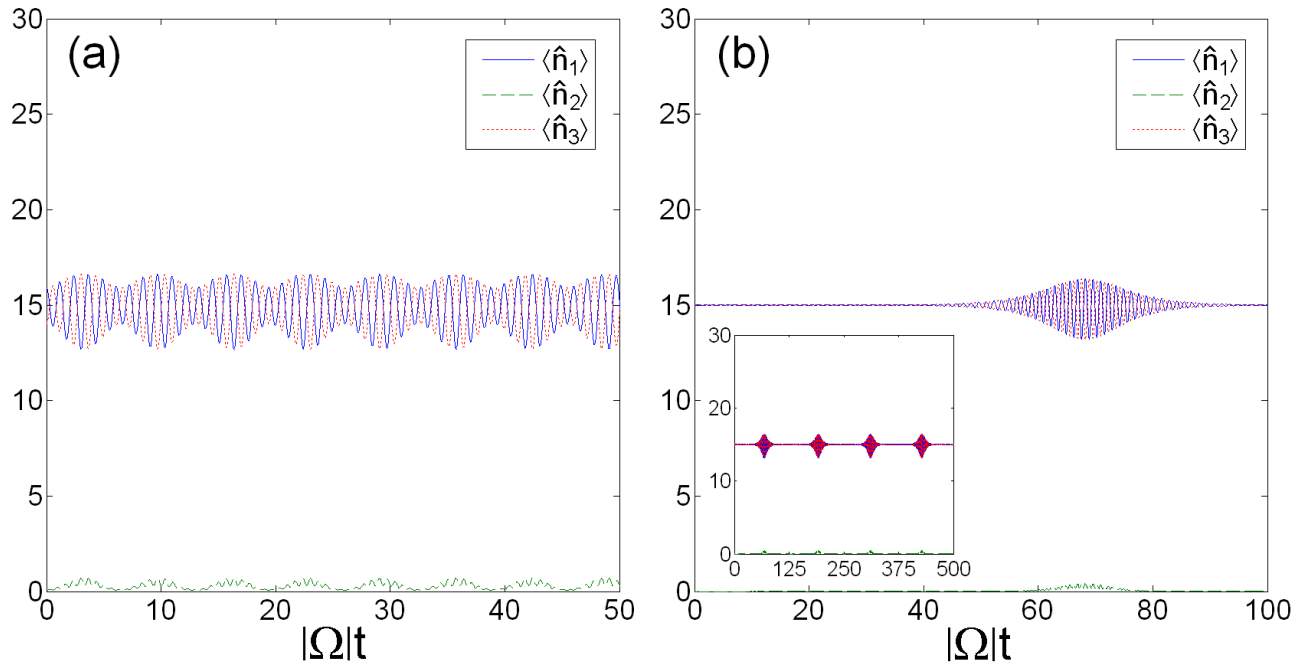


Figura 6.2.3: Dinâmica de populacional para trajetórias próximas ao ponto fixo de poço vazio considerando colisões atrativas. Os conjuntos de parâmetros destes gráficos são os mesmos da figura 6.2.1, portanto $N = 30$, $|\Omega| = 1$ e $\chi = 5$. A taxa de colisão cruzada é dada por: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{200}$.

6.2.1.b, obtemos a dinâmica populacional mostrada no gráfico 6.2.3.b. Esta é uma das trajetórias que exibe um vértice justamente na localização do ponto fixo instável, para parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{200}$. As características do sistema são claramente as mesmas do regime dinâmico de poço vazio, apresentando o segundo poço desocupado e os modos restantes oscilando em fase oposta acerca da metade da população total. No entanto, estas trajetórias com vértice possuem modulação das oscilações populacionais distinta das outras órbitas quasi-periódicas. As flutuações praticamente se extinguem^{6.5} por um longo intervalo de tempo e retornam de forma regular. Notamos que quanto mais a trajetória se aproxima do ponto fixo instável, maior é o período de extinção das oscilações.

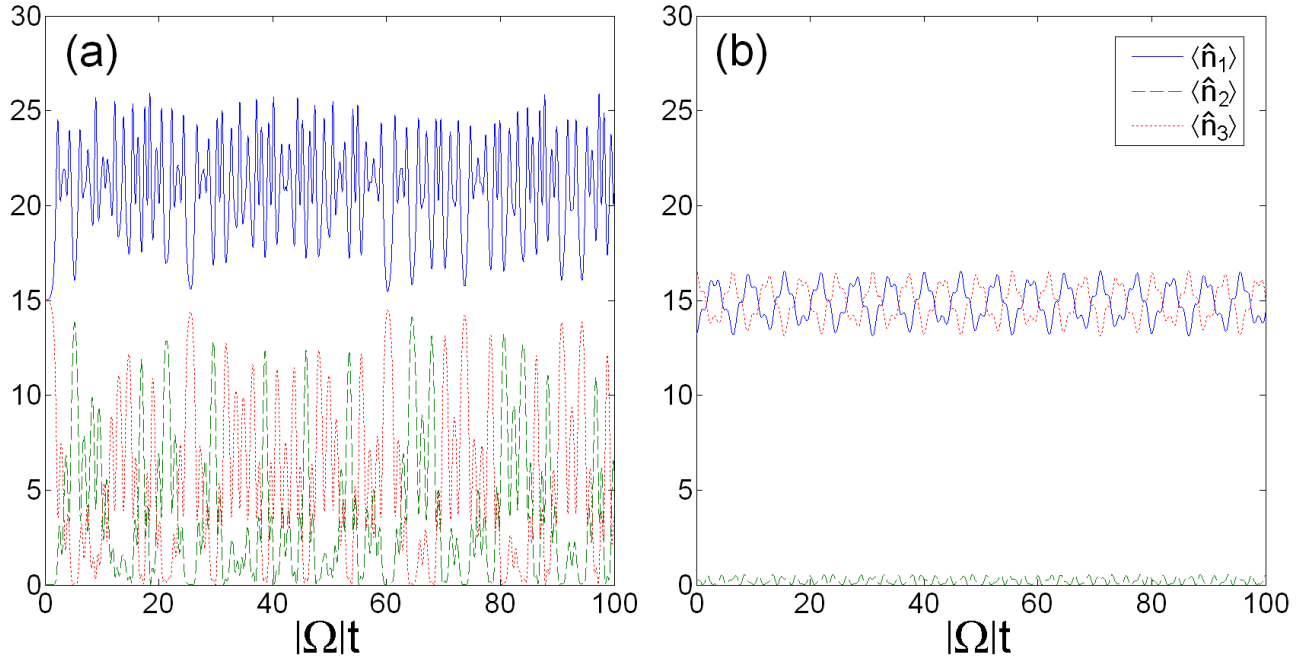


Figura 6.2.4: Dinâmica populacional de trajetórias próximas ao ponto de equilíbrio de poço vazio para colisões repulsivas. Os parâmetros do sistema são os mesmos da figura 6.2.2, logo temos $N = 30$, $|\Omega| = 1$ e $\chi = -5$. O parâmetro de colisão cruzada é dado por: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{10}$.

A figura 6.2.4 mostra a dinâmica populacional para os dois conjuntos de parâmetros encontrados no gráfico 6.2.2, quando consideramos interações repulsivas. À esquerda vemos a dinâmica populacional para uma condição inicial escolhida bastante próxima do EPV na figura 6.2.2.a, na faixa superior de dinâmica caótica, com taxas de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Note que rapidamente a configuração inicial de poço vazio é perdida, acontecendo sucessivas **inversões populacionais** entre o terceiro e o segundo modos, enquanto o primeiro poço permanece com maior parte dos bósons do condensado, exibindo um “**gap**” estável entre sua ocupação e aquelas dos demais modos.

Diferentemente da circunstância de colisões atrativas, não podemos encontrar órbitas associadas ao regime populacional de poço vazio quando o EPV é instável, pois as proximidades deste ponto apresentam apenas regimes caóticos. Repare na figura 5.4.3 que sem a presença de colisões cruzadas não podemos encontrar uma região no espaço parâmetros onde o EPV é estável, de maneira que não seria possível alcançar o regime populacional efetivo de poço vazio para colisões repulsivas.

Contudo, apenas aumentando a importância das interações cruzadas podemos tornar o ponto fixo

^{6.5}As amplitudes são da ordem de 10^{-4} .

($w_1 = -1, w_2 = 0$) estável e recuperar o regime de poço vazio. A figura 6.2.4.b mostra a dinâmica populacional para a condição inicial indicada pelo losango verde no gráfico 6.2.2.b, para $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$. A trajetória exposta faz parte de uma família de órbitas com centro no EPV e exibe o caráter dinâmico deste estado. Novamente observamos flutuações de população no segundo modo local e inversões populacionais de pequena amplitude, em relação à ocupação total, no primeiro e terceiro modos.

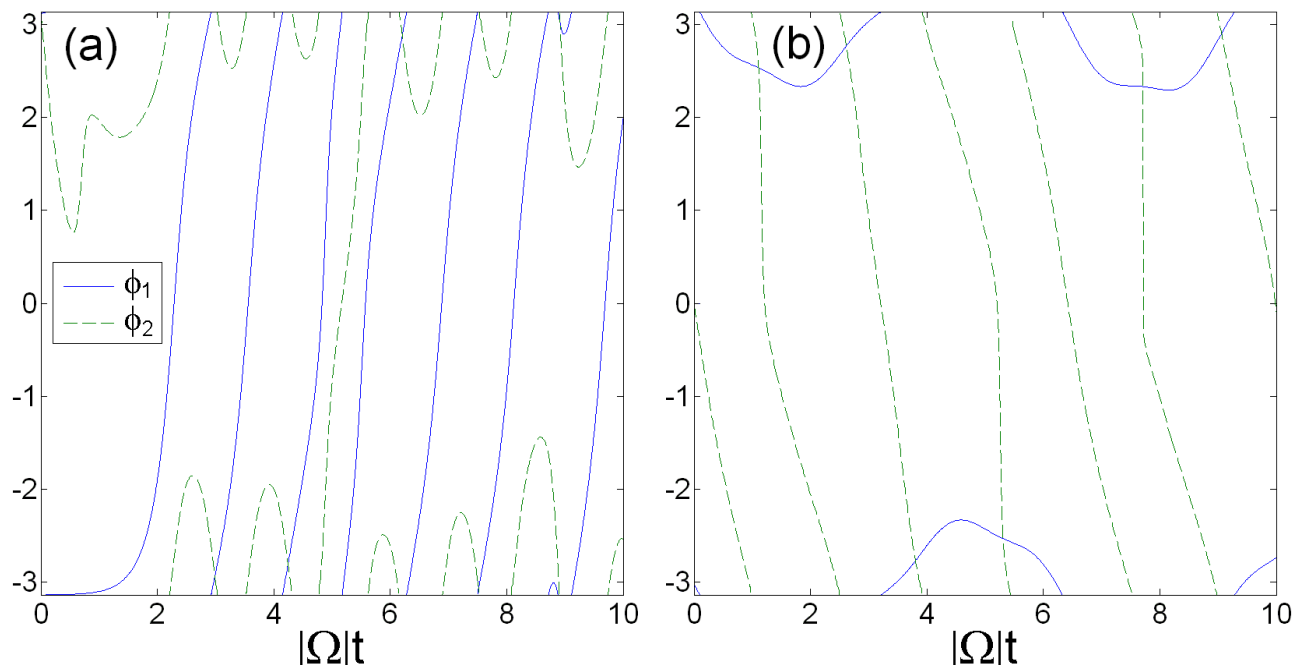


Figura 6.2.5: Dinâmica de fase das trajetórias cuja evolução populacional observamos na figura 6.2.4. Em ambos os gráficos são conservados os valores dos parâmetros $N = 30$, $|\Omega| = 1$ e $\chi = -5$. A taxa de colisão cruzada é variada: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{10}$.

Na figura 6.2.5 exemplificamos a dinâmica de fase clássica para as mesmas duas condições iniciais utilizadas na figura 6.2.4. Quando $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, temos apenas trajetórias caóticas próximas ao ponto fixo, cujo comportamento de fase não exibe nenhum padrão observável, como vemos no exemplo do gráfico 6.2.5.a. As fases ϕ_1 e ϕ_2 percorrem livremente todo espaço de configuração, diferentemente do esperado para a dinâmica de poço vazio.

A dinâmica no espaço configuracional da órbita quasi-periódica em regime populacional de poço vazio é mostrada no gráfico 6.2.5.b, com taxas de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$. Como esperado, a diferença de fase entre o primeiro e terceiro modo fica limitada a oscilar em torno de $\phi_1 = \pi$, ao passo que a diferença de fase entre o segundo e o terceiro modo exibe uma rotação livre, indicando nenhum comportamento preferencial da fase coletiva do modo praticamente vazio.

Agora vamos comparar os resultados obtidos do método análogo clássico para $N = 30$ partículas e os cálculos quânticos exatos. Escolhendo como estado inicial o estado coerente cujos parâmetros w_1 e w_2 coincidem com a localização da condição inicial clássica, podemos pôr à prova a qualidade de nossa aproximação semiclássica.

O gráfico 6.2.6 apresenta as dinâmicas populacionais para estados coerentes iniciais centrados nas mesmas condições iniciais utilizadas para as órbitas clássicas da figura 6.2.3, para colisões atrativas.

Quando o EPV é estável, para parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, há bom acordo qualita-

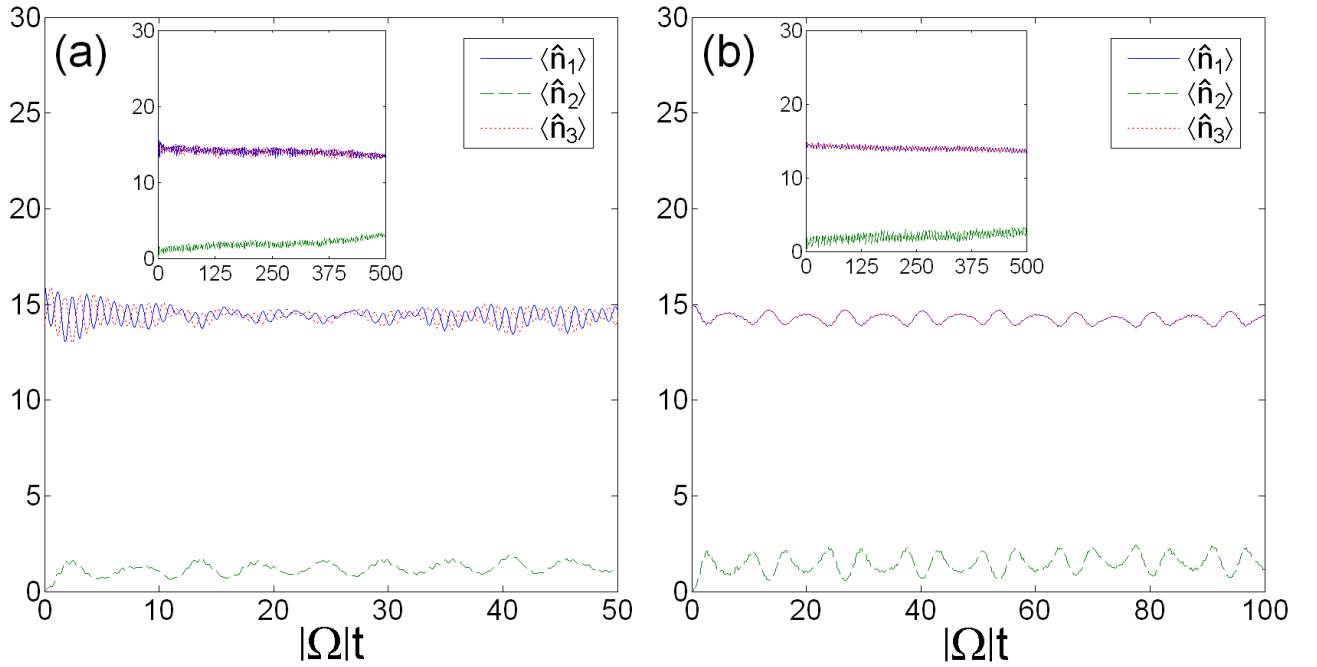


Figura 6.2.6: Dinâmica populacional quântica exata para mesmas condições iniciais e parâmetros da figura 6.2.3. As curvas mostram a média dos operadores de população em cada modo local evoluída no tempo pelo Hamiltoniano de parâmetros $N = 30$, $|\Omega| = 1$ e $\chi = 5$, com taxa de colisão cruzada dada por: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{200}$.

tivo entre os resultados quântico e clássico, conforme observado no gráfico 6.2.3.a. Como previsto, o segundo modo permanece pouco ocupado, enquanto os poços restantes dividem os demais bósons em oscilações de fase oposta. Contudo, notamos também algumas distinções na abordagem quântica, como a modulação completamente aperiódica das oscilações nos modos populados e um lento acréscimo na ocupação do segundo modo, como vemos no *inset* do gráfico.

A vagarosa ocupação do segundo modo local não compromete a preferência populacional dos outros poços, pois é na realidade um fenômeno de período bastante duradouro. Logo, após um grande intervalo de tempo, a ocupação média do segundo poço volta a decrescer, permanecendo sempre bem menos populado em relação ao modos restantes.

Próximo ao ponto fixo instável no gráfico 6.2.1.b encontramos trajetórias no regime de poço vazio cujas oscilações apresentavam um amortecimento periódico. Contudo, não observamos este fenômeno na solução quântica associada, apresentada na figura 6.2.6.b, para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{200}$. Novamente o cálculo comparativo quântico exibe corretamente o regime populacional de poço vazio, mas com diferenças qualitativas. Além da ausência do amortecimento periódico e da presença de ocupação periódica extra no segundo modo, observamos que as oscilações nos modos bem populados estão “praticamente” em fase, conservando estes dois poços “quase” igualmente ocupados, diferentemente da aproximação semiclássica. As palavras “praticamente” e “quase” estão entre aspas porque existem oscilações populacionais em fase oposta sobrepostas às oscilações observadas no gráfico, mas as amplitudes daquelas são apenas da ordem de 10^{-4} . Esta é a mesma ordem das oscilações em fase oposta quando amortecidas na aproximação semiclássica, recuperando parte do acordo qualitativo.

A dinâmica populacional quântica para o estado coerente centrado na mesma condição inicial caótica do gráfico 6.2.4.a é mostrada na figura 6.2.7.a, para parâmetros de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Como esperado, as oscilações nos três modos não exibem qualquer periodicidade ou semelhança com o

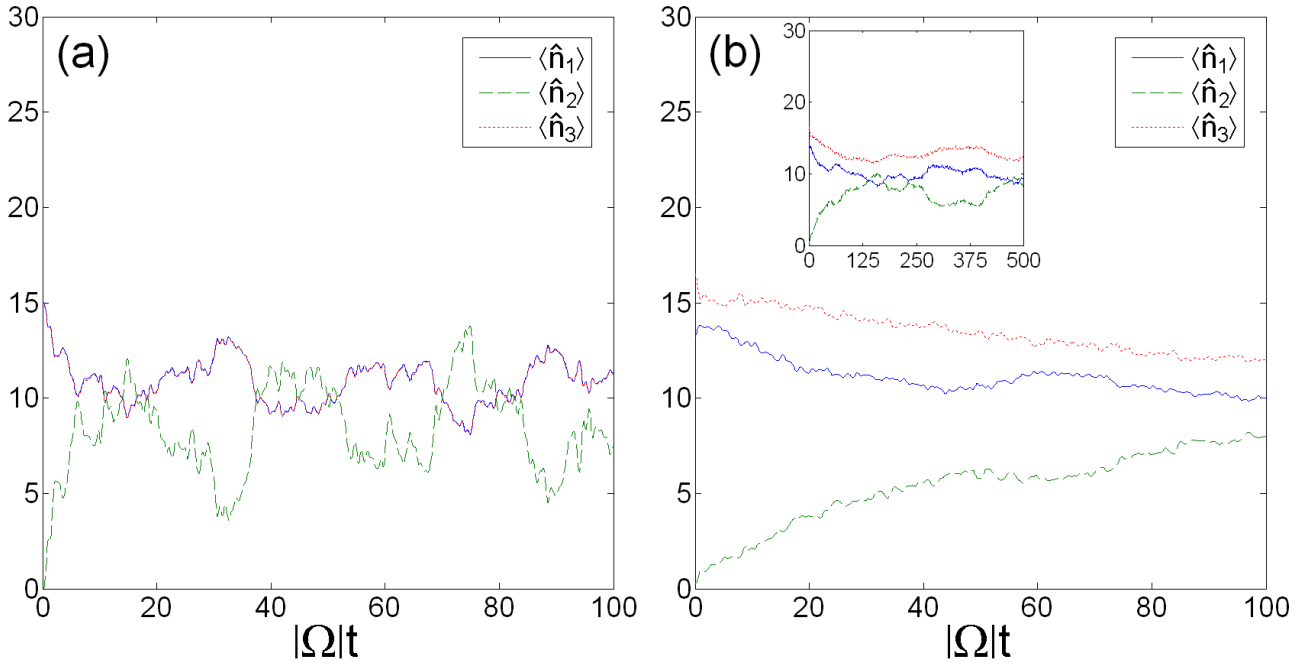


Figura 6.2.7: Resultados quânticos exatos das médias dos operadores de população nos três modos locais para mesmas condições iniciais e parâmetros da figura 6.2.4. Os valores de parâmetros $N = 30$, $|\Omega| = 1$ e $\chi = -5$ são comuns nos dois gráficos, mas taxa de colisão cruzada é variada: (a) $\mu = \frac{\chi}{100}$ e (b) $\mu = \frac{\chi}{10}$.

regime populacional de poço vazio. No entanto, não observamos correspondência quantitativa com a abordagem semiclássica, pois não encontramos novamente a ocupação privilegiada do primeiro poço, embora ainda existam inversões populacionais entre o segundo e o terceiro modos.

Podemos notar algumas semelhanças entre as dinâmicas populacionais quânticas mostradas nas figuras 6.2.6.b e 6.2.7.a, os dois casos nos quais o EPV é instável classicamente. Nestas duas circunstâncias vemos que o primeiro e terceiro modos locais permanecem quase igualmente ocupados, exceto por uma oscilação sobreposta de fase oposta e amplitude ínfima. Contudo, o caso caótico não apresenta corretamente o regime de poço vazio, pois rapidamente o segundo modo apresenta ocupação da mesma ordem dos demais poços.

O gráfico 6.2.7.b mostra a dinâmica de ocupação quântica dos três modos para a mesma condição inicial utilizada na figura 6.2.4.b, quando $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$. Apesar do estado inicial estar centrado sobre uma órbita quasi-periódica no análogo clássico, como mostrado na figura 6.2.2.b, não vemos qualquer traço de periodicidade nas médias ocupacionais quânticas. Notamos também que a população do segundo poço não se preserva indefinidamente inferior aos outros modos, pois alcança a ocupação do primeiro poço após um intervalo de tempo relativamente longo. De maneira geral, o sistema possui comportamento semelhante ao caso caótico já estudado. Este fato pode ser explicado recordando que o estado coerente inicial, apesar de centrado em uma órbita regular, possui uma distribuição finita sobre o espaço de fase, cujo centro está na “borda” da ilha de trajetórias regulares, de maneira que muitas trajetórias caóticas contribuem na propagação do estado. Como já expomos anteriormente, os estados coerentes ocupam regiões não desprezíveis em M para pequenos valores de N , não obstante representarem os estados em $\mathbb{B}_N$ com localização menos incerta.

Utilizamos a pureza generalizada em relação a $su(3)$ para determinar a qualidade da aproximação semiclássica, quantificando o acréscimo de incerteza no estado coerente inicial provocado pelos termos

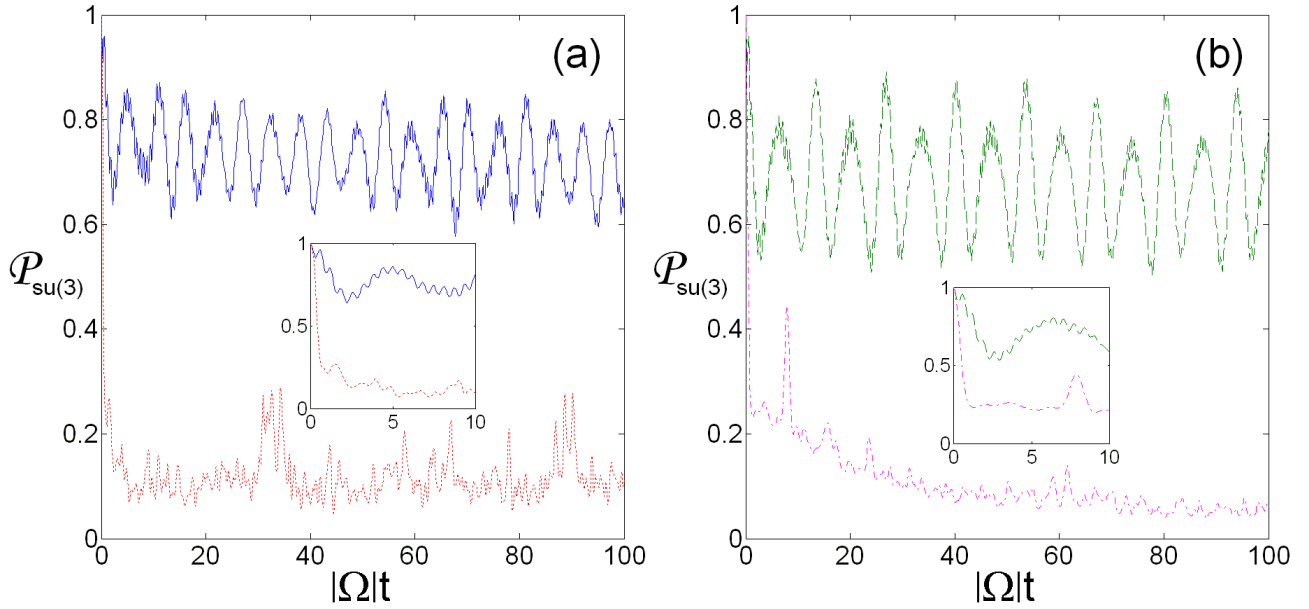


Figura 6.2.8: Evolução da pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(3)}$ para as quatro condições iniciais consideradas nas figuras 6.2.6 e 6.2.7. Em (a), a curva azul sólida (vermelha pontilhada) representa o regime de parâmetros $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$). No gráfico (b), a curva verde tracejada (rosa traço-pontilhada) exhibe os resultados para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{200}$ ($\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$). Para todas curvas $N = 30$ e $|\Omega| = 1$.

não lineares do Hamiltoniano. O método análogo clássico supõe que o estado propaga-se sem perder sua localização sobre o espaço de fase, originando a quebra de correspondência clássico-quântica. Na figura 6.2.8 mostramos as evoluções temporais de $\mathcal{P}_{su(3)}$ para as quatro órbitas estudadas em detalhe nesta seção. As curvas azul sólida e verde tracejada mostram os resultados para as trajetórias associadas às interações atrativas com $\chi = 5$, cujos parâmetros de colisão cruzada são respectivamente $\mu = \frac{\chi}{100}$ e $\mu = \frac{\chi}{200}$. Após um período de decoerência inicial, que vai até aproximadamente $|\Omega|t = 2, 5$, estas duas curvas apresentam um comportamento oscilatório bastante parecido, pois ambas estabilizam suas oscilações quase regulares em torno de valores relativamente altos da pureza, explicando o bom acordo qualitativo entre as abordagens clássica e quântica ao problema. Em comparação com a figura 6.2.6, notamos também que os mínimos de $\mathcal{P}_{su(3)}(t)$ coincidem com os máximos de $\langle \hat{n}_2 \rangle(t)$. Portanto, podemos justificar parte da ocupação quântica adicional no segundo poço como uma perda regular e reversível de coerência. Também observamos que os valores médios de $\mathcal{P}_{su(3)}(t)$ são pouco menores quando o EPV é instável, demonstrando a correspondência inferior deste regime.

A curva vermelha pontilhada (rosa traço-pontilhada) na figura 6.2.8 mostra o comportamento da pureza para o caso de colisões repulsivas, com parâmetros de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$). O primeiro período de decoerência nestas duas curvas é bem mais intenso e rápido que no caso de colisões atrativas, durando apenas até $|\Omega|t \approx 1$. Os valores bem reduzidos alcançados por $\mathcal{P}_{su(3)}$ explicam o significativo desacordo entre o resultado quântico exato e a aproximação semiclassical. Como esperado, mesmo quando tomamos um estado inicial centrado em uma órbita regular clássica, que exhibe corretamente o regime populacional de poço vazio, não obtivemos na pureza resultados diferentes da trajetória caótica. As duas curvas de $\mathcal{P}_{su(3)}(t)$ para colisões repulsivas exibem comportamento irregular e indicam a delocalização total do estado em M . Estas características confirmam a conclusão acerca do **efeito de borda** na dinâmica populacional da figura 6.2.7.b, pois o comportamento de sua pureza

generalizada associada reflete a influência das regiões caóticas do espaço de fase na propagação do estado coerente inicial, cuja distribuição sobre M não é pontualmente localizada.

6.3 Representações Quânticas para $SU(3)$

A ponte entre o espaço de fase generalizado M e um observável O sobre o espaço de Hilbert foi feita anteriormente utilizando a média do operador em estados parametrizados, que tomamos como os estados coerentes no contexto do análogo clássico. Esta correspondência nos sugere uma maneira de associar estados quânticos arbitrários ao espaço de fase clássico. Assim, estendemos a representação no espaço de fase dos estados coerentes, que simbolizam estados clássicos ou pontos em M , aos demais estados do sistema que não estão contidos no subespaço parametrizado $s(M)$.

Primeiramente, definimos o operador densidade ρ para um sistema qualquer de N partículas em $\mathbb{B}_N$:

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (6.3.1)$$

O estado normalizado $|\psi_k\rangle$ tem probabilidade p_k na mistura estatística, tal que $\sum_k p_k = 1$ e $p_k \geq 0$.

Dado o estado coerente normalizado por (4.2.1), definimos então a representação Q ou Husimi de ρ :

$$Q(\vec{w}^*, \vec{w}) \equiv \langle N; \vec{w} | \rho | N; \vec{w} \rangle. \quad (6.3.2)$$

Substituindo (6.3.1), vemos que $Q(\vec{w}^*, \vec{w})$ é limitada superiormente e inferiormente:

$$\begin{aligned} Q(\vec{w}^*, \vec{w}) &= \sum_k p_k |\langle \psi_k | N; \vec{w} \rangle|^2 \geq 0, \text{ pois } p_k \geq 0 \text{ e } |\langle \psi_k | N; \vec{w} \rangle| \geq 0; \\ &= \sum_k p_k |\langle \psi_k | N; \vec{w} \rangle|^2 \leq 1, \text{ pois } \sum_k p_k = 1 \text{ e } |\langle \psi_k | N; \vec{w} \rangle| \leq 1. \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

Por simplicidade, passamos a considerar apenas o caso de um estado puro:

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (6.3.4)$$

Podemos expandir o estado $|\psi\rangle$ na base $\{|n_1, n_2, n_3\rangle\}$ de $\mathbb{B}_N$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1+n_2+n_3=N} c_{\vec{n}} |\vec{n}\rangle. \quad (6.3.5)$$

Por simplicidade, introduzimos a notação $\vec{n} = (n_1 \ n_2 \ n_3)^T$ para o trio de números não negativos das populações nos três modos. Em termos dos coeficientes $c_{\vec{n}}$, (6.3.4) assume a seguinte forma:

$$\rho = \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} c_{\vec{n}} c_{\vec{n}'}^* |\vec{n}\rangle \langle \vec{n}'|. \quad (6.3.6)$$

A somatória $\sum_{\vec{n}, \vec{n}'}$ indica a soma sobre todos valores de $\vec{n}$ e $\vec{n}'$ tais que $n_1 + n_2 + n_3 = n'_1 + n'_2 + n'_3 = N$.

Com (6.3.6) podemos expandir também $Q(\vec{w}^*, \vec{w})$ em termos dos coeficientes dos estados coerentes na base $|\vec{n}\rangle$, encontrados em (4.2.1):

$$\begin{aligned}
Q(\vec{w}^*, \vec{w}) &= \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} c_{\vec{n}'}^* c_{\vec{n}} \langle N; \vec{w} | \vec{n} \rangle \langle \vec{n}' | N; \vec{w} \rangle \\
&= (|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{-N} \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} \frac{N! c_{\vec{n}'}^* c_{\vec{n}} w_1^{n'_1} w_2^{n'_2} w_1^{*n_1} w_2^{*n_2}}{(n_1! n_2! n_3! n'_1! n'_2! n'_3!)^{\frac{1}{2}}}.
\end{aligned} \tag{6.3.7}$$

Agora, lembrando que podemos escrever uma resolução diagonal da identidade nos estados coerentes dentro do espaço $\mathbb{B}_N$, dada em (4.2.9) juntamente com o elemento de volume normalizado no espaço de fase de (4.2.8), notamos que:

$$\begin{aligned}
\int_M d\Omega Q(\vec{w}^*, \vec{w}) &= \int d\Omega \langle N; \vec{w} | \rho | N; \vec{w} \rangle \\
&= \sum_{\vec{n}} \int d\Omega \langle N; \vec{w} | \vec{n} \rangle \langle \vec{n} | \rho | N; \vec{w} \rangle \\
&= \sum_{\vec{n}} \langle \vec{n} | \rho \int d\Omega | N; \vec{w} \rangle \langle N; \vec{w} | \vec{n} \rangle \\
&= \frac{1}{\dim \mathbb{B}_N} \sum_{\vec{n}} \langle \vec{n} | \rho | \vec{n} \rangle = (\dim \mathbb{B}_N)^{-1};
\end{aligned} \tag{6.3.8}$$

onde empregamos a relação de completeza de $\mathbb{B}_N$ em termos dos estados $|\vec{n}\rangle$, obtida em (8.1.10'). Também usamos que ρ representa um estado normalizado ($\text{Tr} \rho = 1$) restrito a N partículas. Podemos renormalizar a medida positiva $d\Omega$, definindo:

$$d\mu_N(\vec{w}) \equiv \dim \mathbb{B}_N d\Omega = \frac{2 \dim \mathbb{B}_N d^2 w_1 d^2 w_2}{\pi^2 (|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^3}. \tag{6.3.9}$$

Aqui utilizamos novamente a notação $d^2 w_j = d(\text{Im} w_j) d(\text{Re} w_j)$. Note que $d\mu_N$ depende do número total de partículas por meio de $\dim \mathbb{B}_N = \frac{(N+2)(N+1)}{2}$. Também observe que agora temos:

$$\int_M d\mu_N |N; \vec{w}\rangle \langle N; \vec{w}| = \mathbb{1}_{\mathbb{B}_N}. \tag{6.3.10}$$

Desta maneira, temos de (6.3.8) que a representação Husimi restrita ao espaço de N partículas está normalizada da seguinte forma:

$$\int_M d\mu_N Q(\vec{w}^*, \vec{w}) = 1. \tag{6.3.11}$$

Então, as propriedades (6.3.3) e (6.3.11) definem a função Q como uma distribuição de probabilidade no espaço de fase clássico, associada ao estado quântico dado por ρ . Assim concluímos que $Q(\vec{w}^*, \vec{w})$ é a ponte que faltava para correspondermos estados quânticos arbitrários ao nosso espaço de fase generalizado.

Podemos mudar a dependência de variáveis de Q para as coordenadas canônicas de ângulo e ação. Neste caso, devemos também trocar as variáveis no elemento de volume (6.3.9), utilizando as transformações (5.2.6) e (5.2.7). Primeiramente, reescrevemos $d\mu_N(\vec{w})$ como função do valor absoluto e da fase das variáveis w_1 e w_2 , notando que suas fases fornecem diretamente as variáveis ϕ_1 e ϕ_2 :

$$d\mu_N(\phi_j, |w_j|) = \frac{2 \dim \mathbb{B}_N |w_1| |w_2| d|w_1| d|w_2| d\phi_1 d\phi_2}{\pi^2 (|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^3}. \quad (6.3.12)$$

Agora, calculamos o seguinte Jacobiano:

$$\begin{aligned} d|w_1| d|w_2| &= \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial |w_1|}{\partial J_1} & \frac{\partial |w_1|}{\partial J_2} \\ \frac{\partial |w_2|}{\partial J_1} & \frac{\partial |w_2|}{\partial J_2} \end{array} \right| dJ_1 dJ_2 \\ &= \frac{N}{4} \frac{dJ_1 dJ_2}{\sqrt{J_1 J_2 (N - J_1 - J_2)^2}}. \end{aligned} \quad (6.3.13)$$

Substituindo (6.3.13) em (6.3.12), juntamente com as transformações (5.2.6), temos finalmente:

$$d\mu_N(\phi_i, J_i) = \frac{\dim \mathbb{B}_N}{2\pi^2 N^2} dJ_1 dJ_2 d\phi_1 d\phi_2. \quad (6.3.14)$$

Note que o elemento de volume assume forma simples de coordenadas retangulares. Por consistência devemos ter:

$$\begin{aligned} \int_M d\mu_N(\phi_i, J_i) &= \frac{\dim \mathbb{B}_N}{2\pi^2 N^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^N \int_0^{N-J_1} dJ_2 dJ_1 d\phi_2 d\phi_1 \\ &= \dim \mathbb{B}_N. \end{aligned} \quad (6.3.15)$$

É interessante notar que, utilizando a medida $d\mu_N$, o volume do espaço de fase é igual à dimensão do espaço de Hilbert associado, de forma que cada estado quântico ocupa uma unidade de volume. Também lembramos que devemos sempre levar em conta os limites do espaço de fase em $0 \leq J_1 + J_2 \leq N$. Agora, substituímos as transformações (5.2.6) em (6.3.7):

$$Q(\phi_k, J_k) = \left(\frac{N - J_1 - J_2}{N} \right)^N \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} c_{\vec{n}'}^* c_{\vec{n}} \frac{N! e^{-i(n'_1 - n_1)\phi_1} e^{-i(n'_2 - n_2)\phi_2}}{(n_1! n_2! n_3! n'_1! n'_2! n'_3!)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{J_1}{N - J_1 - J_2} \right)^{\frac{n'_1 + n_1}{2}} \left(\frac{J_2}{N - J_1 - J_2} \right)^{\frac{n'_2 + n_2}{2}}. \quad (6.3.16)$$

Podemos obter uma distribuição semiclássica apenas para ϕ_1 e ϕ_2 , integrando a expressão (6.3.16) em J_1 e J_2 , assim como podemos também encontrar uma representação semiclássica para as ações integrando nos ângulos. Apesar de Q não fornecer as distribuições de probabilidades marginais quânticas corretas, estas representações podem ser interpretadas como funções de onda semiclássicas nos espaços de configuração e momento, respectivamente. Para a distribuição nas coordenadas de ação fazemos:

$$\begin{aligned} Q_J(J_i) &\equiv \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_1 d\phi_2}{(2\pi)^2} Q(\phi_i, J_i) \\ &= \left(\frac{N - J_1 - J_2}{N} \right)^N \sum_{\vec{n}} \frac{N! |c_{\vec{n}}|^2}{n_1! n_2! n_3!} \left(\frac{J_1}{N - J_1 - J_2} \right)^{n_1} \left(\frac{J_2}{N - J_1 - J_2} \right)^{n_2}. \end{aligned} \quad (6.3.17)$$

Já para a representação no espaço de ângulos:

$$\begin{aligned}
Q_\phi(\phi_k) &\equiv \int_0^N \int_0^{N-J_1} \frac{2 \dim \mathbb{B}_N dJ_1 dJ_2}{N^2} Q(\phi_i, J_i) \\
&= \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} \frac{N! c_{\vec{n}'}^* c_{\vec{n}} e^{-i(n'_1 - n_1)\phi_1} e^{-i(n'_2 - n_2)\phi_2}}{(n_1! n_2! n_3! n'_1! n'_2! n'_3!)^{\frac{1}{2}}} \\
&\quad \times \int \frac{2 \dim \mathbb{B}_N dJ_1 dJ_2}{N^{N+2}} (N - J_1 - J_2)^{N - \frac{n_1 + n'_1 + n_2 + n'_2}{2}} J_1^{\frac{n_1 + n'_1}{2}} J_2^{\frac{n_2 + n'_2}{2}}.
\end{aligned} \tag{6.3.18}$$

A última integral necessita de um pouco mais de trabalho:

$$\begin{aligned}
\int_0^N \int_0^{N-J_1} dJ_2 dJ_1 (N - J_1 - J_2)^{N - N_1 - N_2} J_1^{N_1} J_2^{N_2} &= N^{N+2} \int_0^1 dv (1-v)^{N-N_1+1} v^{N_1} \int_0^1 du (1-u)^{N-N_1-N_2} u^{N_2} \\
&= N^{N+2} B(N_1 + 1, N - N_1 + 2) B(N_2 + 1, N - N_1 - N_2 + 1).
\end{aligned} \tag{6.3.19}$$

Por simplicidade introduzimos $N_1 \equiv \frac{n_1 + n'_1}{2}$ e $N_2 \equiv \frac{n_2 + n'_2}{2}$, notando que estas duas grandezas podem assumir valores semi-inteiros. Também utilizamos a definição da função beta:

$$B(\zeta, \xi) = \int_0^1 t^{\zeta-1} (1-t)^{\xi-1} dt. \tag{6.3.20}$$

A função $B(\zeta, \xi)$ pode ser escrita em termos da função gamma:

$$B(\zeta, \xi) = \frac{\Gamma(\zeta)\Gamma(\xi)}{\Gamma(\zeta + \xi)}. \tag{6.3.21}$$

Já a função $\Gamma(\zeta)$ é definida como:

$$\Gamma(\zeta) = \int_0^\infty e^{-t} t^{\zeta-1} dt. \tag{6.3.22}$$

Inserindo (6.3.19) em (6.3.18), substituída com (6.3.21), obtemos finalmente a distribuição semi-clássica para o espaço de configuração:

$$Q_\phi(\phi_k) = \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} c_{\vec{n}'}^* c_{\vec{n}} \frac{\Gamma(\frac{n'_1 + n_1}{2} + 1) \Gamma(\frac{n'_2 + n_2}{2} + 1) \Gamma(\frac{n'_3 + n_3}{2} + 1)}{(n_1! n_2! n_3! n'_1! n'_2! n'_3!)^{\frac{1}{2}}} e^{-i(n'_1 - n_1)\phi_1} e^{-i(n'_2 - n_2)\phi_2}. \tag{6.3.23}$$

Cada função Γ envolvida no cálculo da representação Q_ϕ possui argumento dependente dos índices das duas somatórias, de maneira que não podemos fatorar Q_ϕ como o produto de uma soma em $\vec{n}$ e outra em $\vec{n}'$. Esta impossibilidade de fatoração torna o cálculo da representação no espaço de configuração muito onerosa, compelindo-nos a buscar outra forma de visualização de um estado arbitrário $|\psi\rangle$ de N partículas no espaço dos ângulos ϕ_1 e ϕ_2 .

Primeiramente definimos os seguintes estados, dependentes das fases conjugadas às ocupações nos três modos do condensado, já introduzidas em (5.1.13):

$$\begin{aligned}
|\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3\rangle &\equiv \sum_{n_1+n_2+n_3=N} e^{-in_1\varphi_1} e^{-in_2\varphi_2} e^{-in_3\varphi_3} |n_1, n_2, n_3\rangle \\
&= e^{-iN\varphi_3} \sum_{n_1+n_2+n_3=N} e^{-in_1(\varphi_1-\varphi_3)} e^{-in_2(\varphi_2-\varphi_3)} |n_1, n_2, n_3\rangle \\
&= e^{-iN\varphi_3} \sum_{n_1+n_2+n_3=N} e^{-in_1\phi_1} e^{-in_2\phi_2} |n_1, n_2, n_3\rangle \equiv e^{-iN\varphi_3} |\phi_1, \phi_2\rangle.
\end{aligned} \tag{6.3.24}$$

Portanto, descartando a fase global $e^{-iN\varphi_3}$, podemos trabalhar apenas com estados dependentes das diferenças de fase entre os modos, em cujo espaço queremos encontrar a representação de (6.3.5). Os estados $|\phi_1, \phi_2\rangle$ não podem ser considerados auto-estados de um operador Hermitiano de fase, pois o produto escalar de dois destes estados não fornece uma delta de Dirac, como esperado de duas grandezas contínuas como ϕ_1 e ϕ_2 .

$$\langle \phi'_1, \phi'_2 | \phi_1, \phi_2 \rangle = \sum_{n_1+n_2+n_3=N} e^{in_1(\phi'_1-\phi_1)} e^{in_2(\phi'_2-\phi_2)}. \tag{6.3.25}$$

É fácil ver que a somatória acima somente seria proporcional a $\delta(\phi'_1-\phi_1)\delta(\phi'_2-\phi_2)$ se permitíssemos que as somas sobre n_1 e n_2 corresse de $-\infty$ a ∞ . No entanto, populações negativas não estão presentes no espaço de Fock usual e por este motivo não é possível escrever um operador Hermitiano de fase no espaço de Hilbert [PB97]. Contudo, podemos ainda escrever funções de onda no espaço angular para os estados de número:

$$\langle \phi_1, \phi_2 | n_1, n_2, n_3 \rangle = e^{in_1\phi_1} e^{in_2\phi_2}. \tag{6.3.26}$$

Ou para um estado arbitrário $|\psi\rangle$ em $\mathbb{B}_N$:

$$\langle \phi_1, \phi_2 | \psi \rangle = \sum_{\vec{n}} c_{\vec{n}} e^{in_1\phi_1 + in_2\phi_2}. \tag{6.3.26'}$$

A distribuição de probabilidade no espaço angular de ϕ_1 e ϕ_2 é dada então por:

$$\begin{aligned}
\Phi(\phi_1, \phi_2) &\equiv |\langle \phi_1, \phi_2 | \psi \rangle|^2 = \left| \sum_{\vec{n}} c_{\vec{n}} e^{i\phi_1 n_1} e^{i\phi_2 n_2} \right|^2 \\
&= \sum_{\vec{n}', \vec{n}} c_{\vec{n}'}^* c_{\vec{n}} e^{i\phi_1(n_1-n_1')} e^{i\phi_2(n_2-n_2')}.
\end{aligned} \tag{6.3.27}$$

Esta distribuição é denominada **função semiclássica de fase** [MJ06]. Note que Φ tem a mesma dependência angular de Q_ϕ , mas a ausência das funções Γ torna possível a fatoração das somatórias em (6.3.27).

Os coeficientes $\frac{\Gamma\left(\frac{n_i+n'_i}{2}+1\right)}{\sqrt{n_i!n'_i!}}$ têm a função de suavizar as oscilações em Q_ϕ , quando comparada a Φ , pois estes fatores favorecem os termos das somatórias onde n_i tem valor próximo a n'_i . Os coeficientes extras em Q_ϕ atingem valor máximo igual a 1 para $n_i = n'_i$ e decrescem monotonicamente à medida que a diferença $|n_i - n'_i|$ aumenta. Como exemplo, calculamos explicitamente as distribuições Φ e Q_ϕ do estado $|\psi_{ex}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|20, 10, 0\rangle + |10, 20, 0\rangle)$:

$$\begin{aligned}
Q_\phi^{ex} &= 1 + \frac{(15!)^2}{20!10!} \cos[10(\phi_1 - \phi_2)] \approx 1 + 0,2 \cos[10(\phi_1 - \phi_2)]; \\
\Phi^{ex} &= 1 + \cos[10(\phi_1 - \phi_2)].
\end{aligned}
\tag{6.3.28}$$

Também podemos notar que a função semiclássica de fase possui a mesma normalização de Q_ϕ , se o estado $|\psi\rangle$ tem norma unitária:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_1 d\phi_2}{(2\pi)^2} \Phi(\phi_1, \phi_2) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_1 d\phi_2}{(2\pi)^2} Q_\phi(\phi_1, \phi_2) = 1.
\tag{6.3.29}$$

Enfim, obtivemos uma nova distribuição no espaço de configuração de três modos cujo cálculo é muito menos árduo, devido à fatoração das somatórias. Outra vantagem de Φ sobre Q_ϕ é que a primeira fornece as distribuições marginais corretas de probabilidade no espaço angular [PB97].

Fazemos agora uma pequena digressão, buscando o resultado da ação dos operadores de aniquilação nos estados coerentes. Aplicando os operadores a_i em (4.2.1), segundo (4.1.15.b), chegamos em:

$$a_i |N; \vec{w}\rangle = \frac{\sqrt{N} w_i}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{\frac{1}{2}}} |N-1; \vec{w}\rangle; \text{ com } i = 1, 2, 3 \text{ e } w_3 = 1.
\tag{6.3.30}$$

Aqui vemos claramente que os estados coerentes de $SU(3)$ não são auto-estados dos operadores de aniquilação, diferentemente dos consagrados estados coerentes do campo, nos quais a definição de deslocamento imposto pelo grupo dinâmico é equivalente a defini-los como auto-estados dos operadores a_i .

Ainda mais, a operação dos a_i nos estados coerentes de $SU(3)$ fornece um novo estado coerente de mesmos parâmetros $\vec{w}$, mas pertencente a outro espaço, que também carrega uma representação irredutível de $SU(3)$. Como esperado, passamos a um espaço bosônico com uma partícula a menos ($\mathbb{B}_N \rightarrow \mathbb{B}_{N-1}$) e mesmo que os valores de $\vec{w}$ coincidam, estes estão associados a outro espaço de fase generalizado.

Em geral, podemos escrever um operador observável de N partículas em três modos apenas com operadores de aniquilação e criação ordenados de forma antinormal:

$$O_A = \sum_{i,j,k} \sum_{i',j',k'} \sigma_{ijk,i'j'k'} a_1^i a_2^j a_3^k a_1^{\dagger i'} a_2^{\dagger j'} a_3^{\dagger k'}.
\tag{6.3.31}$$

Devido à conservação do número de partículas no sistema do condensado em três poços, temos uma regra de seleção garantindo que todos os observáveis relevantes ao problema não têm elementos de matriz entre estados com diferentes números de partículas, pois os operadores podem ser reduzidos a blocos nas representações irredutíveis bosônicas de $SU(3)$. Logo, devemos nos restringir aos operadores que possuam coeficientes $\sigma_{ijk,i'j'k'}$ não nulos somente se $i+j+k = i'+j'+k'$, desta forma construímos apenas observáveis que conservem o número de partículas.

Para um sistema de N partículas, podemos ainda restringir os coeficientes não nulos de O_A a aqueles tais que $i+j+k = i'+j'+k' \leq N$. Assim garantimos que, se rearranjado na forma normal, o operador não contenha termos que aniquilem totalmente um estado de N partículas e, neste aspecto, O_A não apresenta termos redundantes:

$$O_A = \sum_{i+j+k=i'+j'+k' \leq N} \sigma_{ijk,i'j'k'} a_1^i a_2^j a_3^k a_1^{\dagger i'} a_2^{\dagger j'} a_3^{\dagger k'}.
\tag{6.3.31'}$$

A média de O_A no estado representado por ρ é dada por:

$$\begin{aligned}
 \langle O_A \rangle &= \text{Tr}(O_A \rho) \\
 &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\vec{n}} \sum_k p_k \langle N; \vec{n} | O_A | \psi_k \rangle \langle \psi_k | N; \vec{n} \rangle \\
 &= \sum_k p_k \langle \psi_k | O_A | \psi_k \rangle.
 \end{aligned} \tag{6.3.32}$$

Acima também usamos a relação de completeza do espaço de Fock bosônico $\mathbb{B}$, $\sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\vec{n}} |N; \vec{n}\rangle \langle N; \vec{n}| = \mathbb{1}$, proveniente de (8.1.19). Para o operador densidade de (6.3.1) e o observável de (6.3.31') calculamos a média como:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}(O_A \rho) &= \sum_{ijk, i'j'k'} \sigma_{ijk, i'j'k'} \text{Tr}(a_1^i a_2^j a_3^k a_1^{\dagger i'} a_2^{\dagger j'} a_3^{\dagger k'} \rho) \\
 &= \sum_{ijk, i'j'k'} \sigma_{ijk, i'j'k'} \sum_{N'=0}^{\infty} \int d\mu_{N'} \text{Tr}(a_1^i a_2^j a_3^k |N'; \vec{w}\rangle \langle N'; \vec{w}| a_1^{\dagger i'} a_2^{\dagger j'} a_3^{\dagger k'} \rho) \\
 &= \sum_{ijk, i'j'k'} \sigma_{ijk, i'j'k'} \sum_{N'=i+j+k}^{\infty} \frac{N'!}{(N'-i-j-k)!} \int d\mu_{N'} \frac{w_1^i w_2^j w_1^{*i'} w_2^{*j'} \delta_{N'-i-j-k, N} \langle N; \vec{w} | \rho | N; \vec{w} \rangle}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{i+j+k}} \\
 &= \sum_{ijk, i'j'k'} \sigma_{ijk, i'j'k'} \frac{(N+i+j+k)!}{N!} \int d\mu_{N+i+j+k} \frac{w_1^i w_2^j w_1^{*i'} w_2^{*j'}}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{i+j+k}} Q(\vec{w}^*, \vec{w}) \\
 &= \int d\Omega \left\{ \sum_{ijk, i'j'k'} \frac{\dim \mathbb{B}_{N+i+j+k} (N+i+j+k)!}{N!} \sigma_{ijk, i'j'k'} \frac{w_1^i w_2^j w_1^{*i'} w_2^{*j'}}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{i+j+k}} \right\} Q(\vec{w}^*, \vec{w}) \\
 &\equiv \int d\Omega \mathcal{O}_A^N(\vec{w}^*, \vec{w}) Q(\vec{w}^*, \vec{w})
 \end{aligned} \tag{6.3.33}$$

Aqui, simplificamos a notação com $\sum_{i+j+k=i'+j'+k' \leq N} \rightarrow \sum_{ijk, i'j'k'}$. Também utilizamos que ρ contém apenas estados de N partículas e empregamos a relação de completeza para o espaço $\mathbb{B}$:

$$\sum_{N=0}^{\infty} \int d\mu_N |N; \vec{w}\rangle \langle N; \vec{w}| = \mathbb{1}. \tag{6.3.34}$$

Definimos em (6.3.33) a função $\mathcal{O}_A^N(\vec{w}^*, \vec{w})$, associada ao observável ordenado antinormalmente, sobre o espaço de fase semiclássico. Apenas conhecendo esta função e a representação Husimi do estado do sistema, podemos calcular a média de O_A . Também podemos relacionar $\mathcal{O}_A^N(\vec{w}^*, \vec{w})$ com a representação P do operador O_A :

$$\begin{aligned}
O_A &= \sum_{ijk, i'j'k'} \sigma_{ijk, i'j'k'} a_1^i a_2^j a_3^k \sum_{N'=0}^{\infty} \int d\mu_{N'} |N'; \vec{w}\rangle \langle N'; \vec{w}| a_1^{\dagger i'} a_2^{\dagger j'} a_3^{\dagger k'} \\
&= \sum_{ijk, i'j'k'} \sum_{N'=i+j+k}^{\infty} \sigma_{ijk, i'j'k'} \int d\Omega \frac{\dim \mathcal{B}_{N'} w_1^i w_2^j w_1^{*i'} w_2^{*j'} |N-i-j-k; \vec{w}\rangle \langle N-i-j-k; \vec{w}|}{(N'-i-j-k)! (|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{i+j+k}} \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \int d\Omega \sum_{ijk, i'j'k'} \sigma_{ijk, i'j'k'} \frac{\dim \mathcal{B}_{N+i+j+k} (N+i+j+k)!}{N!} \frac{w_1^i w_2^j w_1^{*i'} w_2^{*j'}}{(|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1)^{i+j+k}} |N; \vec{w}\rangle \langle N; \vec{w}| \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \int d\Omega |N; \vec{w}\rangle \mathcal{O}_A^N(\vec{w}^*, \vec{w}) \langle N; \vec{w}|.
\end{aligned} \tag{6.3.35}$$

6.4 Equações de Movimento para as Seções de Poincaré

Na seção 5.2 encontramos as equações de movimento do sistema nas variáveis complexas w_i ($i = 1, 2$) e nas variáveis canônicas de ângulo ϕ_i e ação J_i . Estes conjuntos de variáveis eram mais apropriadas na discussão dos pontos de equilíbrio do modelo, devido à simples interpretação física ou às facilidades algébricas.

No entanto, quando lidamos com a visualização da dinâmica próxima aos pontos fixos tais que $\text{Im}(w_i) \neq 0$, representados neste modelo pelos estados de vórtice, as variáveis canônicas de coordenada q_i e momento p_i mostraram-se mais adequadas à resolução numérica das equações de movimento, pois nesta parametrização o espaço de fase M é finito, em detrimento aos parâmetros w_i , e não apresenta algumas dificuldades de tratamento computacional encontradas para as variáveis periódicas ϕ_i .

Por estes motivos, escolhemos as coordenadas q_i e p_i para a análise da dinâmica semiclássica quadridimensional associada aos estados de vórtice, no que se refere à utilização de seções de Poincaré. Para este fim, precisamos calcular as equações de movimento provenientes da aplicação de (5.2.1.a) à Hamiltoniana (5.1.7'), exibidas aqui por completudeza:

$$\begin{aligned}
\dot{q}_1 &= \Omega' \left[p_2 - \frac{p_1(q_1+q_2)}{r} \right] + \kappa \frac{(N-1)}{N} p_1 (q_1^2 + p_1^2 - r^2) \\
&\quad - \Lambda \frac{(N-1)}{N} \left[2p_1 q_2 r - \frac{p_1}{r} (q_1(q_2^2 + p_2^2) + q_2(q_1^2 + p_1^2)) + p_2 r^2 - 2p_1(q_1 q_2 + p_1 p_2) \right];
\end{aligned} \tag{6.4.1.a}$$

$$\begin{aligned}
\dot{p}_1 &= -\Omega' \left[q_2 + r - \frac{q_1(q_1+q_2)}{r} \right] - \kappa \frac{(N-1)}{N} q_1 (q_1^2 + p_1^2 - r^2) \\
&\quad + \Lambda \frac{(N-1)}{N} \left[(q_2^2 + p_2^2 + 2q_1 q_2) r - \frac{q_1}{r} (q_1(q_2^2 + p_2^2) + q_2(q_1^2 + p_1^2)) + q_2 r^2 - 2q_1(q_1 q_2 + p_1 p_2) \right];
\end{aligned} \tag{6.4.1.b}$$

$$\begin{aligned}
\dot{q}_2 &= \Omega' \left[p_1 - \frac{p_2(q_1+q_2)}{r} \right] + \kappa \frac{(N-1)}{N} p_2 (q_2^2 + p_2^2 - r^2) \\
&\quad - \Lambda \frac{(N-1)}{N} \left[2p_2 q_1 r - \frac{p_2}{r} (q_1(q_2^2 + p_2^2) + q_2(q_1^2 + p_1^2)) + p_1 r^2 - 2p_2(q_1 q_2 + p_1 p_2) \right];
\end{aligned} \tag{6.4.1.c}$$

$$\begin{aligned}
\dot{p}_2 &= -\Omega' \left[q_1 + r - \frac{q_2(q_1+q_2)}{r} \right] - \kappa \frac{(N-1)}{N} q_2 (q_2^2 + p_2^2 - r^2) \\
&\quad + \Lambda \frac{(N-1)}{N} \left[(q_1^2 + p_1^2 + 2q_1 q_2) r - \frac{q_2}{r} (q_1(q_2^2 + p_2^2) + q_2(q_1^2 + p_1^2)) + q_1 r^2 - 2q_2(q_1 q_2 + p_1 p_2) \right].
\end{aligned} \tag{6.4.1.d}$$

Por simplicidade, introduzimos acima a seguinte notação:

$$r \equiv \sqrt{2N - q_1^2 - p_1^2 - q_2^2 - p_2^2}. \quad (6.4.2)$$

Note que estas equações de movimento não estão bem definidas quando $2N \leq q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2$. Portanto, o espaço de fase está limitado por uma superfície esférica quadridimensional de raio $\sqrt{2N}$. Como no caso das variáveis ϕ_i e J_i , não conseguimos tratar a dinâmica do sistema na fronteira $q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2 = 2J_1 + 2J_2 = 2N$, que representa a condição de ocupação média nula no terceiro modo local, segundo as transformações (5.1.8) e (5.1.9).

6.5 Dinâmica dos Estados de Vórtice

Até agora, todos regimes dinâmicos populacionais estudados estavam relacionados a pontos de equilíbrio no análogo clássico cuja parametrização nas variáveis w_1 e w_2 é real. Como vemos na transformação (5.2.6), as diferenças de fase entre os modos coletivos do condensado podem assumir apenas os valores zero ou π quando a parametrização complexa fica restrita aos reais.

A condição $w_1, w_2 \in \mathbb{R}$, ou $\phi_1, \phi_2 = 0, \pi$, implica em rotação média nula do condensado, segundo a relação (5.3.30). Apesar de não haver movimento coletivo de rotação nos pontos fixos reais, também não podemos dizer que o equilíbrio é estático nestes estados; ou seja, o tunelamento entre os poços não deixa de existir. Utilizando a representação padrão do operador de tunelamento total $P_S = P_1 + P_2 + P_3$, encontrada em (3.2.16), podemos calcular a média de P_s nos estados coerentes usando (4.2.12):

$$\langle N; \vec{w} | P_S | N; \vec{w} \rangle = \frac{2N}{|w_1|^2 + |w_2|^2 + 1} \text{Re}(w_1^* w_2 + w_1 + w_2). \quad (6.5.1)$$

Por exemplo, o estado fundamental no limite semiclássico, denotado por $|N; w_1 = w_2 = 1\rangle$, considerando apenas interações repulsivas ou atrativas antes da transição de mínimo global, tem tunelamento médio total dado por:

$$\langle N; w_1 = w_2 = 1 | P_S | N; w_1 = w_2 = 1 \rangle = 2N. \quad (6.5.2)$$

Logo, não é nulo o tunelamento médio em ambos sentidos que conectam cada par de poços, representados pelos seis operadores bilineares $a_i^\dagger a_j$ ($i \neq j$), embora as populações não se alterem.

Observamos que a dinâmica dos pontos fixos reais não é inerte, mas irrotacional. Os únicos pontos de equilíbrio com parte imaginária não nula, encontrados no modelo de poço triplo, são os estados de vórtice (EV), parametrizados por $w_1 = e^{\pm i \frac{2\pi}{3}} = w_2^*$. Estes estados representam a configuração do sistema na qual os três poços estão igualmente populados, pois $|w_1| = |w_2| = 1$, mas a diferença de fase entre os modos coletivos é localizada em $\phi_1 = \mp \frac{2\pi}{3}$ e $\phi_2 = \pm \frac{2\pi}{3}$, novamente segundo a transformação (5.2.6).

As diferenças de fase entre as funções de onda coletivas dos condensados localizados em diferentes poços conferem rotação média não nula aos EV, quantificada em (5.3.38). Observe que a única diferença entre os dois estados de vórtice é o sinal de $\langle J_S \rangle$, devido à simetria de rotação do potencial de aprisionamento. O tunelamento entre os poços também não deve estar ausente nos EV, possibilitando a existência de momento angular total:

$$\langle N; w_1 = w_2^* = e^{\pm i \frac{2\pi}{3}} | P_S | N; w_1 = w_2^* = e^{\pm i \frac{2\pi}{3}} \rangle = -N. \quad (6.5.3)$$

Portanto, o estado $|N; w_1 = w_2 = 1\rangle$ possui, em valor absoluto, exatamente o dobro do tunelamento médio por poço dos EV. Este fato sugere que o tunelamento entre cada par de poços nos estados de vórtice acontece em apenas um sentido, concedendo rotação ao condensado, enquanto no estado irrotacional o tunelamento ocorre na mesma proporção nos dois sentidos entre cada dois modos locais.

Como os EV são equivalentes, a menos do sentido da rotação do condensado, de agora em diante concentramos nossos estudos apenas em $w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}} = w_2^*$, sem perda de generalidade. Também conservamos as escolhas $N = 30$ e $|\Omega| = 1$ nos resultados desta seção, exceto se especificado o contrário.

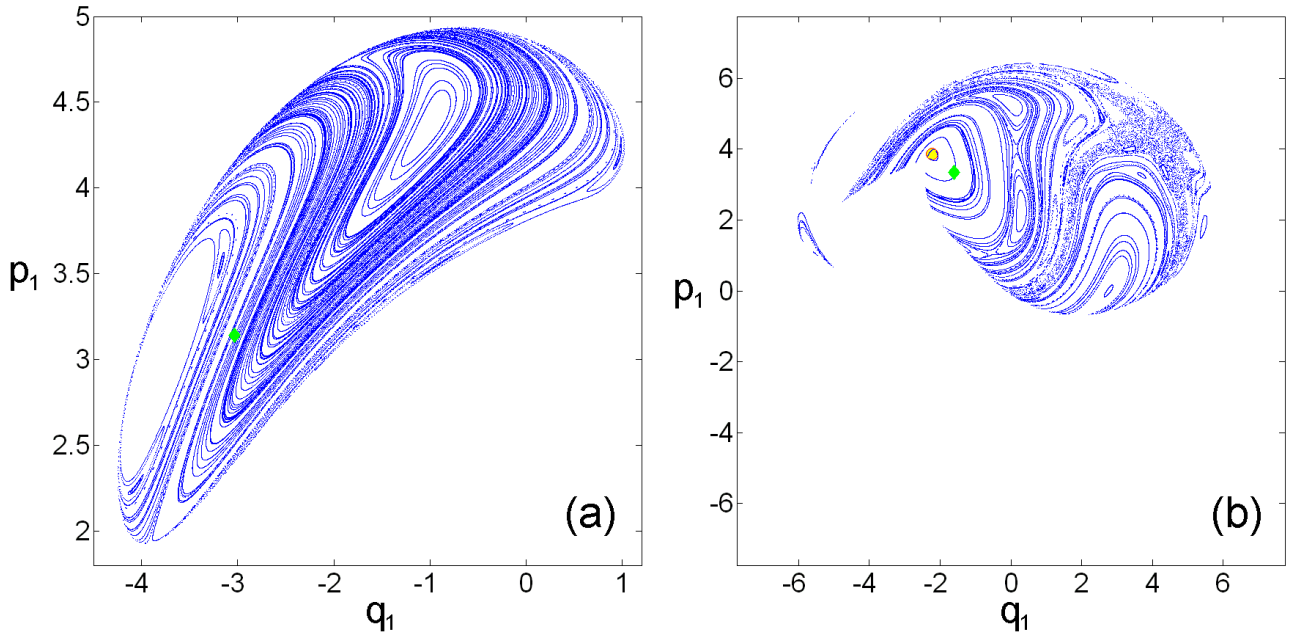


Figura 6.5.1: As seções de Poincaré em $p_2 = -\sqrt{\frac{N}{2}}$ exibem a dinâmica próxima ao ponto fixo de vórtice localizado em $w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}}$ e $w_2 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}$. Os parâmetros de colisão no gráfico à esquerda são $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, enquanto à direita são $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. A posição do ponto de equilíbrio estável é indicada à direita por um círculo amarelo. No regime representado à esquerda, o ponto fixo de vórtice representa um máximo de energia, portanto realizamos a seção em trajetórias de energia um pouco inferior à energia máxima, para visualizar a dinâmica nas proximidades do estado de vórtice. Novamente consideramos um sistema de $N = 30$ partículas e escolhemos a unidade de tempo tal que $|\Omega| = 1$.

O comportamento de estabilidade do EV é exibido na figura 5.4.2. Preservando as condições hipotéticas $|\chi| \gg |\mu|$ e $\chi\mu > 0$, vemos que apenas de três regiões neste simples diagrama são facilmente acessíveis. As figuras 6.5.1 e 6.5.2 mostram seções de Poincaré características para cada um destes três casos. Como já discutido, devido às facilidades de cálculo, preferimos realizar as seções referentes aos pontos fixos com $\text{Im}(w_i) \neq 0$ nas variáveis canônicas q_1, p_1, q_2 e p_2 .

Todas estas seções de Poincaré são feitas em $p_2 = -\sqrt{\frac{N}{2}}$, valor desta variável quando $w_1 = w_2^* = e^{i\frac{2\pi}{3}}$, segundo a transformação (4.1.38).

O gráfico 6.5.1.a mostra a dinâmica próxima ao ponto fixo estável de vórtice quando os parâmetros de colisão assumem os valores $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Os EV são sempre estáveis no regime de interações atrativas, pois representam o máximo clássico de energia do modelo. Também por este motivo realizamos a seção de Poincaré fixando um valor de energia pouco abaixo de $\mathcal{H}(w_1 = w_2^* = e^{i\frac{2\pi}{3}})$, visto que obviamente não conseguiríamos visualizar a dinâmica próxima ao EV para esta energia. Ainda pela mesma razão, não marcamos no gráfico a localização do ponto de equilíbrio, pois ele não se encontra

na seção.

Nas proximidades da energia máxima vemos apenas órbitas regulares, restritas a uma pequena região acessível do espaço de fase M , lembrando que a condição $2N = q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2$ determina a fronteira de M nas variáveis utilizadas^{6.6}.

Às trajetórias regulares próximas ao EV esperamos associar o regime dinâmico populacional de vórtice, no qual as ocupações médias dos três modos locais oscilam em torno de $\langle \hat{n}_i \rangle = \frac{N}{3}$, enquanto o momento angular total médio é sempre não nulo, diferentemente do regime irrotacional associado a $|N; w_1 = w_2 = 1\rangle$.

Considerando interações bosônicas repulsivas, podemos ainda encontrar regiões do espaço das taxas de colisão onde o ponto de equilíbrio de vórtice é estável. Como exemplo, mostramos a seção mista da figura 6.5.1.b, para $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Desta vez o EV não é o máximo global de $\mathcal{H}$, de maneira que fazemos a seção para trajetórias de sua energia. Note que a localização do ponto fixo estável é indicada pelo círculo amarelo.

Próximo ao EV vemos uma grande região tomada por órbitas quasi-periódicas, que esperamos associar ao regime dinâmico de vórtice. Diferentemente do caso para colisões atrativas, encontramos também órbitas caóticas em M com a mesma energia do ponto de equilíbrio.

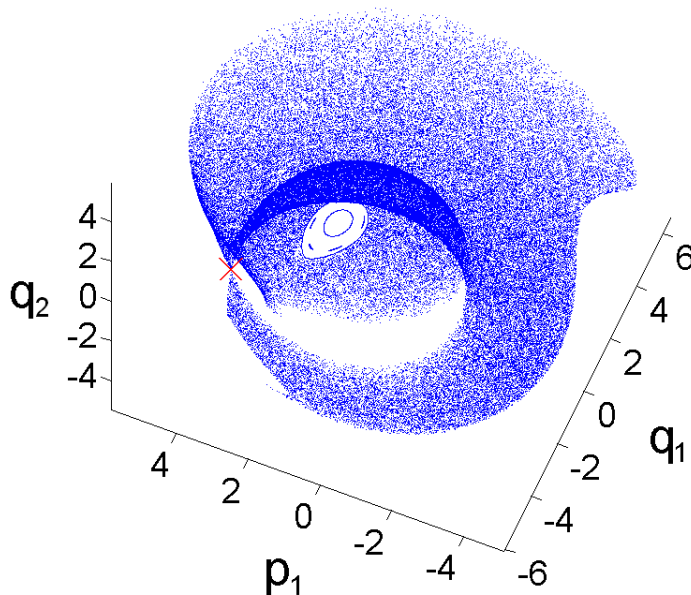


Figura 6.5.2: Dinâmica próxima ao estado de vórtice $w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}}$ e $w_2 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}$ representada por uma seção de Poincaré em $p_2 = -\sqrt{\frac{N}{2}}$. Os parâmetros do sistema são $N = 30$, $|\Omega| = 1$, $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. O ponto fixo instável presente na seção é indicado por uma cruz vermelha.

O EV é instável na última região do espaço de parâmetros de colisão considerada, que exemplificamos na seção de Poincaré do gráfico 6.5.2, na qual $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Para melhor visualização da localização do ponto fixo, apresentamos esta última seção em três dimensões, diferentemente da figura 6.5.1, pois nesta exibimos as projeções sobre o plano $q_1 \times p_1$. Observamos um regime fortemente caótico para as trajetórias de mesma energia do ponto de equilíbrio de vórtice, simbolizado pela cruz vermelha no gráfico. Note também que as órbitas isoenergéticas próximas ao EV percorrem uma grande extensão

^{6.6}Para $N = 30$ temos o “raio” do espaço de fase dado por $\sqrt{2N} \cong 7,74597$.

no espaço de fase, quando comparadas às trajetórias regulares apresentadas anteriormente.

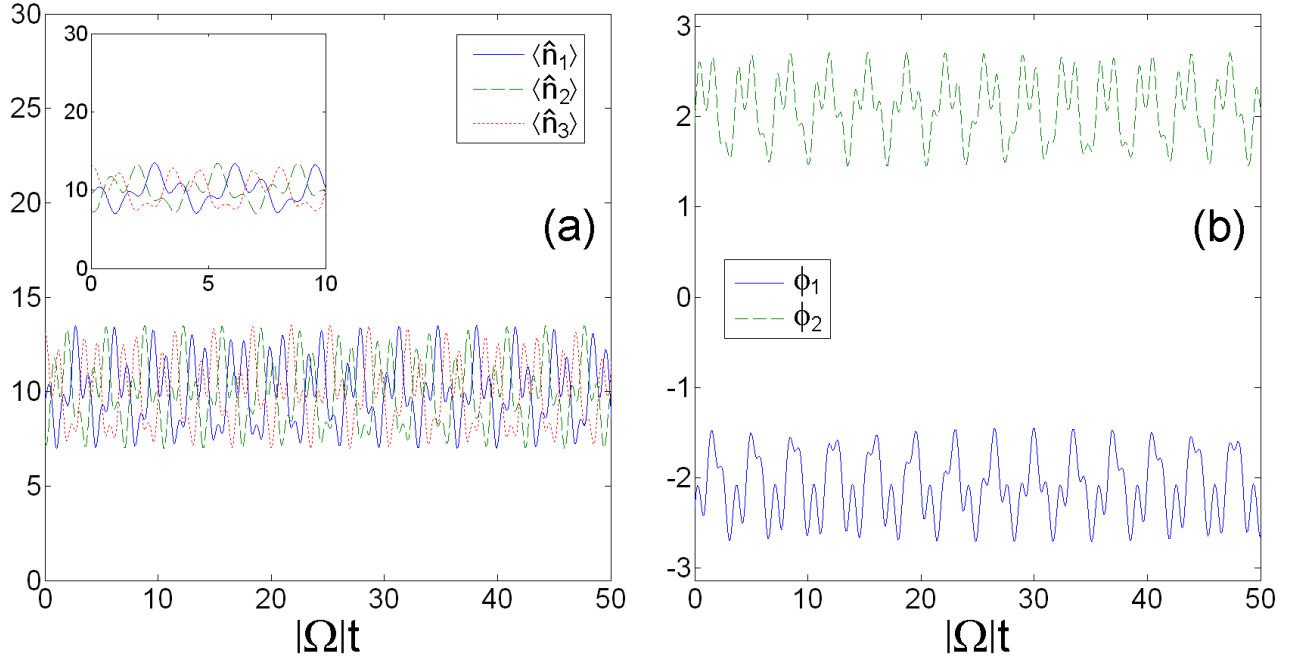


Figura 6.5.3: À esquerda exibimos a dinâmica populacional semiclássica de uma órbita próxima ao estado de vórtice para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, enquanto à direita mostramos o comportamento das diferenças de fases entre os condensados na mesma trajetória, presente também na seção da figura 6.5.1.a.

No gráfico 6.5.3 mostramos a dinâmica populacional e de fase para a condição inicial indicada pelo losango verde na figura 6.5.1.a, quando escolhemos $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. A trajetória quasi-periódica exibe corretamente o regime de vórtice, pois as ocupações médias oscilam em torno de $\frac{N}{3}$, enquanto a diferença de fase ϕ_1 (ϕ_2) se limita a flutuações próximas a $-\frac{2\pi}{3}$ ($\frac{2\pi}{3}$). Portanto, as órbitas de energia mais elevada estão associadas à rotação do condensado, no caso de interações bosônicas atrativas.

Os valores clássicos de $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$ e $\phi_j(t)$ ($i = 1, 2, 3$ e $j = 1, 2$) são mostrados na figura 6.5.4 para a condição inicial indicada pelo losango verde da figura 6.5.1.b, na qual consideramos os parâmetros de colisão $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Novamente as órbitas quasi-periódicas próximas ao EV mostram corretamente o regime populacional de vórtice, como esperado.

É importante salientar que também para interações repulsivas encontramos uma extensão de M tomada por trajetórias regulares no regime de vórtice, embora o EV não represente mais um máximo global de energia. Portanto, as rotações coletivas persistentes também são possíveis para o espalhamento repulsivo, mas em uma região relativamente reduzida do diagrama de estabilidade, considerando as condições de acessibilidade hipotéticas sobre os parâmetros.

Por fim, consideramos a dinâmica populacional e de fase de uma órbita caótica, cuja condição inicial foi escolhida próxima ao ponto fixo exibido na figura 6.5.2, onde fixamos $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. No gráfico 6.5.5.a, vemos que as ocupações médias oscilam aperiódicamente com grande amplitude, mas é evidente que, se fizermos as médias de $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$ sobre um longo intervalo de tempo, obteríamos $\overline{\langle \hat{n}_i \rangle(t)} \cong \frac{N}{3}$ para os três modos, o mesmo que seria esperado de um comportamento praticamente aleatório. Portanto, o que realmente descaracteriza esta órbita como pertencente ao regime de vórtice são as curvas para $\phi_1(t)$ e $\phi_2(t)$, expostas no gráfico 6.5.5.b. Note que as fases também oscilam sem nenhum padrão aparente, percorrendo todos os valores possíveis no intervalo $[-\pi, \pi]$, não somente a

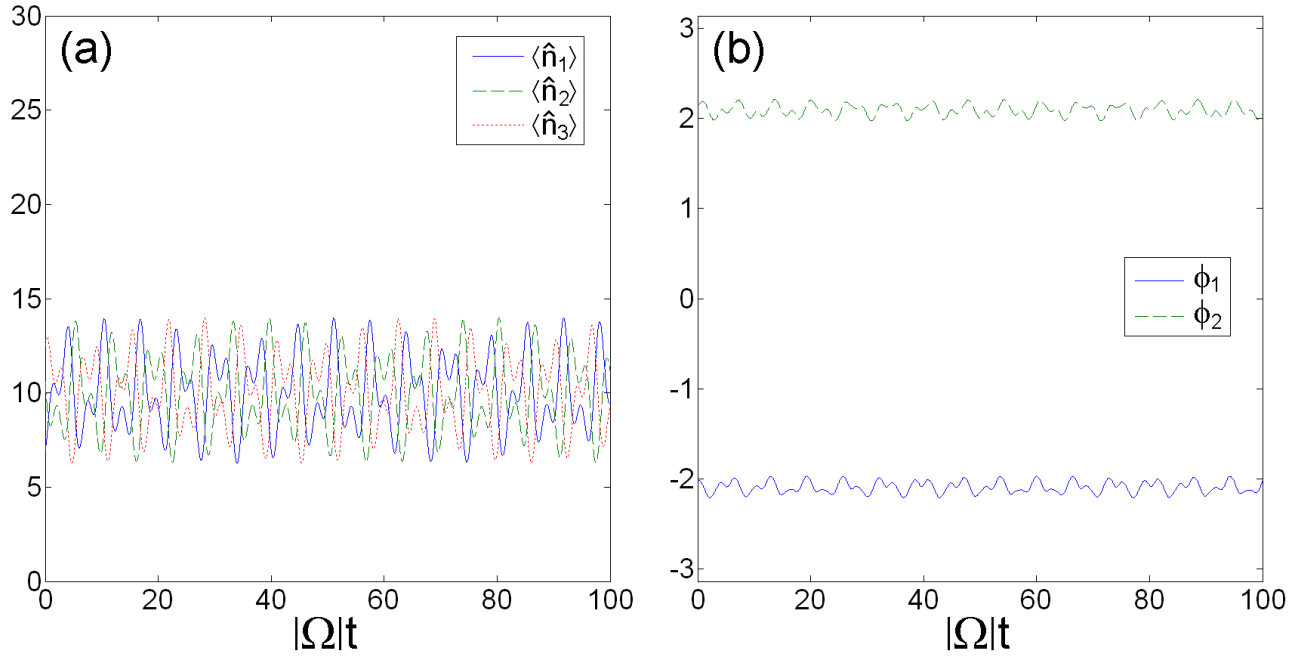


Figura 6.5.4: O gráfico à esquerda (direita) mostra a dinâmica semiclássica populacional (de fase) para uma órbita próxima ao estado de vórtice presente na figura 6.5.1.b, para parâmetros $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$.

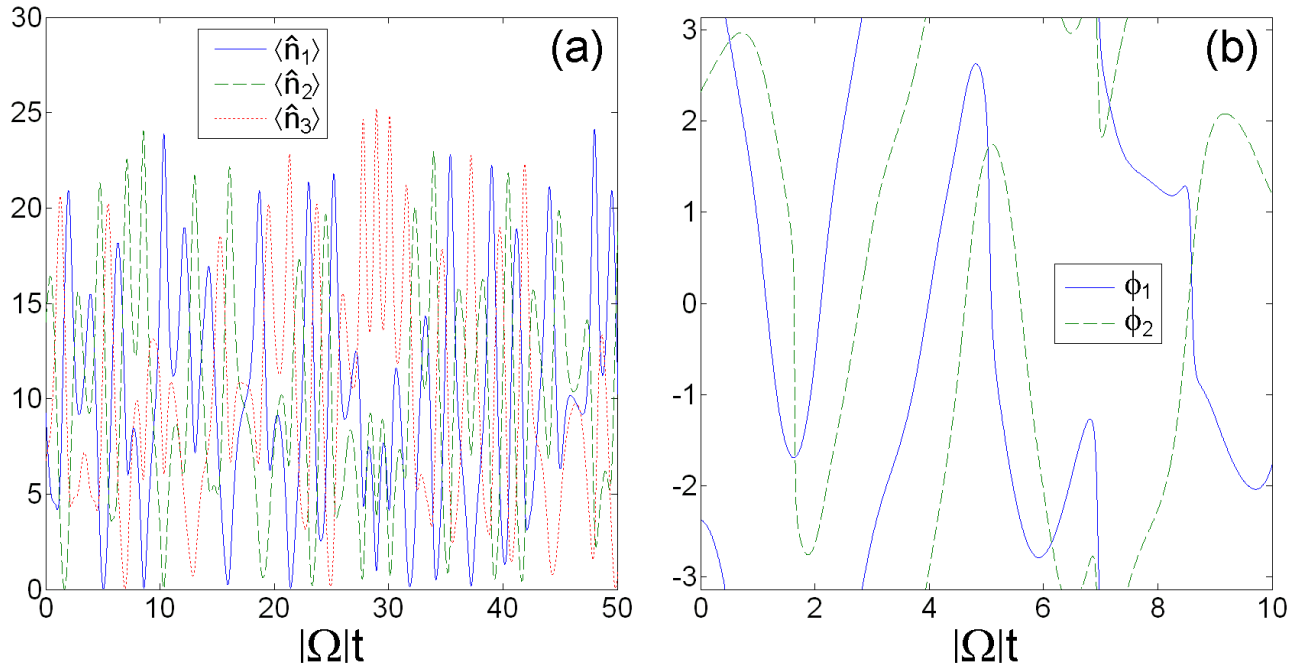


Figura 6.5.5: No gráfico (a) exibimos a dinâmica populacional clássica para uma condição inicial próxima ao ponto fixo de vórtice presente também na figura 6.5.2, na qual as taxas de colisão são dadas por $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Em (b) vemos a dinâmica das diferenças de fase na mesma trajetória.

região próxima a $\pm \frac{2\pi}{3}$.

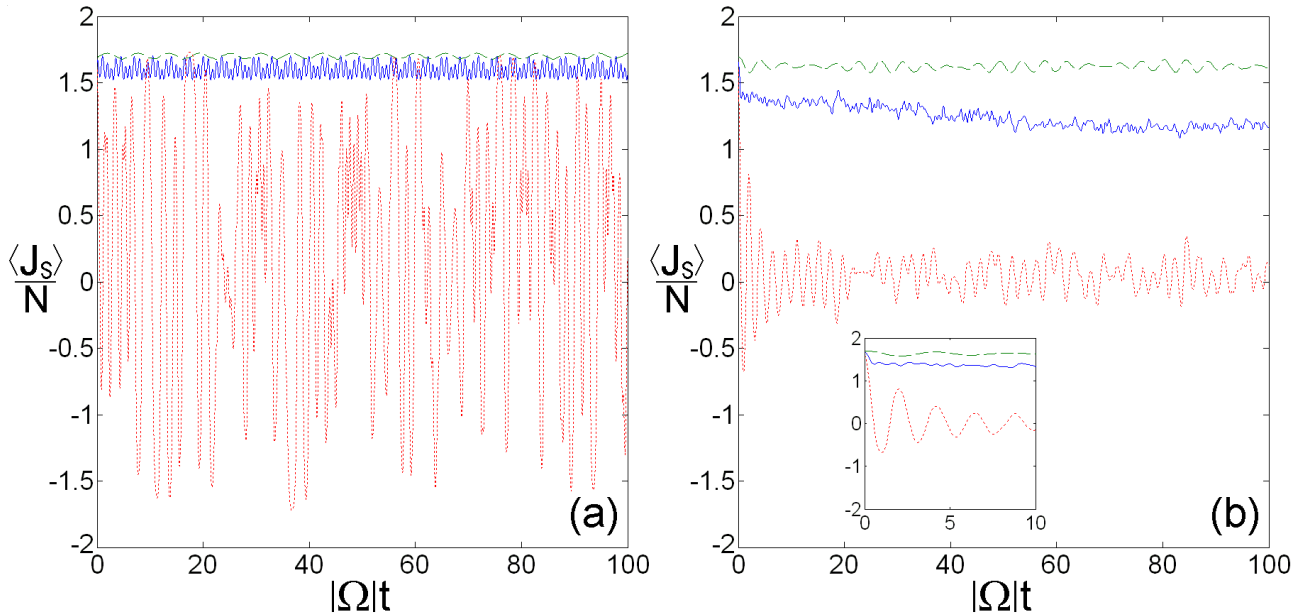


Figura 6.5.6: À esquerda (direita) temos a média clássica (quântica) do operador de rotação do condensado J_S para as três condições iniciais e conjuntos de parâmetros utilizados nas figuras 6.5.3-6.5.5. As curvas azuis sólidas representam o momento angular do condensado para condição inicial próxima ao ponto fixo de vórtice cuja dinâmica populacional é exibida na figura 6.5.3.a, para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. As curvas verdes tracejadas (vermelhas pontilhadas) refletem a mesma quantidade evoluída no tempo para a condição inicial utilizada no gráfico 6.5.4.a (6.5.5.a), com parâmetros de colisão dados por $\chi = -1$ ($\chi = -5$) e $\mu = \frac{\chi}{100}$.

As médias semiclássicas do operador de momento angular total em torno do eixo de simetria do potencial são mostradas no gráfico 6.5.6.a, para as três condições iniciais utilizadas nas figuras 6.5.3-6.5.5. As curvas azul sólida e verde tracejada representam as órbitas regulares estudadas, nas quais observamos que $\frac{\langle J_S \rangle}{N}(t)$ oscila próximo ao valor $\sqrt{3}$, que é o momento angular previsto para o estado de vórtice.

No entanto, a trajetória caótica apresenta uma dinâmica irregular do momento angular, tal que $\frac{\langle J_S \rangle}{N}(t)$ oscila em torno de zero, indicando nenhum comportamento coletivo persistente de rotação.

A figura 6.5.6.b exibe os resultados quânticos exatos da média do operador de momento angular total em função do tempo. Novamente, escolhemos os estados em $|\Omega|t = 0$ como os estados coerentes centrados nas condições iniciais das três trajetórias clássicas utilizadas no gráfico 6.5.6.a. Desta maneira podemos comparar corretamente as abordagens semiclássica e quântica, além de permitir o estudo da decoerência utilizando a pureza generalizada.

A curva azul sólida no gráfico 6.5.6.b representa $\frac{\langle J_S \rangle}{N}(t)$ para o estado coerente inicial centrado próximo ao EV, quando este é o máximo de energia, com parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Diferentemente da aproximação semiclássica, vemos que o momento angular do condensado sofre uma pequena redução abrupta no começo de sua evolução, seguida de oscilações sem caráter periódico. Após o célere intervalo inicial de diminuição em $\langle J_S \rangle$, notamos uma tendência de lenta perda de momento angular, mas este fenômeno é um comportamento de período bastante longo e não uma perda irreversível. A curva verde tracejada apresenta o resultado quântico associado à órbita regular de condição inicial mostrada no gráfico 6.5.1.b, cujos parâmetros utilizados são $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Comparada ao análogo clássico, notamos que as duas abordagens produzem resultados bastante semelhantes neste

caso, exceto pela modulação da amplitude presente à direita. Finalmente, a curva vermelha pontilhada exibe a média quântica do momento angular total relacionada à órbita caótica de mesma energia do EV instável, quando utilizamos $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Como esperado, o cálculo quântico exibe oscilações aperiódicas em torno de $\langle J_S \rangle = 0$, confirmando a correspondência entre caos quântico e análogo clássico. Contudo, notamos que a amplitude das oscilações é rapidamente amortecida no caso quântico.

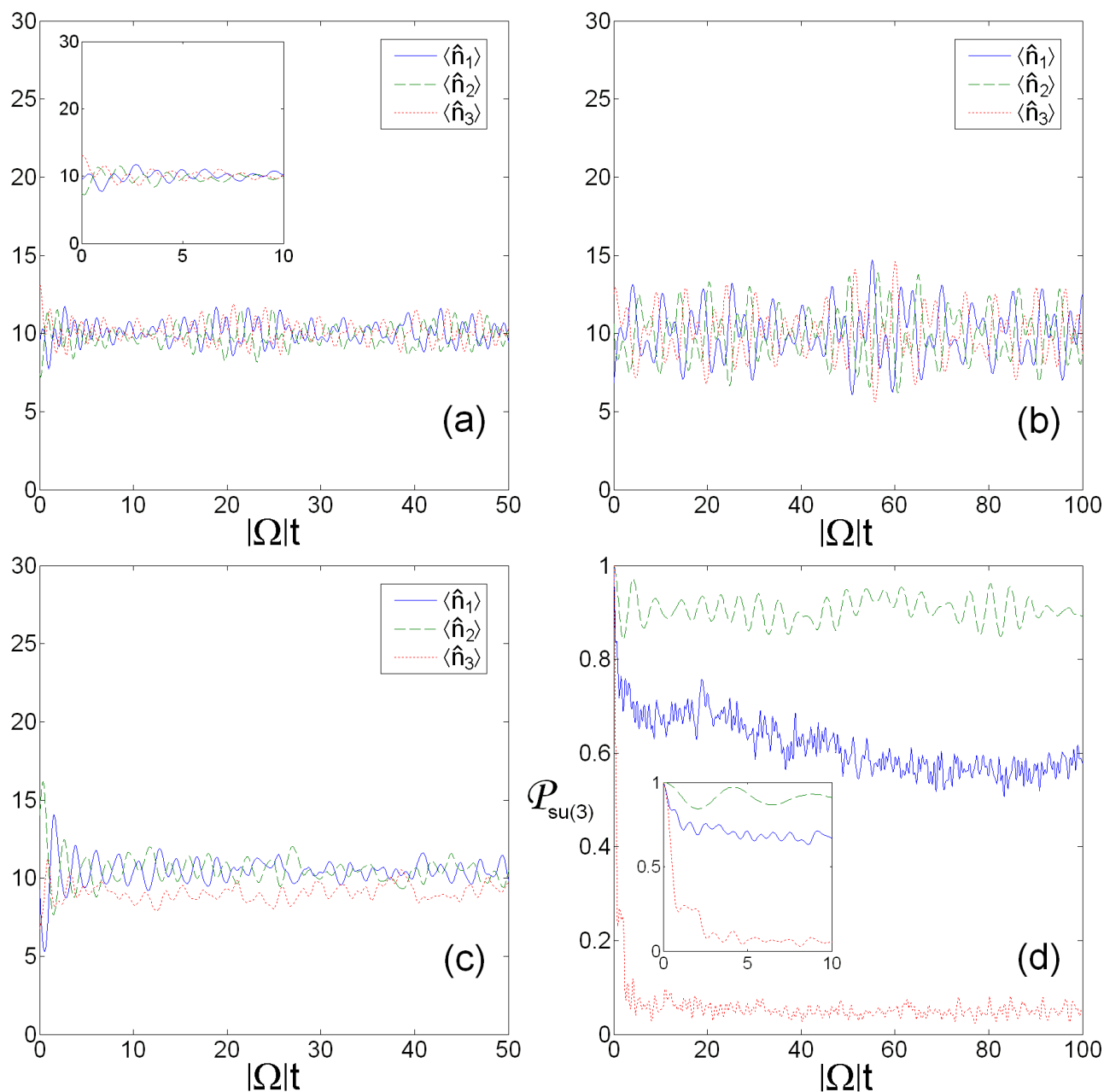


Figura 6.5.7: Nos gráficos (a)-(c) mostramos a dinâmica populacional quântica para as mesmas condições iniciais e conjuntos de parâmetros utilizados nas figuras 6.5.3-6.5.5, respectivamente. Em (d) exibimos a evolução de $\mathcal{P}_{su(3)}$ para as três condições iniciais estudadas em (a)-(c), representadas pelas curvas azul sólida ($\chi = 5$, $\mu = \frac{\chi}{100}$), verde tracejada ($\chi = -1$, $\mu = \frac{\chi}{100}$) e vermelha pontilhada ($\chi = -5$, $\mu = \frac{\chi}{100}$), nesta ordem.

Também comparamos a abordagem semiclássica da dinâmica das médias ocupacionais em cada modo local com os resultados quânticos exatos. Nas figuras 6.5.7.a-6.5.7.c exibimos a evolução de $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$ ($i = 1, 2, 3$) para estados coerentes iniciais parametrizados pelas condições iniciais clássicas utilizadas nos gráficos 6.5.3-6.5.5.

A dinâmica populacional quântica associada à trajetória regular do caso de colisões atrativas, quando escolhemos $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, é mostrada no gráfico 6.5.7.a. Primeiramente, observamos que o comportamento das ocupações concorda qualitativamente com o regime dinâmico populacional dos estados de vórtice, pois as três ocupações médias oscilam em torno de $\frac{N}{3}$. Comparando com a aproximação semiclássica da figura 6.5.3, notamos que as duas soluções são bastante semelhantes na forma e frequência das oscilações. Entretanto, as amplitudes encontradas no cálculo quântico possuem valores significativamente inferiores e apresentam um fenômeno extra de modulação.

Os resultados quânticos de ocupação relacionados à órbita próxima ao EV estudada na presença de interações repulsivas, para $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, é exibida na figura 6.5.7.b. Novamente observamos o acordo qualitativo entre as resoluções quânticas e clássicas, pois as duas abordagens refletem a dinâmica populacional esperada no regime próximo aos estados de vórtice. Diferentemente da trajetória estudada no caso atrativo, desta vez notamos que a ordem das amplitudes não foi reduzida em comparação à resolução semiclássica, mas o fenômeno de modulação das oscilações persiste.

Por fim, o gráfico 6.5.7.c apresenta os valores calculados exatamente de $\langle \hat{n}_i \rangle(t)$ com o propósito de comparação com os resultados da figura 6.5.5, onde utilizamos os parâmetros de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Como esperado para uma dinâmica caótica, as médias não exibem nenhum padrão periódico, mas a amplitude das oscilações manifesta novamente um intenso amortecimento, produzindo um desacordo quantitativo em relação à solução semiclássica.

As curvas de $\mathcal{P}_{su(3)}(t)$ são expostas na figura 6.5.7.d para os estados coerentes centrados nas condições iniciais das três órbitas semiclássicas analisadas previamente. A curva azul sólida acompanha a pureza relacionada à órbita regular semiclássica no espalhamento atrativo. Observamos um rápido período de decoerência inicial, coincidente com a perda inicial de momento angular encontrada no gráfico 6.5.6.b. Também de forma semelhante ao comportamento de $\langle J_S \rangle(t)$, após a redução inicial notamos uma tendência de lento decaimento da pureza, que na realidade faz parte de uma oscilação de período bastante longo presente na coerência do estado.

A pureza generalizada relacionada à órbita regular, mas considerando colisões repulsivas, é mostrada pela curva verde tracejada. O primeiro período de decoerência encontrado neste caso é mais duradouro e menos intenso que para a trajetória regular atrativa. As oscilações de $\mathcal{P}_{su(3)}(t)$ estabilizam-se em torno de um valor relativamente alto, justificando o bom acordo entre os cálculos clássicos e quânticos. Finalmente, a curva vermelha pontilhada mostra o processo de perda de coerência associado ao regime caótico encontrado próximo ao EV instável. É evidente que o primeiro período de decoerência neste caso é bastante mais intenso quando comparado às órbitas regulares. A pureza do sistema estabiliza-se em valores inferiores a 0,1, indicando uma grande delocalização do estado no espaço de fase.

Portanto, maior acordo entre as aproximações semiclássicas e os resultados quânticos exatos foi encontrado nos estados que mais preservaram sua pureza em relação à $su(3)$. O regime associado à órbita regular para bósons repulsivos apresentou a melhor correspondência quantitativa clássico-quântica entre as três condições iniciais analisadas, não surpreendentemente também exibe os maiores valores de $\mathcal{P}_{su(3)}(t)$. Já o regime caótico, apesar de qualitativamente bem caracterizado nos dois métodos utilizados, apresenta menor concordância quantitativa, comportamento acompanhado pela pureza de seu estado.

As órbitas caóticas percorrem uma região bem mais extensa do espaço de fase, quando comparadas às trajetórias regulares próximas ao EV, como podemos ver nas figuras 6.5.1 e 6.5.2. Logo, novamente

esperamos que grande parte da quebra de correspondência clássico-quântica seja devida à delocalização da distribuição do estado sobre M . Podemos confirmar esta expectativa utilizando, de maneira conjunta, as duas distribuições projetivas de estados quânticos sobre subespaços bidimensionais de M , desenvolvidas na seção 6.3. A função Q_J , ou Husimi populacional, é uma representação de um estado sobre o espaço das ocupações médias J_1 e J_2 , estabelecendo uma excelente forma de visualizar a partilha de bósons entre os três modos locais. No entanto, o espaço de populações apresenta apenas uma parcela da informação contida em um estado de $\mathbb{B}_N$. Para determinar o estado unicamente, precisamos também de sua representação no subespaço configuracional de M , parametrizado pelas diferenças de fase ϕ_1 e ϕ_2 . A função semiclássica de fase $\Phi(\phi_1, \phi_2)$ fornece uma boa visualização do estado no espaço das variáveis angulares.

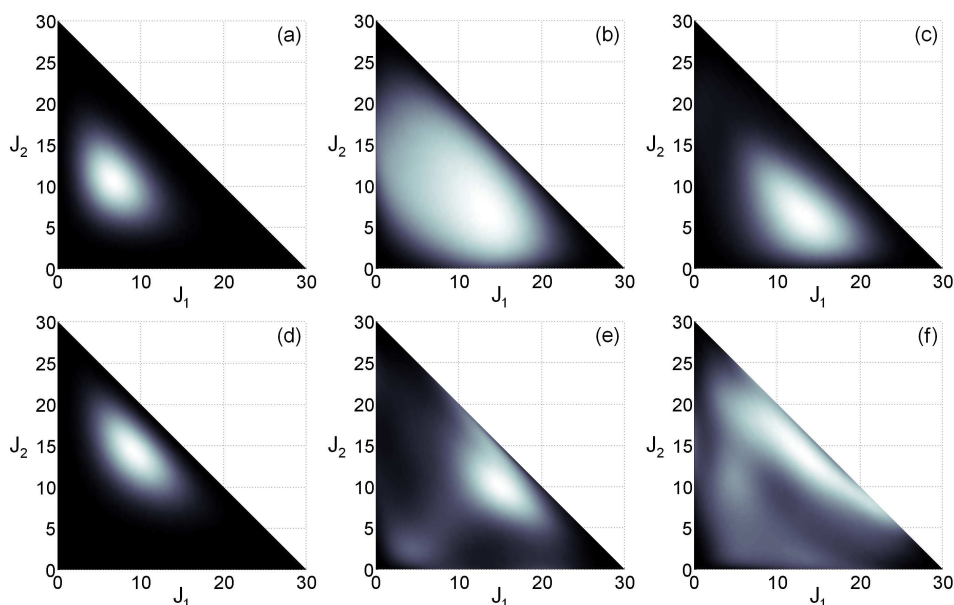


Figura 6.5.8: Distribuição $Q_J(J_1, J_2)$ mostrando alguns instantes de interesse na evolução dos mesmos estados iniciais utilizados nas figuras 6.5.7.b e 6.5.7.c. Em (a) temos o estado coerente inicial ($|\Omega|t = 0$) para parâmetros de colisão $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Os gráficos (b) e (c) mostram respectivamente os instantes $|\Omega|t = 2$ e $|\Omega|t = 10$ da evolução deste estado. O estado coerente inicial utilizado nas simulações com $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ é exibido no gráfico (d), enquanto os instantes $|\Omega|t = 2$ e $|\Omega|t = 10$ da evolução do sistema são mostrados nos gráficos (e) e (f), respectivamente.

A figura 6.5.8 exibe a função Q_J para alguns instantes de tempo relevantes durante a evolução dos dois estados estudados quando consideramos espalhamento repulsivo. As figuras 6.5.8.a e 6.5.8.d mostram os estados coerentes centrados nas condições iniciais associadas às trajetórias regular e caótica, respectivamente. Note que as distribuições estão concentradas na parte central do subespaço, indicando aproximadamente que as partículas estão divididas de maneira igual entre os poços, em média. Lembramos que estes representam estados maximamente localizados no espaço de fase, mas não necessariamente em um subespaço de M .

Estados comprimidos são aqueles que possuem melhor localização em um determinado subespaço de M , quando comparados aos estados coerentes, às custas de uma maior incerteza no subespaço conjugado. Geralmente podemos produzir um estado comprimido pela aplicação sobre um estado coerente de uma transformação exponencial de operadores quadráticos nos geradores do grupo dinâmico. Como o Hamiltoniano $\hat{H}$ de nosso modelo é não linear nos geradores de $SU(3)$, como vimos em (3.2.20), esperamos que um dos efeitos presentes na evolução de um estado coerente pelo operador

unitário $e^{-i\hat{H}t}$ seja a compressão do estado. Como os estados coerentes são os únicos que maximizam a pureza generalizada, ou minimizam a incerteza total da álgebra $su(3)$, esperamos que a compressão seja um dos processos possíveis de decoerência.

Os estados associados às órbitas regular e caótica são novamente representados por Q_J em $|\Omega|t = 2$, instante próximo ao final do primeiro período de decoerência na pureza, como vemos nas figuras 6.5.8.b e 6.5.8.e, nesta ordem. O estado relacionado à trajetória regular se expande no espaço populacional, mas de maneira praticamente isotrópica e homogênea. No entanto, a delocalização do estado no regime caótico é bem mais complexa, apresentando mais de um máximo local na distribuição, que se alonga formando estruturas mais delicadas. Este comportamento confere caráter irreversível à delocalização do estado no regime caótico, diferentemente do caso regular.

Por fim, nos gráficos 6.5.8.c e 6.5.8.f mostramos mais uma vez Q_J , mas em $|\Omega|t = 10$, para os regimes regular e caótico, respectivamente. Neste instante a pureza já oscila em torno de patamares bem estabelecidos e as representações em M não exibem mais o comportamento transitório do primeiro período de decoerência. Observamos que o estado em dinâmica regular comprime-se novamente, mas centrado em um ponto distinto do inicial, sugerindo que as oscilações em $\mathcal{P}_{su(3)}$ são produzidas por um fenômeno de “pulsção” (*breathing*) da distribuição do estado sobre M . A função Q_J do estado em regime caótico encontra-se complicadamente “espalhada” em quase todo espaço populacional, justificando a baixíssima pureza do sistema.

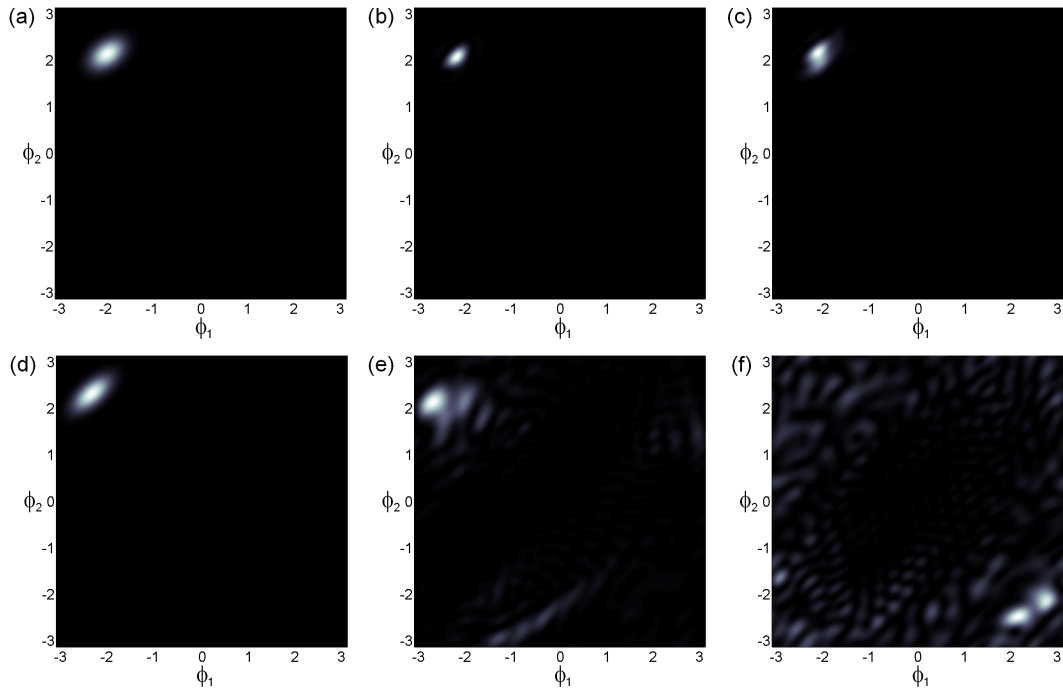


Figura 6.5.9: Função semiclássica de fase Φ nos mesmos estados e instantes de interesse representados no espaço de populações da figura 6.5.8. Em (a) temos o estado coerente inicial ($|\Omega|t = 0$) para parâmetros de colisão $\chi = -1$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Os gráficos (b) e (c) mostram respectivamente os instantes $|\Omega|t = 2$ e $|\Omega|t = 10$ da evolução deste estado. O estado coerente inicial utilizado nas simulações com $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ é exibido no gráfico (d), enquanto os instantes $|\Omega|t = 2$ e $|\Omega|t = 10$ da evolução do sistema são mostrados nos gráficos (e) e (f), respectivamente.

Também representamos a dinâmica quântica próxima aos estados de vórtice no espaço configuracional, nos mesmos instantes mostrados para Q_J . A função $\Phi(\phi_1, \phi_2)$ é exibida nas figuras 6.5.9.a e

6.5.9.d para os estados coerentes centrados nas condições iniciais das órbitas regular e caótica, respectivamente, no caso de interações repulsivas. Como previsto para um estado próximo ao EV, a distribuição no espaço angular concentra-se próxima a $\phi_1 = -\frac{2\pi}{3}$ e $\phi_2 = \frac{2\pi}{3}$. Estas duas representações, consideradas em conjunto com suas distribuições no espaço conjugado presentes nos gráficos 6.5.8.a e 6.5.8.d, são exemplos da representação de estados maximamente localizados em M , ou de menor incerteza no espaço de fase.

Ao final do primeiro período de decoerência, mostramos novamente Φ para os estados nos regimes regular e caótico, nas figuras 6.5.9.b e 6.5.9.e, nesta ordem. Observe que a representação no espaço configuracional do estado em dinâmica regular comprime-se, em oposição a sua distribuição associada Q_J no espaço conjugado. Portanto, o estado diminui sua incerteza no espaço angular, mas em troca delocaliza-se no espaço populacional, de maneira que sua pureza é inferior ao estado coerente inicial. A função semiclássica de fase relacionada ao regime caótico não sofre o mesmo processo de compressão, mas dispersa-se complicadamente no espaço configuracional, acompanhando o comportamento da função Q_J associada.

Por fim, exibimos novamente a representação Φ dos estados em regime regular e caótico nos gráficos 6.5.9.c e 6.5.9.f respectivamente, mas desta vez para $|\Omega|t = 10$. Neste instante notamos a expansão da distribuição angular para a dinâmica regular, em oposição ao observado para Q_J . Portanto, o efeito de “pulsção” das representações propagadas regularmente ocorre de maneira inversa nos espaços conjugados. Este fenômeno é necessário para que a incerteza total do estado não adquira valores inferiores ao mínimo representado pelo estado coerente. A evolução caótica é bastante diferente, pois Φ espalha-se de modo complexo por grande parte do espaço configuracional. Note que a região de maior concentração da distribuição é próxima a $\phi_1 = \frac{2\pi}{3}$ e $\phi_2 = -\frac{2\pi}{3}$, coordenadas do estado de vórtice com rotação de sentido oposto ao estado coerente inicial. Logo, a dinâmica caótica promove a superposição de estados girantes em sentidos contrários, provocando a redução do momento angular médio inicial.

Já é evidente que os regimes dinâmicos semiclássicos regulares e caóticos correspondem a diferentes comportamentos quânticos, ratificando as expectativas da seção 8.3, onde definimos conceitos consistentes de integrabilidade e caos quântico, fundamentados no método análogo clássico.

O comportamento “pulsante” das distribuições quânticas na dinâmica regular é responsável pelas oscilações em $\mathcal{P}_{su(3)}(t)$. Neste regime, observamos que Q_J e Φ evoluem conservando suas formas simples, facilitando a quase total reversibilidade das compressões e expansões. O oposto acontece na dinâmica caótica, na qual a complexidade atingida pelas distribuições, após pouco tempo de evolução, sugere a incapacidade de forte recoerência no sistema.

6.6 Transição de Fase Quântica

Dado um Hamiltoniano $\hat{H}(\chi)$ dependente de um parâmetro real χ ^{6.7}, dizemos que o sistema apresenta uma **transição de fase quântica** quando a energia $E_0(\chi)$ de seu **estado fundamental** $|\psi_0(\chi)\rangle$ exibe uma **não analiticidade** em χ à **temperatura zero**. No entanto, E_0 é geralmente analítica em sistemas finitos, de modo que a transição somente é caracterizada no **limite macroscópico** $N \rightarrow \infty$.

Observamos anteriormente que o limite $N \rightarrow \infty$ é equivalente ao limite clássico [Yaf82], no contexto das aproximações semiclássicas de sistemas de muitas partículas com estados coerentes. Portanto, como o método análogo clássico coincide com os resultados quânticos no limite clássico-macroscópico,

^{6.7}A explanação inicial apresentada sobre transições de fase quânticas é absolutamente geral, mas note que por simplicidade aproveitamos a mesma simbologia adotada no modelo de três modos. Esta escolha não deve causar confusão, pois nesta seção tratamos apenas da transição presente neste modelo.

podemos analisar a transição de fase quântica utilizando o mínimo de energia da Hamiltoniana (5.1.7). Primeiramente reescrevemos $\mathcal{H}$ do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}}{N} &= \Omega \left[(1 + 2\mu) \frac{w_1^* w_2 + w_2^* w_1 + w_1 + w_1^* + w_2 + w_2^*}{1 + |w_1|^2 + |w_2|^2} + \chi \frac{|w_1|^4 + |w_2|^2 + 1}{(1 + |w_1|^2 + |w_2|^2)^2} \right. \\ &\quad \left. - 2\mu \frac{|w_1|^2(w_2^* + w_2) + |w_2|^2(w_1^* + w_1) + w_1^* w_2 + w_2^* w_1}{(1 + |w_1|^2 + |w_2|^2)^2} \right] \\ &\equiv h(\vec{w}^*, \vec{w}). \end{aligned} \quad (6.6.1)$$

Logo, se escrevemos a energia clássica em termos dos parâmetros renormalizados χ e μ , então a **energia por partícula** h é **independente de N** . Portanto, o limite macroscópico da energia por partícula é dado exatamente por (6.6.1), de maneira que o mínimo de h fornece o resultado exato para $\frac{E_0}{N}$ no limite $N \rightarrow \infty$.

Contudo, os mínimos locais de h são os mesmos de $\mathcal{H}$, calculados na seção 5.3, pois representam pontos de equilíbrio estável do modelo semiclássico. Desta forma, vemos que já calculamos exatamente o limite clássico da energia do estado fundamental por partícula, mostrada no gráfico 5.3.6 para $\mu = 0$ e multiplicada por $N = 30$, e possuímos todos elementos necessários para discutir a transição de fase quântica no modelo.

Observe na figura 5.3.6 que a energia do ponto fixo estável 1^+ cruza-se com a energia dos três pontos de equilíbrio equivalentes 4^+ . Logo, desconsiderando as colisões cruzadas, temos uma troca de mínimo global no **valor crítico** $\chi_c = 2$.

A curva de energia mínima de $\mathcal{H}$, formada em partes pelas curvas de $1^\pm$ e 4^+ , representa também o comportamento do mínimo de h , mas obviamente multiplicado por $N = 30$. Imediatamente obtemos que a energia por partícula do estado fundamental é contínua no limite macroscópico, mas sua primeira derivada é descontínua, pois é clara a diferença de inclinação em χ_c das curvas para 1^+ e 4^+ .

Podemos confirmar estes resultados acerca da transição de fase do modelo, analisando a escalabilidade de propriedades quânticas do sistema para N crescente. Vários trabalhos recentes demonstram que medidas de emaranhamento bipartite e multipartite podem ser usadas como propriedades “sinalizadoras” de transições quânticas [Hin05, WSL04]. De maneira bastante geral, as medidas de emaranhamento são dotadas da informação sobre as correlações presentes no sistema, que se modificam durante a transição.

Como atestamos nas seções passadas, a pureza generalizada da álgebra $su(3)$ é uma boa medida do comportamento de um estado sobre o espaço de fase M . Logo, podemos utilizar $\mathcal{P}_{su(3)}(|\psi_0\rangle)$ para obter toda informação sobre a coerência, o grau de localização e as correlações quânticas sobre M do estado fundamental. Esperamos que estas propriedades sofram mudanças significativas durante a transição de fase, de modo que a pureza possa também “sinalizar” sua ocorrência.

A figura 6.6.1 ilustra o comportamento da distribuição Q_J de $|\psi_0(\chi; \mu)\rangle$ em função das taxas de colisão para $N = 30$ partículas. O gráfico 6.6.1.a mostra a representação populacional do estado coerente $|N; w_1 = w_2 = 1\rangle \equiv |1^\pm\rangle$, pois ele representa o estado fundamental na ausência de interações bosônicas. Não é difícil verificar que $|1^\pm\rangle$ é o auto-estado de menor autovalor do Hamiltoniano linear $H_L^{su(3)}$, encontrado em (4.3.2):

$$H_L^{su(3)}|N; w_1 = w_2 = 1\rangle = \Omega(P_1 + P_2 + P_3)|N; w_1 = w_2 = 1\rangle = 2N\Omega|N; w_1 = w_2 = 1\rangle. \quad (6.6.2)$$

Lembrando que escolhemos o sistema de unidades tal que $\Omega = -1$, cujo valor negativo é devido às condições de validade do modelo. Na carência de colisões entre as partículas, $|\psi_0\rangle$ representa um estado

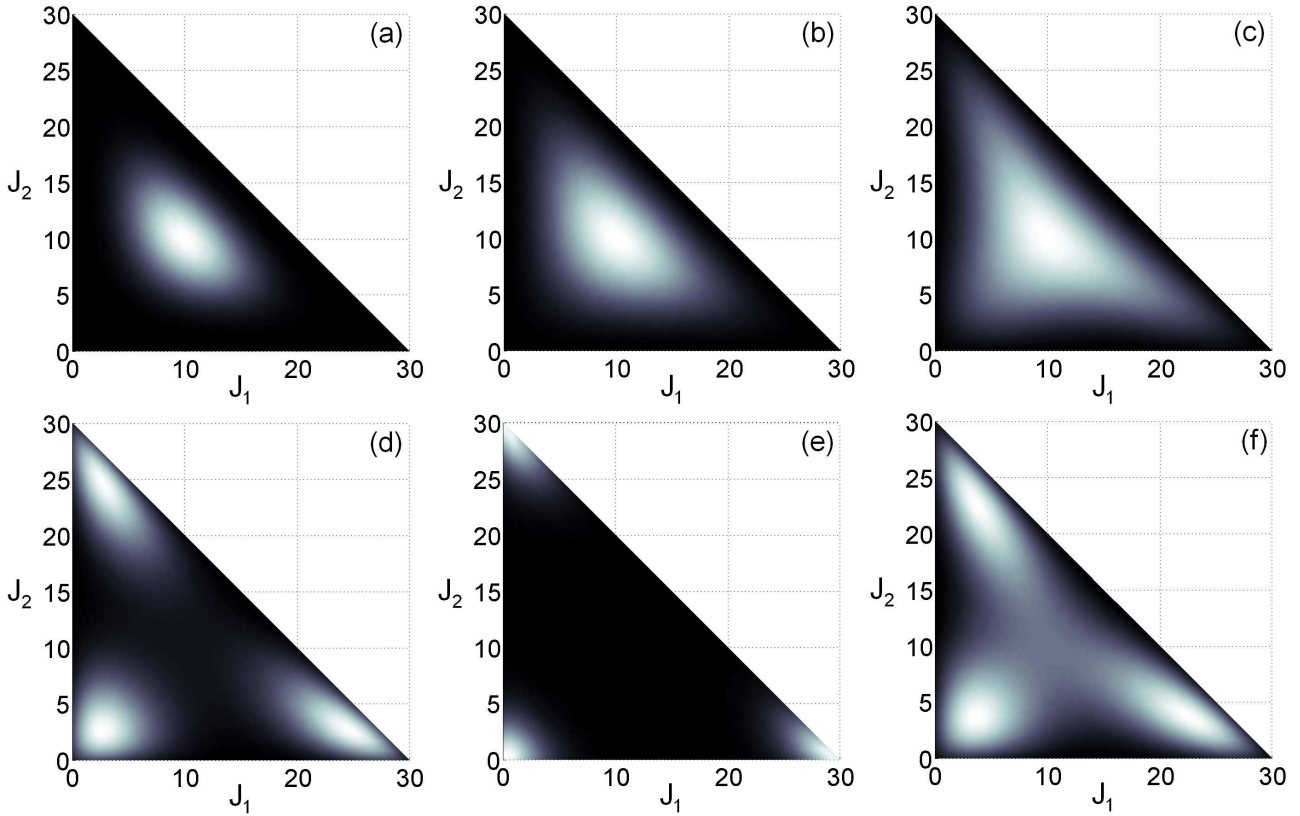


Figura 6.6.1: Distribuição Q_J para o estado fundamental do Hamiltoniano (3.2.20) para vários valores dos parâmetros de colisão. Considerando $N = 30$ partículas e escolhendo a unidade de tempo tal que $\Omega = -1$, exibimos a representação do estado fundamental para os seguintes valores das taxas reduzidas de colisão: (a) $\chi = \mu = 0$, (b) $\chi = 1,8$, $\mu = 0$, (c) $\chi = 2$, $\mu = 0$, (d) $\chi = 2,2$, $\mu = 0$, (e) $\chi = 3$, $\mu = 0$ e (f) $\chi = 2,2$, $\mu = \frac{\chi}{50}$.

bem localizado no espaço populacional, centrado em $J_1 = J_2 = 10$. Portanto, o estado fundamental está relacionado ao regime dinâmico de oscilação Josephson, pois não possui comportamento preferencial por nenhum modo local. Esta “atitude” de $|\psi_0\rangle$ para $\chi < 2$ poderia ser inferida da figura 6.1.1.a, onde mostramos que as órbitas regulares clássicas próximas ao ponto fixo 1^+ estão associadas à dinâmica de OJ.

Aumentando a taxa de autocolisão para $\chi = 1,8$, mas conservando $\mu = 0$, notamos que a função Q_J do estado fundamental se alarga no espaço das ações J_1 e J_2 , mas permanece centrada na situação em que os três poços estão em média igualmente populados, como vemos no gráfico 6.6.1.b. Quando o parâmetro de colisão atinge o valor de transição $\chi_c = 2$, não notamos ainda qualquer mudança essencial na representação de $|\psi_0\rangle$, apenas observamos a sequência da expansão da distribuição, acompanhada de leves prolongamentos nas direções de $J_1 = 30$, $J_2 = 30$ e $J_1 = J_2 = 0$, como mostramos na figura 6.6.1.c. Era esperado que o estado fundamental não apresentasse uma mudança abrupta em χ_c para N finito, pois a transição súbita somente ocorre no limite $N \rightarrow \infty$, ou na abordagem semiclássica.

Para $\chi = 2,2$, gráfico 6.6.1.d, vemos uma importante alteração em Q_J , que agora exibe três porções desconexas localizadas próximas aos “cantos” do espaço populacional. Portanto, a distribuição concentra-se nas três regiões onde todos os bósons estão aprisionados em um mesmo modo local. Prevíamos esta mudança de comportamento de $|\psi_0\rangle$, pois após a transição, que se apresenta de forma contínua nos resultados quânticos para N finito, o estado fundamental deve convergir no limite clás-

sico aos três pontos fixos 4^+ . Estes pontos de equilíbrio representam a situação na qual grande parte das partículas está em apenas um poço, como vimos nas figuras 6.1.1.d-6.1.1.f, onde mostramos que as trajetórias regulares próximas ao ponto 4^+ estão associadas ao regime de AAM em um único modo.

Para taxas de autocolisão ainda maiores, como no gráfico 6.6.1.e para $\chi = 3$, notamos que Q_J já está centrada nas três situações de auto-aprisionamento máximo. Os pontos de equilíbrio 4^+ também deslocam-se em direção às condições $J_1 = 30$, $J_2 = 30$ e $J_1 = J_2 = 0$ para χ crescente, como vimos nas figuras 5.3.2 e 5.3.3. Este deslocamento é equivalentemente mostrado no gráfico 6.1.1, no qual observamos o ponto 4^+ mover-se em direção ao pólo sul da esfera de Bloch de condensados gêmeos.

Por fim, consideramos o efeito das colisões cruzadas sobre a distribuição populacional do estado fundamental. Na figura 6.6.1.f exibimos a função Q_J de $|\psi_0(\chi = 2, 2; \mu = \frac{\chi}{50})\rangle$, onde observamos que a representação do estado ainda apresenta três máximos, mas é não nula na região central do espaço de ocupações médias. Em comparação ao gráfico 6.6.1.d, podemos concluir que a presença das colisões cruzadas tem efeito oposto ao aumento da taxa de autocolisão, favorecendo o regime de OJ em detrimento à dinâmica de AAM, propiciada pelas autocolisões. Contudo, devemos lembrar que a transição ocorre somente para o espalhamento atrativo, no qual já havíamos notado que o aumento de μ tem efeito oposto a χ , mas a situação é invertida quando $\chi, \mu < 0$.

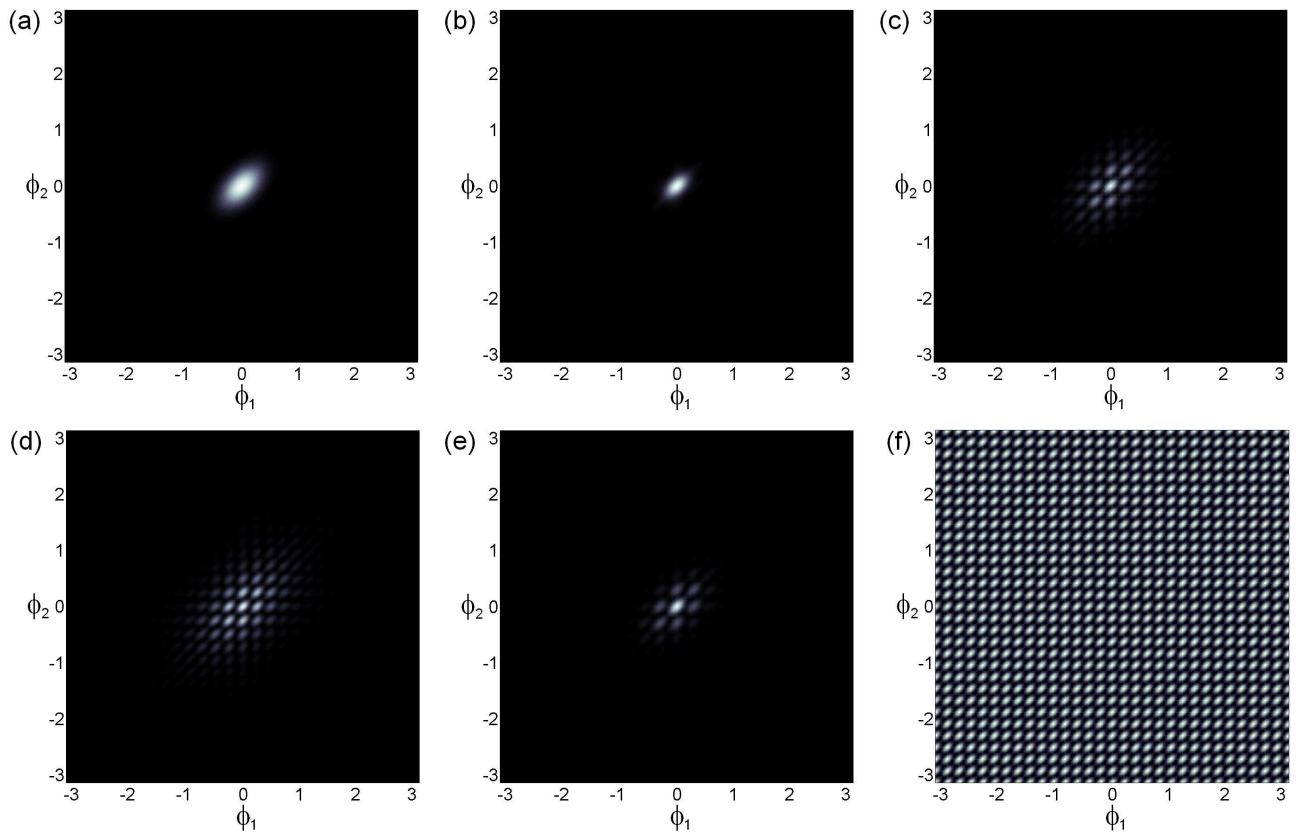


Figura 6.6.2: Função semiclassical de fase do estado fundamental do Hamiltoniano (3.2.20) para vários valores dos parâmetros de colisão. Mais uma vez empregamos $N = 30$ e $\Omega = -1$ em todos os gráficos. Os parâmetros reduzidos de colisão são dados por: (a) $\chi = \mu = 0$, (b) $\chi = 2$, $\mu = 0$, (c) $\chi = 2.5$, $\mu = 0$, (d) $\chi = 3$, $\mu = 0$ e (e) $\chi = 3$, $\mu = \frac{\chi}{10}$. No gráfico (e) mostramos a função semiclassical de fase para a superposição $|\psi_{AA}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|N, 0, 0\rangle + |0, N, 0\rangle + |0, 0, N\rangle)$.

Também analisamos o comportamento da representação do estado fundamental no espaço confi-

guracional em função dos parâmetros de colisão. A figura 6.6.2.a mostra a função semiclássica de fase para $|\psi_0(\chi = 0; \mu = 0)\rangle = |1^\pm\rangle$. Como esperado, vemos uma distribuição coerente centrada em $\phi_1 = \phi_2 = 0$.

Aumentando a taxa de autocolisão para o valor crítico clássico $\chi_c = 2$, notamos que $|\psi_0\rangle$ é um estado comprimido no espaço configuracional, pois sua representação Φ , mostrada no gráfico 6.6.2.b, é mais localizada que o estado coerente centrado nas mesmas coordenadas angulares, ao passo que sua função Q_J associada possui distribuição mais alargada que $|1^\pm\rangle$. Observe que novamente nenhuma alteração brusca aconteceu em χ_c , apenas o prosseguimento contínuo de uma compressão.

No entanto, se elevamos ainda mais intensidade das autocolisões, notamos o aparecimento de estruturas secundárias em torno do máximo central, como exposto na figura 6.6.2.c para $\chi = 2,5$ e $\mu = 0$. O gráfico 6.6.2.d mostra a função semiclássica de fase do estado fundamental para $\chi = 3$, onde observamos que subseqüentes acréscimos na taxa de autocolisão levam ao alargamento da distribuição Φ , por meio da formação de novos máximos isolados.

Novamente mostramos que o efeito das colisões cruzadas é inverso às autocolisões quando consideramos o espalhamento atrativo. O gráfico 6.6.2.e exibe a distribuição angular para $|\psi_0\rangle$ com parâmetros $\chi = 3$ e $\mu = \frac{\chi}{10}$, onde observamos que a presença das interações entre bósons de diferentes poços reduz a região do espaço configuracional no qual Φ possui valores não nulos, eliminando parte dos máximos isolados.

A forma fragmentada de Φ indica claramente a presença de uma interferência de fase provocada por uma superposição de estados localizados em cada um dos três modos. Para confirmar esta expectativa, exibimos na figura 6.6.2.f a função semiclássica de fase do estado $|\psi_{AA}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|N, 0, 0\rangle + |0, N, 0\rangle + |0, 0, N\rangle)$, construído de maneira a representar a superposição dos estados maximamente auto-aprisionados em cada poço da armadilha. Note que a estrutura de interferência formada é a mesma encontrada para o estado fundamental em valores de χ suficientemente superiores a χ_c . No entanto, vemos que as distribuições fragmentadas $|\psi_0\rangle$ não são completamente delocalizadas, diferentemente de $|\psi_{AA}\rangle$, pois concentram-se em torno de $\phi_1 = \phi_2 = 0$ e alargam-se lentamente com χ crescente.

No entanto, é clara a sugestão que no limite $\chi \rightarrow \infty$ obtemos $|\psi_0(\chi)\rangle \rightarrow |\psi_{AA}\rangle$. Podemos ratificar esta proposta aplicando o limite de autocolisões atrativas fortes ao Hamiltoniano (3.2.20):

$$\hat{H}(\kappa \rightarrow -\infty) = \frac{\kappa}{2}(4Q_1^2 + 3Q_2^2). \quad (6.6.3)$$

Portanto, $\hat{H}$ no limite $\kappa \rightarrow -\infty$ é diagonalizado pelos estados $|n_1, n_2, n_3\rangle$, pois os geradores Q_1 e Q_2 representam os operadores de balanço populacional entre os modos locais, definidos em (3.2.1). Logo, para $\kappa < 0$, não é difícil mostrar que o estado fundamental do Hamiltoniano (6.6.3) é triplamente degenerado. O auto-espaço associado a E_0 é gerado pelos estados $|N, 0, 0\rangle$, $|0, N, 0\rangle$ e $|0, 0, N\rangle$, conseqüentemente inclui a superposição $|\psi_{AA}\rangle$.

A transição de fase presente no modelo de três poços para colisões atrativas simboliza a mudança de mínimo global de 1^+ , associado ao regime dinâmico populacional de OJ, para os três pontos equivalentes 4^+ , que são os centros das regiões da esfera de Bloch tomadas pelas órbitas de AAM em um único poço. Esta mudança não é abrupta quando N é finito, mas o estado $|\psi_0\rangle$ modifica continuamente sua distribuição populacional de $|1^\pm\rangle$ para superposições aproximadas dos estados coerentes centrados nos pontos fixos 4^+ , com χ crescente. No espaço configuracional observamos de maneira suave a **transição de fase fragmentada**, na qual a função Φ comprime-se com o aumento da taxa de autocolisão, quando comparada à representação do estado coerente $|1^\pm\rangle$, até que estruturas de interferência começam a aparecer, indicando a superposição de estados auto-aprisionados nos três modos locais.

Inicialmente a estrutura de interferência fica restrita à região próxima de $\phi_1 = \phi_2 = 0$, diferentemente da superposição limítrofe $|\psi_{AA}\rangle$. Este comportamento também poderia ser inferido dos resultados clássicos da figura 6.1.5.b, onde vimos que o ângulo $\phi_1 = \phi_2$ oscila limitadamente em torno de zero para as trajetórias de AAM próximas ao ponto de equilíbrio 4^+ .

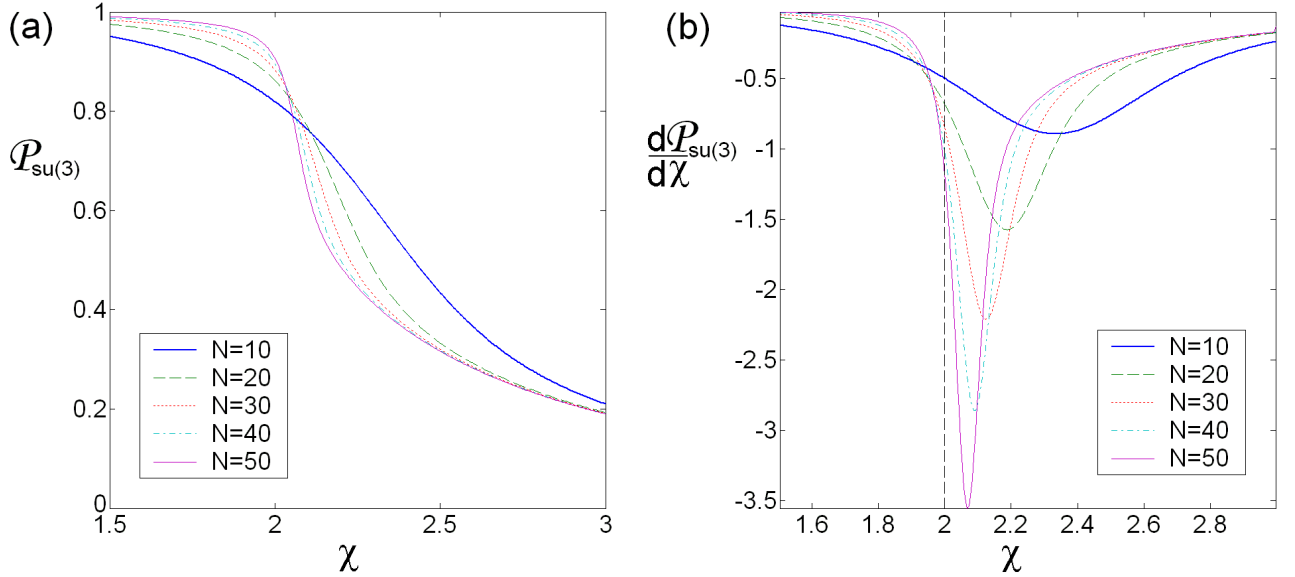


Figura 6.6.3: À esquerda exibimos a pureza generalizada $\mathcal{P}_{su(3)}$ do estado fundamental em função de χ para vários valores de N , desprezando os efeitos das colisões cruzadas. A derivada $\frac{d\mathcal{P}_{su(3)}}{d\chi}$ em função de χ é mostrada à direita. A linha vertical tracejada marca o valor da transição em $\chi_c = 2$.

O estado fundamental na ausência de colisões é um estado coerente, portanto sua pureza em relação a $su(3)$ é máxima. Entretanto, estudando as representações de $|\psi_0(\chi; \mu)\rangle$ nos subespaços de M , podemos afirmar que o estado fundamental sofre vários processos de decoerência, pois manifesta compressões, expansões, fragmentação de fase e formação de superposições não coerentes quando variamos a intensidade das interações bosônicas. Também notamos que, embora contínuas, as alterações em $|\psi_0\rangle$ são mais rápidas e profundas quando χ assume valores pouco superiores a χ_c , desconsiderando as colisões cruzadas.

Esperamos que $\mathcal{P}_{su(3)}(|\psi_0(\chi; \mu)\rangle)$ de alguma maneira “sinalize” a presença da transição de fase, mesmo para N finito, pois utilizando a pureza podemos quantificar a intensidade e a “velocidade” dos processos de decoerência presentes no estado fundamental com a variação do parâmetro χ .

A pureza generalizada de $|\psi_0\rangle$ em função da taxa de autocolisão é mostrada no gráfico 6.6.3.a, para vários valores do número total de partículas e considerando $\mu = 0$. Observamos que $\mathcal{P}_{su(3)}$ apresenta comportamento semelhante para todo N , caracterizado por um lento decréscimo até valores de χ pouco superiores a χ_c , quando a decoerência do estado fundamental passa a ser mais intensa, para logo após retornar ao lento decaimento. Notamos também que a inclinação de $\mathcal{P}_{su(3)}$ no período de forte decoerência é maior à medida que N cresce. Esta tendência sugere que os sinais da transição de fase podem ser encontrados nas propriedades de escala em N da derivada da pureza em relação a χ .

A figura 6.6.3.b mostra as curvas de $\frac{d\mathcal{P}_{su(3)}}{d\chi}$ para os diversos números de bósons condensados. Vemos que o mínimo da derivada da pureza torna-se mais acentuado para N crescente, ao passo que o valor de χ correspondente ao mínimo desloca-se à esquerda, aproximando-se do valor crítico χ_c , representado pela reta vertical tracejada.

O valor de χ associado ao mínimo de $\frac{d\mathcal{P}_{su(3)}}{d\chi}$ é definido como o **parâmetro crítico quântico escalável** $\chi_c^q(N)$, que esperamos convergir a χ_c no limite macroscópico.

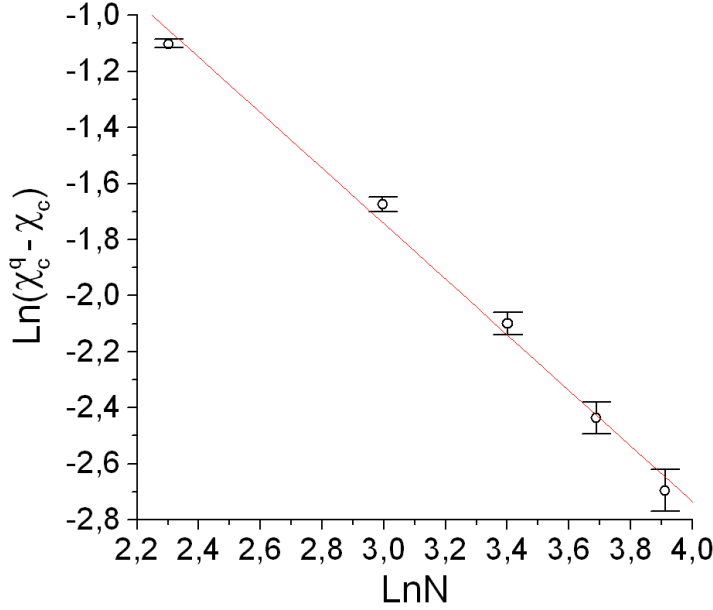


Figura 6.6.4: Gráfico dos valores de $\text{Ln}(\chi_c^q - \chi_c)$, extraídos das cinco curvas da figura 6.6.3.b, em função de $\text{Ln}N$. Obtemos uma lei de potência entre $(\chi_c^q - \chi_c)$ e N por meio do ajuste linear aos dados, mostrado em vermelho.

A tendência de convergência entre χ_c^q e χ_c para N crescente é analisada no gráfico 6.6.4, no qual exibimos os valores de $\text{Ln}(\chi_c^q - \chi_c)$, extraídos das cinco curvas exibidas na figura 6.6.3.b, em função de $\text{Ln}N$. As barras de erro apresentam a estimativa do desvio numérico propagado no cálculo do parâmetro crítico quântico.

Os cinco pontos presentes no gráfico sugerem um comportamento linear, confirmado estatisticamente. Logo, o ajuste de uma reta aos dados fornece a seguinte lei de potência entre $(\chi_c^q - \chi_c)$ e N :

$$\chi_c^q - \chi_c = e^{1,2 \pm 0,2} N^{-0,99 \pm 0,05}. \quad (6.6.4)$$

A equação (6.6.4) manifesta convincentemente que $\chi_c^q \rightarrow \chi_c$ quando $N \rightarrow \infty$. Deste modo, mostramos que a pureza generalizada pode ser utilizada para “sinalizar” corretamente uma transição de fase quântica, pois a decoerência do estado fundamental para χ crescente exibe comportamento de escala com o número de partículas condensadas.

O espalhamento atrativo entre os bósons em um mesmo poço de potencial é responsável pela transição de fase presente no modelo. No entanto, podemos ainda nos perguntar qual o efeito das autocolisões repulsivas sobre o estado fundamental. Por este motivo construímos o gráfico 6.6.5, onde mostramos as curvas de três quantidades interessantes calculadas em $|\psi_0\rangle$, considerando novamente $N = 30$, $\mu = 0$ e $\Omega = -1$.

A fim de comparação com o caso de interações repulsivas, exibimos na figura 6.6.5.a o comportamento de três importantes propriedades do estado fundamental no regime de colisões atrativas, situação já bem conhecida. A curva azul sólida representa $\mathcal{P}_{su(3)}(|\psi_0\rangle)$ em função de χ , também presente no gráfico 6.6.3. Como vimos anteriormente, o estado $|1^\pm\rangle = |\psi_0(\chi = 0; \mu = 0)\rangle$ possui pureza máxima,

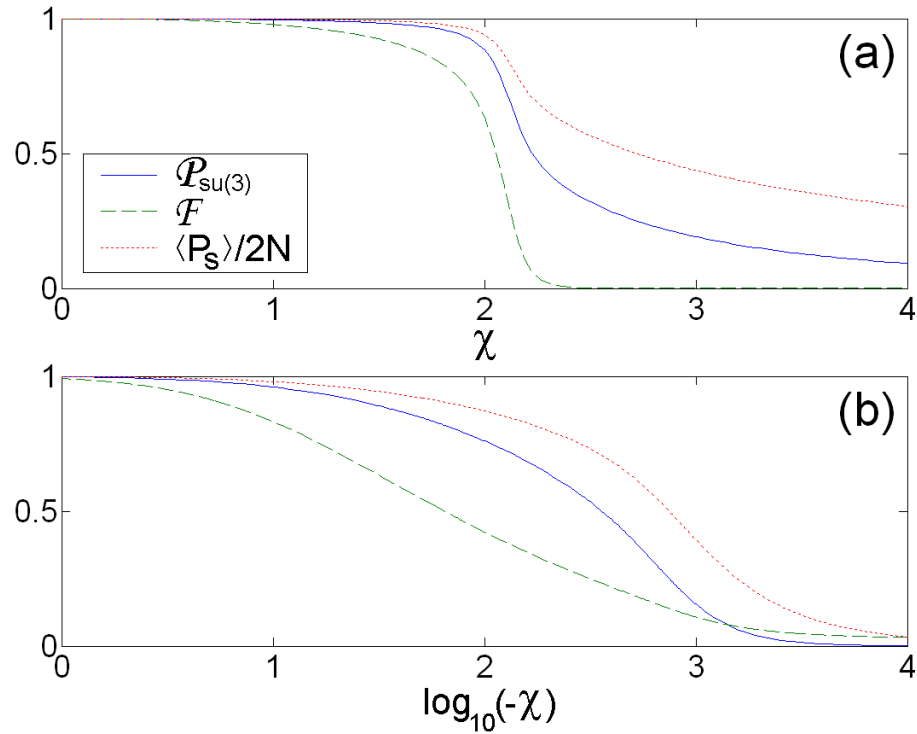


Figura 6.6.5: No painel superior (inferior) temos as curvas para a pureza $\mathcal{P}_{su(3)}$, a fidelidade $\mathcal{F}$ em relação ao estado coerente $|N; w_1 = w_2 = 1\rangle$ e a média normalizada do operador de tunelamento P_S calculadas todas no estado fundamental do modelo em função de $\chi > 0$ ($\log_{10}(-\chi)$, para $\chi < 0$). Novamente consideramos $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\mu = 0$.

que decai lentamente com χ crescente, até sofrer um processo de intensa decoerência para valores pouco superiores a χ_c . Não muito adiante, a pureza volta a diminuir de maneira relativamente vagarosa.

Em verde tracejado mostramos a curva da fidelidade^{6.8} $\mathcal{F} = |\langle 1^\pm | \psi_0 \rangle|^2$ do estado fundamental em relação ao estado coerente centrado em $w_1 = w_2 = 1$. Já sabemos que o estado coerente considerado é idêntico ao estado fundamental na ausência de colisões. Então, $|\psi_0\rangle$ passa por uma compressão inicial no espaço configuracional com o aumento de χ , que se reflete em $\mathcal{F}$ como um lento decréscimo. Mas na região do parâmetro próxima a χ_c , observamos que a fidelidade cai rapidamente a praticamente zero, indicando que o estado fundamental já não possui qualquer semelhança com o estado coerente inicial. Este comportamento era esperado, pois vimos que o estado fundamental transforma-se continuamente em uma superposição aproximada dos estados coerentes centrados nos pontos fixos 4^+ , quando χ passa por valores vizinhos ao parâmetro crítico.

Comparando as curvas para $\mathcal{P}_{su(3)}$ e $\mathcal{F}$ notamos que $|\psi_0\rangle$ não extingue toda sua coerência para valores relativamente altos de χ , mas perde toda sua correspondência com o estado $|1^\pm\rangle$. Este fenômeno é devido à transição para uma superposição dos três estados auto-aprisionados, que não guardam qualquer semelhança com $|1^\pm\rangle$, mas constituem uma superposição incoerente de três estados quase coerentes.

A curva vermelha pontilhada em 6.6.5.a apresenta a média do operador de tunelamento total em

^{6.8}A fidelidade é simplesmente o módulo ao quadrado do produto escalar entre dois estados normalizados, portanto quantifica a projeção de um estado sobre outro. Quando os estados são idênticos, a menos de uma fase global sem conteúdo físico, a fidelidade entre eles é máxima e igual a um. Se os estados são ortogonais, então a fidelidade é mínima e nula.

função de χ . Como vimos em (6.6.2), $|1^\pm\rangle$ é o auto-estado de P_S com autovalor máximo, cujo valor é $2N$. Logo, o estado fundamental na ausência de colisões possui tunelamento total máximo e por este motivo normalizamos por $2N$ os resultados para $\langle P_S \rangle(\chi)$. Como discutimos anteriormente, a transição de fase presente em nosso modelo simboliza a mudança do regime dinâmico populacional do estado fundamental, que vai da OJ ao AAM. Portanto, o tunelamento normalizado do sistema deve acompanhar o comportamento da pureza, pois ambas medidas são máximas para $\chi = 0$ e devem decrescer lentamente para pequenas intensidades de autocolisão, quando a representação de $|\psi_0\rangle$ no espaço configuracional é comprimida. No entanto, em valores superiores a χ_c , esperamos uma rápida redução de $\langle P_S \rangle$, pois o estado fundamental passa a representar uma disposição de auto-aprisionamento do sistema, na qual o tunelamento entre os poços é suprimida.

No gráfico semilogarítmico 6.6.5.b acompanhamos novamente as mesmas três medidas do estado fundamental, mas desta vez para $\chi < 0$. O decaimento das propriedades estudadas de $|\psi_0\rangle$ em função de $|\chi|$ crescente é bem mais lento na presença de colisões repulsivas, pois é necessário elevar o valor absoluto da taxa de autocolisão algumas ordens de grandeza adicionais, em comparação ao caso atrativo, para obtermos variações de mesma magnitude^{6.9}.

Diferentemente de $\chi > 0$, a pureza generalizada do estado fundamental não apresenta uma região distinguível de rápida decoerência. Entretanto, observamos que $\mathcal{P}_{su(3)}$, $\mathcal{F}$ e $\langle P_S \rangle$ também decrescem até valores relativamente reduzidos quando $|\chi| \gg 1$. Portanto, no regime de autocolisões repulsivas bastante fortes encontramos também um estado fundamental impuro, infiel em relação a $|1^\pm\rangle$ e com tunelamento suprimido.

Porém, há uma profunda diferença entre os dois regimes de colisão, pois não existe transição de fase quântica quando $\chi < 0$. A ausência de transição já estava prevista nos cálculos semiclássicos, onde vimos que não ocorre mudança de mínimo global em $\mathcal{H}$ para interações bosônicas repulsivas, justificando a lenta variação das três curvas mostradas na figura 6.6.5.b para um amplo espectro de intensidade da taxa de autocolisão. Observe também que a pureza atinge valores praticamente nulos no espalhamento repulsivo forte, indicando que o estado fundamental possui aproximadamente a incerteza total máxima em $su(3)$ para N finito. Todavia, a fidelidade não se anula para colisões repulsivas intensas, significando que $|\psi_0\rangle$ ainda conserva alguma semelhança a $|1^\pm\rangle$. Este comportamento é completamente oposto ao espalhamento atrativo, onde vimos que o estado fundamental não exibe nenhuma conformidade com $|1^\pm\rangle$ após o período de modificações profundas, mas ainda possui alguma pureza.

Mas é evidente que as autocolisões são responsáveis pela supressão do tunelamento entre os modos locais, como podemos observar nas curvas para $\frac{\langle P_S \rangle}{2N}$, independentemente do tipo de interação.

As representações Q_J e Φ do estado fundamental para colisões repulsivas fortes são mostradas no gráfico 6.6.6, onde escolhemos $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -10^4$ e $\mu = 0$. Em comparação a $|\psi_0\rangle$ na ausência de colisões, cujas distribuições em M são exibidas nas figuras 6.6.1.a e 6.6.2.a, observamos que o estado fundamental tem sua representação populacional comprimida com o aumento de $|\chi|$, enquanto a função semiclássica de fase delocaliza-se no espaço configuracional. O processo de compressão-expansão é o único responsável pela decoerência de $|\psi_0\rangle$, levando-o até a perda quase total de sua pureza generalizada.

Contudo, vemos que a função Q_J (Φ) de $|\psi_0\rangle$ continua exibindo apenas um máximo centrado em $J_1 = J_2 = 10$ ($\phi_1 = \phi_2 = 0$). No caso atrativo, de maneira diversa, ocorre a tricotomia (fragmentação) da distribuição no espaço populacional (configuracional), fenômeno causador da infidelidade praticamente máxima atingida pelo estado fundamental em relação a $|1^\pm\rangle$.

^{6.9}Por este motivo adotamos a escala logarítmica para χ , no intuito de comparar os resultados ao caso de interações atrativas.

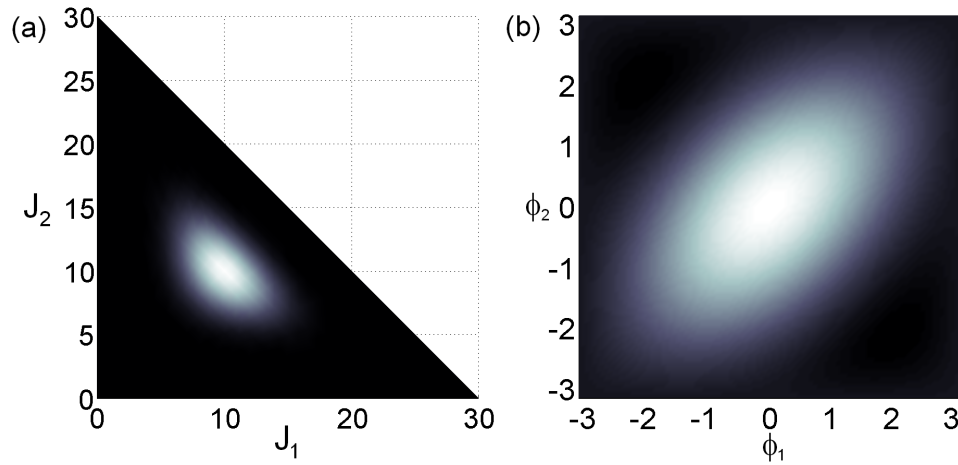


Figura 6.6.6: O gráfico à esquerda (direita) mostra a distribuição Q_J (função semiclássica de fase) do estado fundamental para os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -10^4$ e $\mu = 0$.

Portanto, o fato de $|\psi_0\rangle$ não sofrer trifurcação ou fragmentação para $\chi < 0$ explica sua pequena conservação de fidelidade com $|1^\pm\rangle$, não presente para $\chi > 0$. Do mesmo modo, vemos que a descontinuidade do processo de compressão-expansão, causada pela tricotomia-fragmentação no caso atrativo, é responsável pela manutenção de alguma pureza no estado fundamental em toda região de parâmetros analisada, diferentemente do espalhamento repulsivo.

6.6.1 Análise do Espectro

Na seção anterior estudamos a fidelidade de $|\psi_0\rangle$ em relação ao estado coerente $|1^\pm\rangle$, centrado no ponto de equilíbrio $w_1 = w_2 = 1$ do análogo clássico. Então, de certa forma conseguimos quantificar a dinâmica de tunelamento presente no estado fundamental, pois vimos que $\langle\psi_0|P_S|\psi_0\rangle$ acompanha o comportamento decrescente de $|\langle\psi_0|1^\pm\rangle|^2$ para $|\chi|$ crescente, visto que $|1^\pm\rangle$ representa o estado de máximo tunelamento total médio.

As vizinhanças no espaço de fase do ponto fixo $1^\pm$ são tomadas por órbitas em regime populacional de oscilação Josephson sempre que este ponto de equilíbrio é estável, caso contrário não encontramos trajetórias próximas em M com esta classe de dinâmica. O regime de OJ é caracterizado pelo tunelamento não preferencial entre os três poços, que são igualmente ocupados. Na seção 6.1.2, mostramos também que a dinâmica populacional quântica exata de estados coerentes centrados nas condições iniciais de trajetórias de OJ concordam qualitativamente com os resultados das ocupações médias clássicas.

Portanto, utilizando a fidelidade $\mathcal{F}$ podemos comparar um estado estacionário a um estado coerente centrado em um ponto de equilíbrio do sistema. Se este ponto fixo associado é estável, então sua vizinhança no espaço de fase apresenta trajetórias regulares relativas a um determinado regime dinâmico populacional, de maneira que a dinâmica quântica exata de um estado coerente localizado nesta região de M exibe qualitativamente o mesmo regime populacional. Logo, o estado estacionário que possui alta fidelidade em relação a um estado coerente centrado em um ponto fixo estável deve manifestar uma dinâmica populacional semelhante às órbitas próximas deste ponto de equilíbrio.

Seguindo este raciocínio, podemos identificar no espectro de $\hat{H}$, por intermédio da figura 6.6.7, os estados que exibem os regimes dinâmicos populacionais estudados no modelo. Cada painel desta figura apresenta os estados estacionários $|E_m\rangle$ do modelo para uma escolha das taxas de colisão, mas

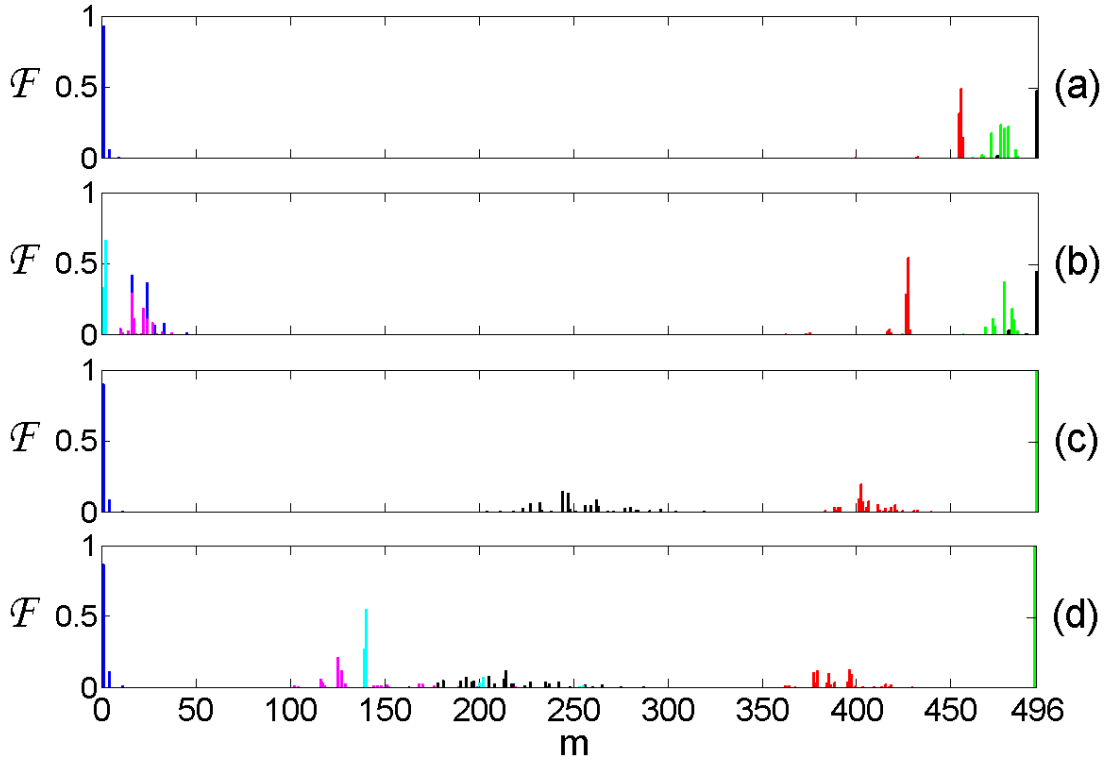


Figura 6.6.7: Fidelidade dos auto-estados de $\hat{H}$ em relação aos estados coerentes centrados nos pontos fixos da dinâmica semiclassical do modelo. O parâmetro de autocolisão em cada painel é dado por: (a) $\chi = 1, 5$, (b) $\chi = 3$, (c) $\chi = -6$ e (d) $\chi = -8$. Em todos os gráficos $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\mu = 0$. As cores das barras indicam o estado coerente de $SU(3)$ que comparamos aos estados estacionários: $|1^\pm\rangle$ (azul escuro), $|2^\pm; w_1 = w_2\rangle$ (verde), $|3^\pm; w_1 = w_2\rangle$ (rosa), $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$ (azul claro), $|N; w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}}, w_2 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}\rangle$ (preto) e $|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle$ (vermelho). Note que esta é a mesma associação de cores empregada na figura 5.3.6 para os pontos de equilíbrio.

fixando novamente os parâmetros $N = 30$ e $\Omega = -1$. Os estados $|E_m\rangle$ são simbolizados no gráfico pelos índices m , que são escolhidos de modo a colocá-los em ordem crescente das auto-energias E_m . As barras coloridas para cada valor m exibem a fidelidade de $|E_m\rangle$ em relação aos estado coerentes centrados nos pontos de equilíbrio encontrados na seção 5.3. O código de cores é o mesmo utilizado no espectro clássico de energias da figura 5.3.6, exceto que agora os resultados para pontos equivalentes ou simétricos por rotação não são idênticos.

Por simplicidade, entre os resultados referentes às classes de três pontos equivalentes $2^\pm$, $3^\pm$ e $4^\pm$, apenas mostramos a fidelidade associada aos estados coerentes centrados nos pontos de equilíbrio sobre a reta restrita aos reais $w_1 = w_2$, que são respectivamente definidos como $|2^\pm; w_1 = w_2\rangle$, $|3^\pm; w_1 = w_2\rangle$ e $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$. Também considerando a equivalência (semelhança) dos dois estados de poço vazio (de vórtice) apenas exibimos $\mathcal{F}$ em relação ao ponto $(w_1, w_2) = (-1, 0)$ ($w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}} = w_2^*$).

O gráfico 6.6.7.a mostra a fidelidade dos estados estacionários em relação aos estados coerentes selecionados, para taxas de colisão $\chi = 1, 5$ e $\mu = 0$. Estes valores de parâmetros são referentes à dinâmica clássica do modelo no regime anterior à bifurcação, responsável pelos pontos 3^+ e 4^+ , e à transição de fase. Como já discutido, o estado $|1^\pm\rangle$ possui alta fidelidade associada ao estado fundamental para taxas de autocolisão atrativas inferiores a χ_c . Observamos que os estados coerentes que apresentam maior fidelidade no espectro são os relacionados aos pontos de equilíbrio estável, que

neste caso são os estados de poço vazio (EPV), de vórtice (EV) e 1^+ . Note também que nenhum estado $|E_m\rangle$ manifesta grande fidelidade em relação a $|2^\pm, w_1 = w_2\rangle$, cujo ponto de equilíbrio associado é instável.

No entanto, vemos que os estados coerentes centrados em pontos fixos instáveis manifestam alguma fidelidade em uma maior região do espectro, enquanto os estados associados a pontos fixos estáveis exibem valores não nulos de $\mathcal{F}$ em uma pequena porção bem localizada dos $|E_m\rangle$. Este fenômeno reflete o comportamento de localização das órbitas regulares e caóticas sobre o espaço de fase.

Nas seções anteriores, vimos que as trajetórias caóticas percorrem regiões mais extensas em M , nas quais os pontos fixos instáveis geralmente estão localizados. Também observamos que a dinâmica quântica não linear do modelo causa o alargamento das representações em M dos estados coerentes. Logo, os estados estacionários associados à dinâmica caótica devem possuir distribuições bastante delocalizadas em M , abrangendo principalmente as regiões tomadas por órbitas caóticas no análogo clássico, de modo que os estados $|E_m\rangle$ exibem uma pequena sobreposição com o estado coerente centrado em um ponto de equilíbrio instável, mas somente se o valor de E_m é próximo à $\mathcal{H}$ calculado neste ponto fixo.

Ainda considerando interações atrativas, mas para valores das taxas de colisão superiores a χ_c e χ_+ , obtemos algumas modificações na composição do espectro. A figura 6.6.7.b mostra o resultados da fidelidade para $\chi = 3$ e $\mu = 0$. Como previsto, o estado $|1^\pm\rangle$ não apresenta fidelidade significativa calculada no estado fundamental, porém há grande sobreposição entre $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$, relacionado ao ponto fixo que manifesta o regime de AAM no análogo clássico, e $|\psi_0\rangle$. Note também que o estado $|1^\pm\rangle$ exhibe agora o comportamento esperado de um estado coerente centrado sobre um ponto de equilíbrio instável, circunstância verdadeira para 1^+ quando $\chi \geq \frac{9}{4} + \mu$.

O estado de poço vazio e o estado de vórtice apresentam fidelidades máximas no espectro próximas a 0,5, aparentemente baixas para estados coerentes centrados em pontos fixos estáveis. Entretanto, devemos lembrar que os resultados mostrados consideram apenas um dos dois estados isoenergéticos de cada uma destas duas classes de pontos de equilíbrio. Logo, o estado estacionário mais fiel a $|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle$ ($|N; w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}} = w_2^*\rangle$) muito provavelmente representa uma superposição aproximada de ambos EPV (EV), para a qual $\mathcal{F} \cong 0,5$ é o cálculo estimado corretamente.

O gráfico 6.6.7.c apresenta a fidelidade nos $|E_m\rangle$ para o espalhamento repulsivo, com taxa de autocolisão $\chi = -6$ e deconsiderando a interação cruzada, tal que a bifurcação responsável pelos pontos fixos 3^- e 4^- ainda não está presente. No entanto, na figura 6.6.7.d, exibimos $\mathcal{F}$ após a bifurcação, para $\chi = -8$ e $\mu = 0$.

Como previsto, os estados coerentes associados aos pontos fixos estáveis 1^- , 2^- e 4^- apresentam os maiores valores de fidelidade entre os estados coerentes estudados. Também confirmando nossas expectativas, a fidelidade em relação aos estados coerentes centrados nos pontos fixos 3^- , de poço vazio e de vórtice não manifesta valores elevados, mas se distribui em uma ampla região do espectro, pois estes pontos de equilíbrio são instáveis para os conjuntos de parâmetros escolhidos no espalhamento repulsivo.

Segundo a figura 5.3.6, o ponto de equilíbrio 2^- representa o máximo global de $\mathcal{H}$ para todos valores da taxa de autocolisão repulsiva, desprezando possíveis efeitos das colisões cruzadas. Então, retornado às figuras 6.6.7.c e 6.6.7.d, notamos que o estado estacionário de maior energia $|E_{496}\rangle$ possui fidelidade praticamente máxima em relação ao estado $|2^\pm; w_1 = w_2\rangle$, indicando acordo entre os resultados clássicos e quânticos referentes à energia e localização de seus estados estacionários.

No gráfico 6.1.9, vimos que a vizinhança em M do ponto fixo estável 2^- é tomada por órbitas regulares associadas ao regime populacional de AAM em um único poço. Portanto, ao encontrarmos estados estacionários bastante fiéis a $|2^\pm; w_1 = w_2\rangle$, identificamos no espectro quântico exato a região

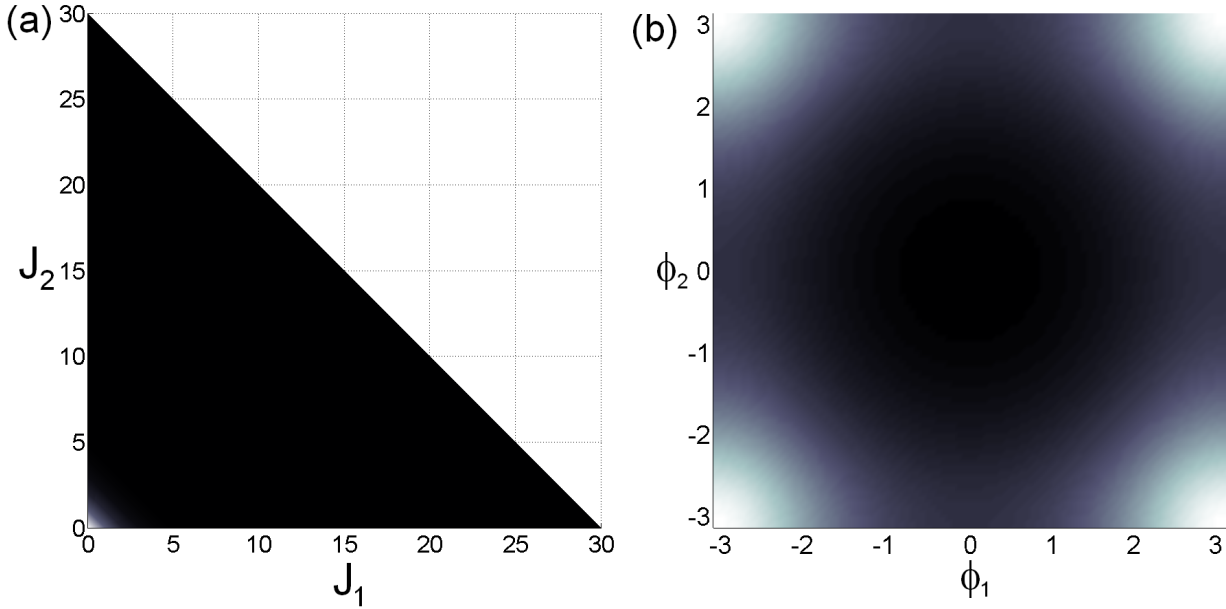


Figura 6.6.8: O gráfico à esquerda (direita) mostra a representação Husimi populacional (função semiclassical de fase) do estado estacionário de maior fidelidade em relação ao estado coerente $|2^\pm; w_1 = w_2\rangle$, para $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -8$ e $\mu = 0$. Note a distribuição populacional extremamente bem localizada próxima a $J_1 = J_2 = 0$. Quando comparadas às representações do estado coerente, os gráficos (a) e (b) não apresentam qualquer diferença visível. Esta indistinguibilidade era esperada, já que a fidelidade entre os estados é aproximadamente 0,99998.

de energia responsável pelo regime dinâmico populacional estudado.

A semelhança entre os estados $|E_{496}\rangle$ e $|2^\pm; w_1 = w_2\rangle$ é tão grande que não podemos visualizar a diferença entre suas representações nos subespaços de M . À direita (esquerda) na figura 6.6.8 exibimos a função $Q_J(\Phi)$ de $|E_{496}\rangle$, para $\chi = -8$ e $\mu = 0$, tal que $|\langle 2^\pm; w_1 = w_2 | E_{496} \rangle|^2 \cong 0,99998$. Observe com atenção a intensa concentração da distribuição populacional em torno de $J_1 = J_2 = 0$, indicando o auto-aprisionamento dos bósons no terceiro modo local. A função semiclassical de fase está distribuída ao redor de $\phi_1 = \phi_2 = \pi$, coordenadas correspondentes à fase oposta entre os condensados gêmeos e o modo solitário.

De acordo com a figura 6.1.9.d, nas vizinhanças dos pontos de equilíbrio estável 4^- encontramos uma família de órbitas regulares associadas à dinâmica populacional de AAM nos condensados gêmeos. Neste regime, dois modos locais com mesma ocupação bosônica e em fase detêm indefinidamente grande parte das partículas condensadas, enquanto o terceiro modo permanece quase vazio. Este tipo de auto-aprisionamento é bastante semelhante à dinâmica de poço vazio, exceto pela diferença de fase entre os modos populados, conforme já discutido anteriormente.

Novamente retornando à figura 6.6.7.d, vemos que a fidelidade máxima no espectro em relação ao estado $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$ é próxima a 0,5. Este valor pode indicar uma superposição aproximada entre estados coerentes centrados em dois dos três pontos fixos equivalentes da classe 4^- , da mesma maneira que sugerimos anteriormente para os estados de vórtice e poço vazio. Entretanto, a figura 6.6.9 mostra que o estado estacionário $|E_{140}\rangle$, mais fiel ao estado coerente em 4^- , não apresenta as características da superposição prevista.

Nos gráficos 6.6.9.a e 6.6.9.c mostramos, respectivamente, as funções Q_J e Φ do estado coerente $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$, para $\chi = -8$ e $\mu = 0$. Observe a concentração da distribuição populacional em $J_1 = J_2 = 15$, enquanto a função das fases localiza-se em torno de $\phi_1 = \phi_2 = \pi$, como esperado.

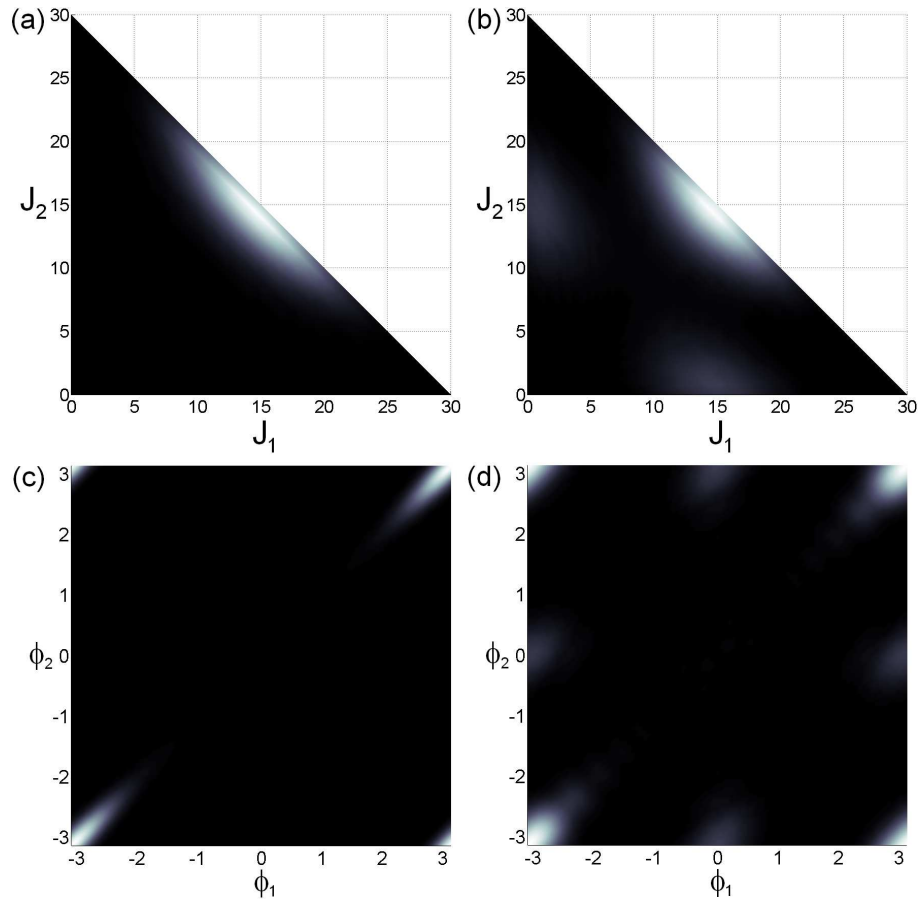


Figura 6.6.9: Comparação da distribuição Q_J e da função semiclássica de fase entre o estado coerente $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$ e seu estado mais fiel no espectro de energia, obtido com os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -8$ e $\mu = 0$. Em (a) e (c) ((b) e (d)) temos respectivamente a função Q no espaço de população e a função semiclássica de fase para o estado $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$ (mais fiel a $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$). A fidelidade entre estes dois estados é aproximadamente 0,55.

O estado estacionário de máxima fidelidade ao estado coerente centrado em 4^- , tal que $|\langle E_{140}|4^\pm; w_1 = w_2\rangle|^2 \cong 0,55$ para $\chi = -8$ e $\mu = 0$, tem suas representações no espaço populacional e configuracional apresentadas nos gráficos 6.6.9.b e 6.6.9.d, nesta ordem. Note que o estado $|E_{140}\rangle$ também apresenta corretamente a dinâmica de AAM do ponto fixo considerado, pois suas distribuições em M concentram-se principalmente em $J_1 = J_2 = 15$ e $\phi_1 = \phi_2 = \pi$. Portanto, encontramos valores praticamente nulos de Q_J nas proximidades das coordenadas $(J_1, J_2) = (15, 0)$ e $(J_1, J_2) = (0, 15)$, confirmando que há apenas uma pequena superposição entre os três estados coerentes equivalentes associados à classe 4^- .

Logo, as representações dos estados $|E_{140}\rangle$ e $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$ são bastante semelhantes, mas diferem por uma compressão no espaço populacional, acompanhada por uma expansão no espaço configuracional, além da pequena superposição. Portanto, o estado estacionário é um estado comprimido, justificando a perda de fidelidade em relação ao estado coerente mais fiel. Já discutimos anteriormente que o processo de compressão-expansão é responsável por parte da decoerência encontrada na dinâmica quântica não linear para N finito. Visto que $\mathcal{P}_{su(3)}(|E_{140}\rangle) \cong 0,25$, justificamos a suposição que relaciona a perda de coerência à infidelidade entre $|E_{140}\rangle$ e $|4^\pm; w_1 = w_2\rangle$.

A figura 6.6.10 mostra mais dois painéis de fidelidade no espectro, onde procuramos evidenciar as

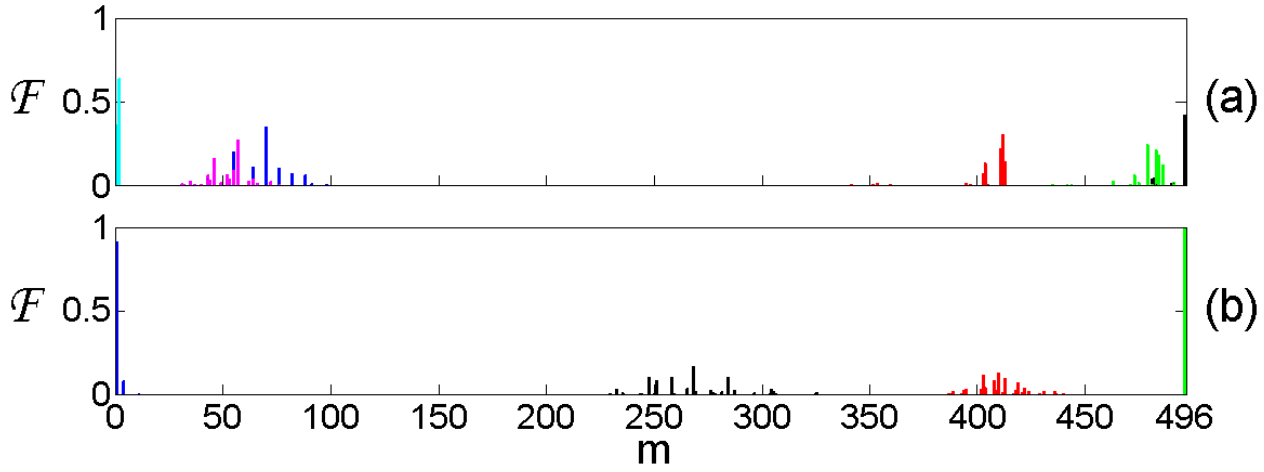


Figura 6.6.10: Fidelidade dos estados estacionários do sistema em relação aos estados coerentes centrados nos pontos de equilíbrio clássicos. O painel (a) apresenta os resultados para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, enquanto o painel (b) para $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Nos dois gráficos utilizamos $N = 30$ e $\Omega = -1$. O esquema de cores é o mesmo já especificado na legenda da figura 6.6.7.

diferenças entre os regimes dinâmicos presentes nos espalhamentos atrativo e repulsivo, com ênfase no comportamento relacionado aos estados de vórtice e de poço vazio.

Os resultados para $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ são exibidos no gráfico 6.6.10.a. Neste conjunto de parâmetros de colisão, segundo as figuras 5.4.2 e 5.4.3, os pontos fixos de poço vazio e de vórtice são estáveis. Como previsto, é pequena a região do espectro que exibe fidelidade não nula associada aos estados coerentes $|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle$ e $|N; w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}} = w_2^*\rangle$, mas os valores atingidos por $\mathcal{F}$ são relativamente altos, se comparados aos resultados pertinentes aos pontos de equilíbrio instável.

Contudo, a fidelidade alcança somente valores inferiores a $\frac{1}{2}$ para os estados coerentes representantes das dinâmicas de poço vazio e de vórtice, ainda abaixo da expectativa para configurações associadas a pontos fixos estáveis. Então, sugerimos que os estados estacionários mais fiéis representem superposições aproximadas dos estados coerentes isoenergéticos relacionados a cada um dos dois regimes dinâmicos considerados, suposição ratificada pelos gráficos 6.6.11 e 6.6.12.

Primeiramente, definimos a superposição simétrica dos estados coerentes centrados nos estados clássicos de vórtice:

$$|V_S\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|N; w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}}, w_2 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}\rangle + |N; w_1 = e^{-i\frac{2\pi}{3}}, w_2 = e^{i\frac{2\pi}{3}}\rangle \right). \quad (6.6.5)$$

As representações de $|V_S\rangle$ nos espaços populacional e configuracional são mostradas nas figuras 6.6.11.a e 6.6.11.d, respectivamente. A distribuição Q_J manifesta a tendência de ocupação igualitária entre os três modos, exibindo um máximo bem localizado em $J_1 = J_2 = 10$. No entanto, este comportamento não é diferente do exibido pela Husimi populacional de apenas um dos estados $|N; w_1 = e^{\pm i\frac{2\pi}{3}}, w_2 = e^{\mp i\frac{2\pi}{3}}\rangle$. A função semiclassical de fase nos permite distinguir o estado $|V_S\rangle$ de um estado de vórtice isolado, pois exibe dois máximos simétricos nas coordenadas angulares $(\phi_1, \phi_2) = (\pm\frac{2\pi}{3}, \mp\frac{2\pi}{3})$.

Para parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$, a fidelidade máxima no espectro em relação à superposição simétrica de vórtice é $|\langle E_{496} | V_S \rangle|^2 \cong 0,836$, valor que confirma nossa hipótese acerca da forma superposta que os estados de vórtice se apresentam entre os estados $|E_m\rangle$. As representações Q_J e

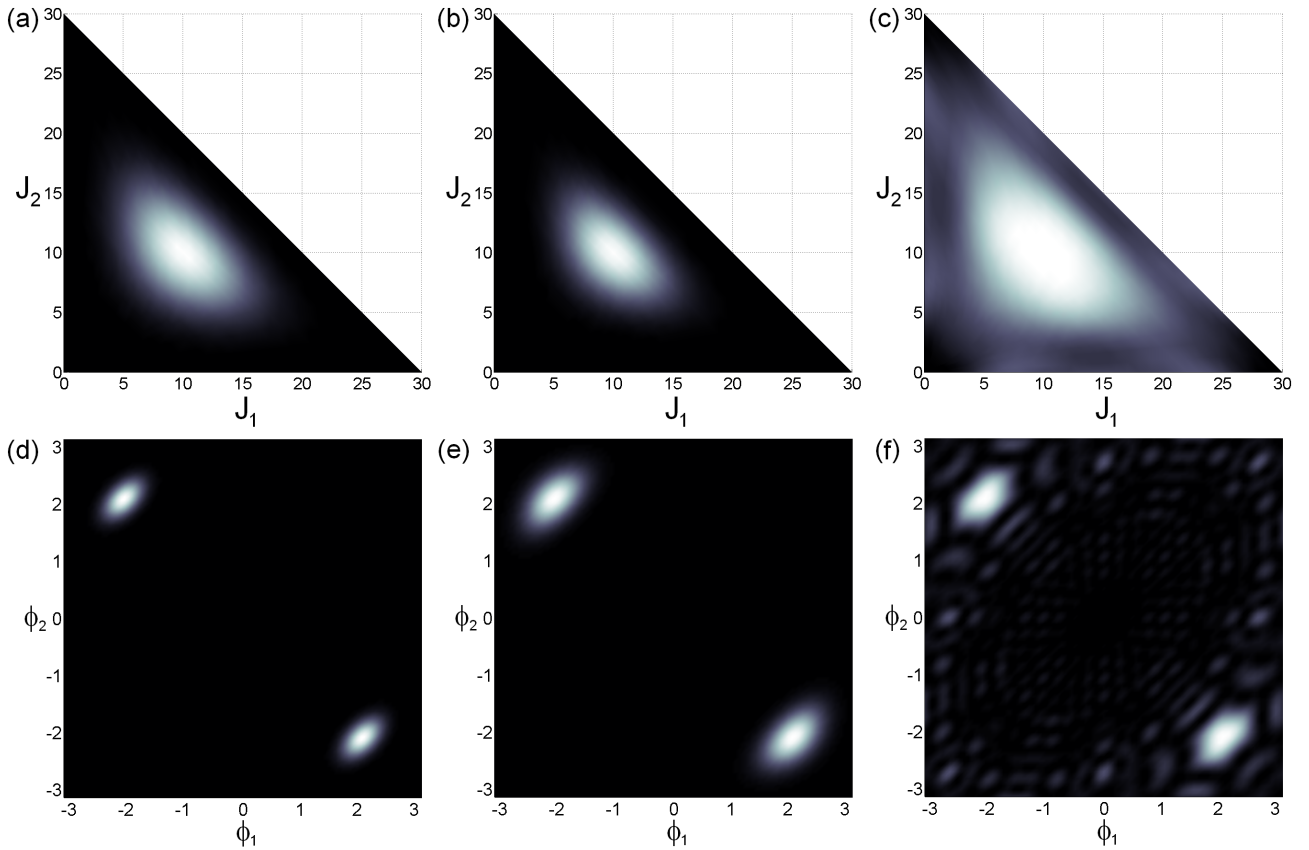


Figura 6.6.11: Comparação das representações no espaço de fase entre a superposição simétrica dos estados de vórtice e seus estados associados de máxima fidelidade. Nos gráficos (a) e (d) apresentamos, nesta ordem, a função Q populacional e a função semiclassical de fase do estado $|V_S\rangle$. Em (b) e (e) ((c) e (f)), o estado estacionário de máxima fidelidade a $|V_S\rangle$, com $\mathcal{F} \cong 0,836$ ($\mathcal{F} \cong 0,345$), é também representado nos espaços de população e fase para os parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$).

Φ de $|E_{496}\rangle$ são expostas nos gráficos 6.6.11.b e 6.6.11.e, nesta ordem. Observamos que a única diferença sensível entre as distribuições da superposição de estados coerentes, centrados em pontos fixos estáveis, e de seu estado estacionário mais fiel é uma compressão no espaço de ocupações médias, concomitante a uma expansão no espaço conjugado. O processo de compressão-expansão é novamente o único responsável pela perda de fidelidade entre os estados estacionários quânticos e seus correspondentes clássicos, quando estes são representados por estados coerentes centrados em pontos fixos estáveis.

Apesar de uma significativa decoerência, quantificada por $\mathcal{P}_{su(3)}(|E_{496}\rangle) \cong 0.24$, vemos que o estado estacionários $|E_{496}\rangle$ ainda conserva as características do regime dinâmico de vórtice, justificando o bom acordo qualitativo entre os resultados clássicos e quânticos da seção 6.5, para trajetórias regulares próximas a pontos de equilíbrio estável.

Agora, retornamos à questão da aparentemente baixa fidelidade encontrada no gráfico 6.6.10.a para o estado de poço vazio selecionado. Para este fim definimos a superposição antissimétrica de dois estados de poço vazio^{6.10}:

^{6.10}Devemos lembrar que, devido à simetria de rotação do potencial de aprisionamento, devem existir três estados de poço vazio equivalentes. Contudo, utilizando a parametrização complexa, temos que a condição $N - J_1 - J_2 = 0$ corresponde a $w_1, w_2 \rightarrow \pm\infty$, dificultando o tratamento de estados com ocupação média nula no terceiro modo local.

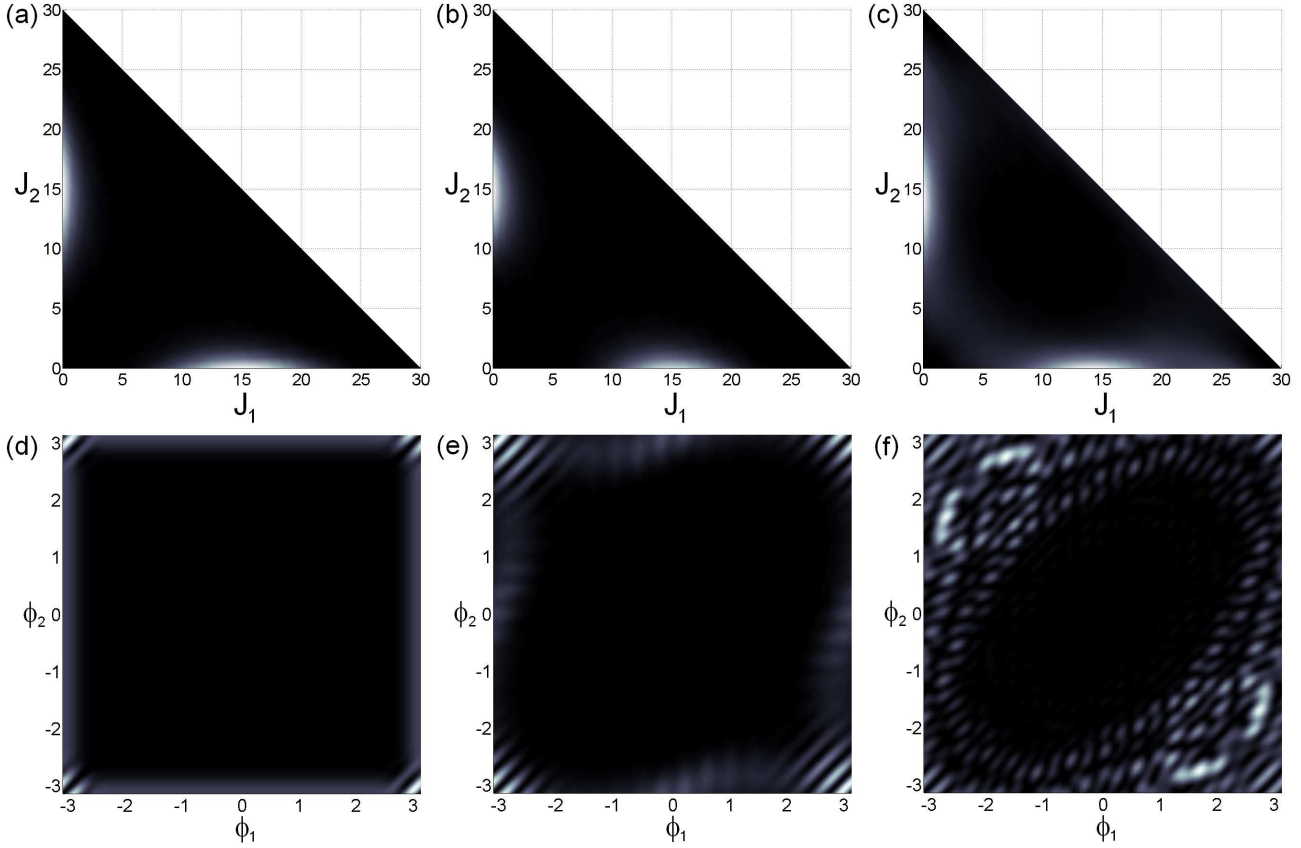


Figura 6.6.12: Comparação das representações no espaço de fase entre a superposição antissimétrica dos estados de poço vazio e seus estados associados mais fiéis. Nos gráficos (a) e (d) exibimos, respectivamente, a distribuição Husimi populacional e a função semiclassica de fase do estado $|PV_{AS}\rangle$. Em (b) e (e) ((c) e (f)), o estado estacionário mais fiel a $|PV_{AS}\rangle$, com $\mathcal{F} \cong 0,669$ ($\mathcal{F} \cong 0,248$), é também representado nos espaços de população e de fase, para os parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$ ($\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$).

$$|PV_{AS}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle - |N; w_1 = 0, w_2 = -1\rangle) \quad (6.6.6)$$

Os gráficos 6.6.12.a e 6.6.12.d mostram as funções Q_J e Φ do estado $|PV_{AS}\rangle$, respectivamente. Como esperado, a representação populacional apresenta dois máximos localizados em $(J_1, J_2) = (0, 15)$ e $(J_1, J_2) = (15, 0)$, relativos às condições de poço vazio nas quais estão desocupados o primeiro e segundo modos, nesta ordem. Já a função semiclassica de fase exibe a figura de interferência entre as distribuições de $|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle$ e $|N; w_1 = 0, w_2 = -1\rangle$, que se concentram nas retas $\phi_1 = \pi$ ou $\phi_2 = \pi$, de acordo com a indeterminação do ângulo restante. Devido à interferência, observamos que os valores mais elevados de Φ estão próximos a $\phi_1 = \phi_2 = \pi$, mas esta função não apresenta um único máximo nesta região, diferenciando sua distribuição de outros estados cuja representação é centrada nas mesmas coordenadas do espaço configuracional.

O estado $|E_{411}\rangle$ apresenta fidelidade máxima em relação a $|PV_{AS}\rangle$ e $|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle$, considerando todos estados estacionários obtidos com os parâmetros de colisão $\chi = 5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Como esperado, os estados equivalentes superpostos apresentam $|\langle E_{411} | PV_{AS} \rangle|^2 \cong 0,699$, valor adequado ao máximo de $\mathcal{F}$ no espectro para os estados coerentes referentes a pontos fixos estáveis da dinâmica

clássica. Portanto, o resultado aparentemente baixo $|\langle E_{411}|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle|^2 \cong 0.306$ revela a existência de níveis de energia praticamente degenerados, com alta fidelidade associada às superposições dos estados equivalentes de poço vazio.

As representações de $|E_{411}\rangle$ nos subespaços populacional e configuracional são apresentadas nas figuras 6.6.12.b e 6.6.12.d, nesta ordem. Como já poderíamos prever, a função $Q_J(\Phi)$ do estado estacionário representa apenas uma compressão (expansão) da representação de $|PV_{AS}\rangle$ no mesmo subespaço. Logo, o regime dinâmico de poço vazio está corretamente presente entre os níveis quânticos de energia, posto que o ponto de equilíbrio associado é estável.

Devido à presença de termos não lineares no Hamiltoniano, os estados estacionários relacionados aos regimes dinâmicos regulares do modelo semiclássico são novamente encontrados como formas comprimidas dos estados coerentes centrados em pontos fixos estáveis. Portanto, apesar da alta fidelidade em relação a $|PV_{AS}\rangle$, o estado $|E_{411}\rangle$ exibe coerência relativamente baixa, mensurada por $\mathcal{P}_{su(3)}(|E_{411}\rangle) \cong 0.400$. Este fato explica grande parte do desacordo quantitativo entre os resultados quânticos e semiclássicos.

A figura 6.6.10.b exibe a fidelidade no espectro para o espalhamento repulsivo, com taxas de colisão $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Neste conjunto de parâmetros, segundo os diagramas de estabilidade dos gráficos 5.4.2 e 5.4.3, os pontos fixos de vórtice e poço vazio são instáveis. Portanto, em relação a $|N; w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}} = w_2^*\rangle$ e $|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle$, obtemos valores máximos de $\mathcal{F}$ bastante inferiores aos encontrados na figura 6.6.10.a, onde estes estados coerentes estão associados a pontos de equilíbrio estável.

Entretanto, o número de estados no espectro que exibe fidelidade não nula pertinente aos estados de vórtice e poço vazio é bem superior ao painel do caso de colisões atrativas. Este fenômeno sugere novamente que grande parte dos níveis de energia estão associados à dinâmica caótica presente no modelo análogo clássico, pois os pontos de equilíbrio relevantes estão inseridos em meio às regiões de caos em M . Como vimos, a dinâmica quântica não linear tende a “espalhar” as representações dos estados sobre espaço de fase, de modo a preencher as regiões tomadas por órbitas caóticas, incluindo o local onde estão centrados $|N; w_1 = e^{i\frac{2\pi}{3}} = w_2^*\rangle$ e $|N; w_1 = -1, w_2 = 0\rangle$.

Para confirmar nossas expectativas, nas figuras 6.6.11.c e 6.6.11.f mostramos respectivamente as representações populacional e angular do estado estacionário mais fiel a $|V_S\rangle$, considerando $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. Observamos que a distribuição de ocupações médias está bastante delocalizada, justificando a forte decoerência no estado $|E_{268}\rangle$, expressa pela quantidade $\mathcal{P}_{su(3)}(|E_{268}\rangle) \cong 0,066$. Como esperado, a pureza generalizada do estado mais fiel associado aos pontos fixos instáveis é bem inferior ao valor de $\mathcal{P}_{su(3)}$ encontrado para os pontos de equilíbrio estável, sugerindo a presença de dinâmica caótica, de acordo com nossas observações das seções anteriores. O máximo de fidelidade alcançada $|\langle E_{268}|V_S\rangle|^2 \cong 0,345$ também é pequeno, quando comparado ao resultado do regime regular.

A função semiclássica de fase exibe os dois máximos pronunciados em $(\phi_1, \phi_2) = (\pm\frac{2\pi}{3}, \mp\frac{2\pi}{3})$, justificando a máxima fidelidade em relação a $|V_S\rangle$, mas também apresenta outras regiões não nulas no espaço configuracional, indicando a decoerência no auto-estado de energia.

Note que $|E_{268}\rangle$ não representa uma superposição de estados comprimidos, pois as representações nos dois subespaços são mais delocalizadas que as distribuições referentes a $|V_S\rangle$. Logo, o processo de compressão-expansão não é o único responsável pela decoerência neste estado estacionário, que deve ser associada principalmente à dinâmica caótica do modelo.

Análise semelhante pode ser feita para os gráficos 6.6.12.c e 6.6.12.f, onde mostramos as representações em M do estado $|E_{402}\rangle$, que exibe maior fidelidade em relação a $|PV_{AS}\rangle$ entre os auto-estados de energia obtidos com $\chi = -5$ e $\mu = \frac{\chi}{100}$. A função Q_J apresenta apenas um significativo alargamento quando comparada à superposição de estados coerentes, justificando o valor máximo $|\langle E_{402}|PV_{AS}\rangle|^2 \cong 0,248$ dentro do espectro. Contudo, este resultado é bastante inferior ao encontrado

no espalhamento atrativo, confirmando nossa previsão referente ao comportamento de $\mathcal{F}$ nos estados coerentes centrados em pontos fixos instáveis.

O reduzido valor da fidelidade entre $|E_{402}\rangle$ e $|PV_{AS}\rangle$ pode ser explicado pela elevada decoerência do estado estacionário, que é evidente na grande delocalização, quantificada por $\mathcal{P}_{su(3)}(|E_{402}\rangle) \cong 0,134$, da função Φ , a qual não exibe somente a figura de interferência esperada.

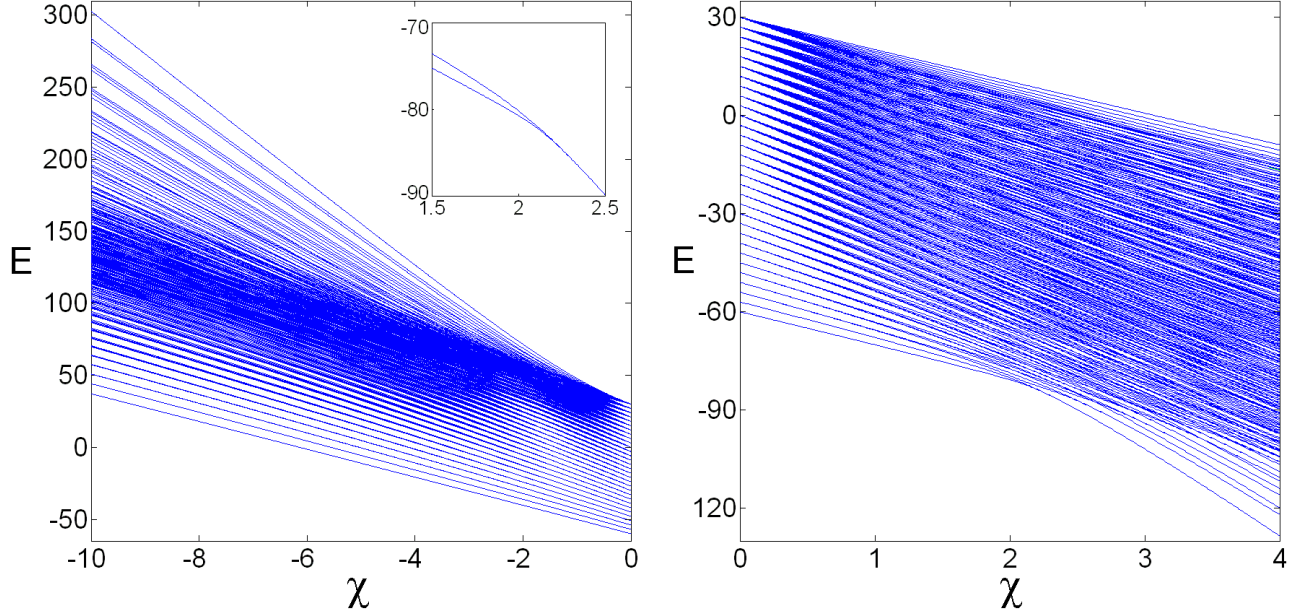


Figura 6.6.13: Autovalores de $\hat{H}$ em função do parâmetro de autocolisão χ , considerando $N = 30$, $\Omega = -1$ e desprezando os efeitos das colisões cruzadas. À esquerda mostramos os resultados para $\chi < 0$. Em detalhe vemos a região para $\chi > 0$ onde os dois mais baixos níveis de energia se aproximam, notando que o primeiro nível excitado é duplamente degenerado. À direita exibimos o espectro para $\chi > 0$. O zero de energia foi ajustado de forma a coincidir com o zero de $\mathcal{H}(\vec{w}, \vec{w}^*)$, possibilitando a comparação com a figura 5.3.6.

Por fim, vamos analisar o comportamento das auto-energias E_m em função da taxa de autocolisão χ , desconsiderando os efeitos oriundos das colisões cruzadas. Entretanto, para uma comparação correta entre os valores de $\mathcal{H}(\vec{w}^*, \vec{w})$ calculados nos pontos fixos do modelo e os autovalores de $\hat{H}$, devemos corrigir o erro introduzido no “zero” de energia quando descartamos os termos constantes não relevantes à dinâmica.

Na obtenção da Hamiltoniana (5.1.7) desprezamos os termos dependentes apenas de N e outros parâmetros, de modo que $\mathcal{H}$ não é simplesmente a média do operador $\hat{H}$ mostrado na equação (3.2.20). Recoletando as constantes, obtemos a seguinte identidade, útil apenas na comparação dos espectros de energia:

$$\mathcal{H}(\vec{w}^*, \vec{w}) = \langle N; \vec{w} | \left[\hat{H} + \chi \frac{\Omega N}{(N-1)} \left(\frac{N}{3} - 1 \right) \right] | N; \vec{w} \rangle. \quad (6.6.7)$$

O gráfico 6.6.13 mostra todos valores de E_m em função de χ , fixando os parâmetros $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\mu = 0$. As auto-energias foram obtidas pela diagonalização exata do Hamiltoniano (3.2.20), mas também “ajustamos” estes autovalores utilizando a equação (6.6.7), com o objetivo de compará-los às curvas da figura 5.3.6.

Primeiramente, observamos que as curvas para as energias máximas e mínimas dos espectros clássico

e quântico se sobrepõem com boa precisão. Os maiores desvios são encontrados na energia fundamental para espalhamento repulsivo e no máximo de energia para colisões atrativas. Também notamos um erro significativo entre os valores de energia fundamental na região próxima ao cruzamento das curvas referentes aos pontos fixos 1^+ e 4^+ . Entretanto, para χ distante do valor crítico χ_c , ambas as curvas exibem bom acordo com os resultados quânticos, considerando apenas as partes onde cada uma representa o mínimo global de energia.

É interessante observar que os pontos de equilíbrio instável possuem curvas de energia localizadas nas regiões correspondentes às maiores densidades de auto-estados na figura 6.6.13. Nos locais mais densamente preenchidos pelas curvas dos E_m , encontramos maior número de **cruzamentos evitados** entre os níveis.

Outro cruzamento evitado de níveis relevante é mostrado no *inset* da figura 6.6.13, onde vemos apenas a energia fundamental e o primeiro nível excitado **duplamente degenerado**. Para valores da taxa de autocolisão próximos a $\chi_c = 2$, vemos uma rápida aproximação entre estas duas curvas, que logo após passam a apresentar degenerescência quase completa.

Portanto, encontramos um **cruzamento evitado no nível fundamental** (CENF) para N finito, que ocorre próximo a χ_c , da mesma forma que vimos acontecer anteriormente a diminuição brusca da pureza generalizada de $|\psi_0\rangle$. Então, o comportamento de $\mathcal{P}_{su(3)}(|\psi_0\rangle)$ acompanha a aproximação dos três estados de energia mais baixa, sugerindo que o CENF também seja uma “sinalização” da transição de fase quântica para número finito de partículas.

Já mostramos que a curva de energia mínima na figura 5.3.6 é exata no limite macroscópico. Logo, quando $N \rightarrow \infty$, o CENF deve convergir ao **cruzamento do nível fundamental** (CNF), responsável pela transição de fase quântica. O CNF é representado pela troca de mínimo global de $\mathcal{H}$ em χ_c , ocasião em que o ponto fixo 1^+ cede seu lugar aos três pontos equivalentes da classe 4^+ . Portanto, a quase degenerescência dos três estados menos energéticos referentes ao CENF não é uma coincidência, mas uma tendência concretizada no limite macroscópico, onde o nível fundamental transita de não degenerado a triplamente degenerado.

Inspirados pela aparente simultaneidade entre a perda de pureza do estado fundamental e o CENF, ambos em função de χ , procuramos mais sinais na transição de fase na “velocidade” de aproximação dos dois níveis mais baixos de energia.

Exibimos no gráfico 6.6.14.a as curvas de $\Delta E(\chi)$, definido como a diferença de energia entre os dois níveis mais baixos do espectro, para vários valores de N e desconsiderando os efeitos das colisões cruzadas. Observe que ΔE cai mais rapidamente a zero à medida que N cresce, deslocando a região de maior inclinação para valores de χ próximos ao parâmetro crítico.

É evidente a mudança de comportamento da derivada de ΔE em relação a χ para N crescente. Em vista disto, apresentamos na figura 6.6.14.b os valores de $\frac{d\Delta E}{d\chi}$ para os mesmos números de partículas.

Note que o valor mínimo de $\frac{d\Delta E}{d\chi}$ cresce ao passo que aumentamos o número de bósons aprisionados. Os valores de χ que minimizam a derivada do espaçamento de níveis são bastante próximos a χ_c , simbolizado pela reta vertical tracejada no gráfico.

Tabela 6.6.1: Valores de χ para os mínimos de $\frac{d\Delta E}{d\chi}$. O erro numérico estimado em $\chi_c^{av}(N)$ é $\Delta\chi_c^{av} = 0,003$.

N	10	20	30	40	50
$\chi_c^{av}(N)$	1,981	2,017	2,017	2,011	2,011

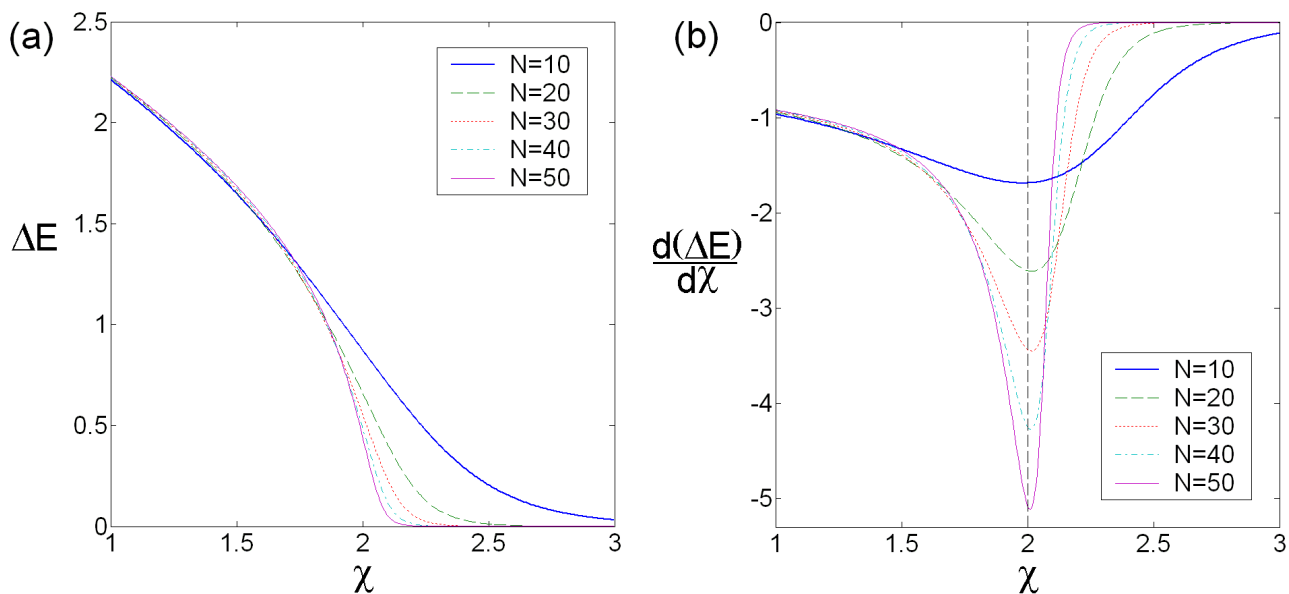


Figura 6.6.14: À esquerda exibimos a diferença entre os dois níveis de energia mais baixos do modelo em função do parâmetro de autocolisão, para vários valores de N . À direita mostramos o comportamento da derivada de ΔE em relação a χ . A linha vertical tracejada marca o valor crítico da transição de fase quântica.

Portanto, em alusão ao parâmetro $\chi_c^q(N)$ determinado para as curvas de $\frac{d\mathcal{P}_{su(3)}(|\psi_0\rangle)}{d\chi}$, definimos o valor da taxa de autocolisão que minimiza $\frac{d\Delta E}{d\chi}$ como $\chi_c^{av}(N)$, cujos resultados para as curvas do gráfico 6.6.14.b são mostrados na tabela 6.6.1.

Diferentemente de $\chi_c^q(N)$, não conseguimos determinar uma tendência de aproximação monotônica entre $\chi_c^{av}(N)$ e χ_c , para os valores considerados de N . Porém, mesmo para poucos bósons, obtemos resultados muito próximos ao parâmetro crítico exato de transição, considerando um erro numérico estimado de $\Delta\chi_c^{av} = 0,003$.

Embora o modelo de um condensado em poço duplo já possua ampla discussão na literatura teórica e experimental, gostaríamos de destacar algumas de nossas contribuições ao tema. Empregando os estados coerentes associados ao grupo $SU(2)$, apresentamos a dinâmica semiclássica do sistema sobre a esfera de Bloch, que representa a topologia correta do espaço de fase. Desta maneira, podemos distinguir as verdadeiras separatrizes entre os regimes dinâmicos populacionais, excluindo a possibilidade de equívoco proveniente da projeção das trajetórias em um plano. Também mostramos que as colisões cruzadas podem provocar a mudança do regime populacional entre as dinâmicas de oscilação Josephson e auto-aprisionamento macroscópico, devido à alteração significativa do tunelamento efetivo do sistema.

A pureza generalizada relacionada à álgebra $su(2)$ exibe comportamento distinto nos dois regimes populacionais considerados. A dinâmica de auto-aprisionamento preserva grande parte da coerência inicial do estado, justificando o bom acordo quantitativo entre os resultados semiclássicos e quânticos exatos. Entretanto, a dinâmica de oscilação Josephson produz maior incoerência no sistema, refletida em uma menor qualidade da aproximação análoga clássica para número finito de partículas. Portanto, mostramos que a pureza generalizada caracteriza os diferentes regimes dinâmicos, ao passo que avalia a qualidade da aproximação semiclássica.

A perda de pureza do estado é proporcional a sua delocalização sobre o espaço de fase, que observamos nas representações Husimi sobre a esfera de Bloch. A incoerência alcançada pelo sistema quântico também é crescente com “comprimento” da órbita semiclássica de mesmas condições iniciais.

Examinamos a maneira como a pureza generalizada pode “sinalizar” formalmente uma transição de fase quântica. Nesta ocasião, mostramos que o valor da taxa de autocolisão que minimiza a derivada da pureza do estado fundamental é consistente com uma lei de potência, indicando a convergência ao parâmetro crítico no limite macroscópico.

O modelo de um condensado em poço triplo foi examinado com maior detalhe, devido à grande variedade de regimes dinâmicos apresentados pelo sistema.

Primeiramente, por intermédio de uma extensão do formalismo de pseudo-spins de Schwinger, aproveitamos a estrutura algébrica natural do sistema, desenvolvendo uma série de resultados referentes ao grupo $SU(3)$. Entre os produtos mais interessantes estão os estados coerentes das representações totalmente simétricas de $SU(3)$, que possibilitam a aplicação do método análogo clássico em modelos de três modos bosônicos.

Os geradores de $SU(3)$ podem ser interpretados como observáveis básicos do condensado, relacionados às distribuições de posição, tunelamento, momento linear e angular. Então, o Hamiltoniano do modelo é reescrito em termos lineares e quadráticos dos geradores, considerando até a ordem mais baixa de correção proveniente das colisões cruzadas.

Novamente, mostramos que as interações entre bósons localizados em poços distintos são relevantes, mesmo sob a hipótese de fraco acoplamento entre os modos, pois a taxa efetiva de tunelamento pode ser significativamente alterada por um fator linear no número total de bósons aprisionados, introduzido pela presença das colisões cruzadas.

Aplicando a aproximação análoga clássica do modelo, examinamos a localização e estabilidade dos pontos de equilíbrio em função das taxas de colisão. A grande maioria dos pontos fixos é encontrada sob as condições de acordo ou oposição de fase entre dois modos locais distintos. Esta situação origina os chamados pontos fixos reais do sistema, presentes no subregime de condensados gêmeos e na dinâmica de poço vazio.

Mostramos que a dinâmica do modelo preserva as condições em que dois modos locais possuem mesma fase e ocupação média, reduzindo efetivamente o número de graus de liberdade do sistema. Neste caso, obtemos o subregime integrável de condensados gêmeos, responsável pelo reaparecimento de muitos conceitos já encontrados no modelo de dois poços. Demonstramos que podemos formar um conjunto completo de estados coerentes de $SU(2)$ tomando apenas um subconjunto dos estados coerentes de $SU(3)$ que satisfaz uma das condições de condensados gêmeos. Portanto, o subespaço de fase relacionado a este subregime é novamente a esfera de Bloch.

No subregime de condensados gêmeos encontramos as dinâmicas populacionais de oscilação Josephson e auto-aprisionamento macroscópico. Mais uma vez, o surgimento das órbitas auto-aprisionadas está associado a uma bifurcação dinâmica no espaço de fase, que também provoca a mudança de mínimo global da Hamiltoniana análoga clássica.

O comportamento da pureza generalizada de $su(3)$ é diferente nas duas dinâmicas consideradas no subregime de condensados gêmeos. A perda de coerência foi mais intensa para as trajetórias de oscilação Josephson, que ocupam maior região do espaço de fase. A correspondência entre o “volume” tomado pelas órbitas semiclássicas de uma dinâmica populacional e a “decoerência” do estado é evidenciada pelas representações Husimi sobre a esfera de Bloch, onde visualizamos o “alargamento” da distribuição causado pelos termos não lineares do Hamiltoniano.

Os estados de poço vazio estão relacionados a desocupações persistentes em um dos poços, enquanto os modos locais restantes dividem igualmente os bósons aprisionados, em oposição de fase. Utilizando seções de Poincaré, observamos a existência de órbitas regulares, referentes à dinâmica de poço vazio, somente quando os pontos fixos associados são estáveis. Caso contrário, os estados de poço vazio estão localizados em meio a trajetórias caóticas, que representam mais uma possibilidade na dinâmica populacional do modelo.

Cálculos quânticos exatos com mesmas condições iniciais de órbitas caóticas apresentam grande perda da pureza generalizada do condensado, diferentemente dos resultados referentes às trajetórias regulares. Então, como esperado, a aproximação análoga clássica apresenta menor acordo quantitativo na presença de caos.

Os pontos fixos reais estão associados aos regimes populacionais irrotacionais, nos quais o momento angular médio do condensado no eixo de simetria da armadilha apenas oscila em torno de zero. Os estados de vórtice representam a única classe de pontos de equilíbrio relativa às configurações de rotação do sistema.

No contexto do análogo clássico, podemos encontrar trajetórias regulares com momento angular permanente, nas proximidades dos estados de vórtice estáveis. Apenas alterando os valores das taxas de

colisão, podemos tornar instáveis os pontos fixos de vórtice, que passam a residir em regiões caóticas do espaço de fase. Novamente, empregamos a pureza generalizada para quantificar a validade da aproximação semiclássica, que confirma seu comportamento distinto entre órbitas regulares e caóticas.

Examinando as representações do estado sobre os subespaços populacional e configuracional, confirmamos a relação entre perda de coerência e caos. Estados coerentes centrados inicialmente sobre trajetórias caóticas apresentam uma dispersão irreversível de suas distribuições sobre o espaço de fase. Os estados associados às órbitas regulares apresentam apenas um processo de compressão-expansão nos dois subespaços conjugados.

Também analisamos a transição de fase quântica presente no modelo para interações bosônicas atrativas, relacionada a uma alteração dinâmica do estado fundamental entre o auto-aprisionamento em modos solitários e o regime de oscilação efetiva. A aproximação análoga clássica coincide com os resultados quânticos no limite macroscópico, desta maneira obtemos exatamente a energia do estado fundamental no limite clássico, apenas minimizando a Hamiltoniana semiclássica por partícula, que independe do número total de bósons aprisionados.

Então, mostramos que a transição de fase quântica corresponde a uma descontinuidade da derivada da energia do estado fundamental, simbolizada pela troca de mínimo global na Hamiltoniana clássica. No limite macroscópico, o nível de energia fundamental após a transição é triplamente degenerado, com auto-espaço gerado por três estados coerentes associados à dinâmica de auto-aprisionamento.

Analisamos novamente o comportamento de escala da pureza do estado fundamental em função da taxa de autocolisão. À medida que o número total de partículas condensadas cresce, o valor do parâmetro de autocolisão que minimiza a derivada da pureza aproxima-se do valor crítico de transição, obedecendo a uma lei de potência que indica a convergência destas duas grandezas no limite clássico-macroscópico.

Considerando um número finito de partículas, temos que a mudança de regime dinâmico do estado fundamental não é abrupta, mas acontece suavemente, acompanhando o cruzamento evitado entre o nível fundamental e o primeiro excitado, este duplamente degenerado.

As representações do estado fundamental no espaço de fase também “sinalizam” esta mudança dinâmica. A representação Q projetada no espaço populacional manifesta uma “trifurcação” da distribuição, refletindo o aparecimento da dinâmica de auto-aprisionamento no sistema. A função semiclássica de fase acompanha este comportamento, pois passa a exibir uma estrutura de interferência entre os estados auto-aprisionados.

No caso de interações repulsivas também ocorre a supressão do tunelamento entre os poços no estado fundamental, para intensidade crescente das autocolisões. Entretanto, este fenômeno é bem mais “lento”, comparado ao espalhamento atrativo, e não apresenta relação com a dinâmica de auto-aprisionamento.

Por fim, estudamos a presença dos diferentes regimes dinâmicos populacionais entre os estados estacionários do modelo. Neste intuito, usamos medidas de fidelidade em relação aos estados coerentes centrados nos pontos de equilíbrio do sistema. Como esperado, os pontos fixos estáveis apresentam maiores valores de fidelidade máxima no espectro, enquanto os pontos fixos instáveis distribuem sua fidelidade entre um maior número de auto-estados de energia.

No intuito de tornar este trabalho mais auto-suficiente, adicionamos ao corpo principal do trabalho esta seqüência de apêndices. Muitas das seções aqui apresentadas são revisões de tópicos relevantes ao entendimento completo do modelo e das ferramentas matemáticas utilizadas. Apesar das inúmeras referências ao conteúdo das seguintes seções, a leitura destes textos complementares não é essencial à compreensão dos resultados obtidos nos capítulos anteriores.

Na seção 8.1, revisamos vários conceitos relacionados à teoria quântica de muitas partículas, cujos resultados são amplamente utilizados na construção e interpretação de nosso modelo. Também abordamos vários temas da teoria de grupos e suas representações, de modo a estender o formalismo de pseudo-spins de Schwinger a $su(3)$.

Os resultados da seção 8.2 são uma compilação das idéias de emaranhamento generalizado [Kly], que resultam na definição da pureza generalizada [SOB⁺04, BKO⁺03, BKO⁺04], medida de coerência bastante utilizada no estudo da dinâmica do modelo e suas transições. Também mostramos que os estados coerentes mais próximos aos clássicos são os estados de mínima incerteza associada à álgebra $su(n)$ [DF77, Del77].

Os conceitos de grupo dinâmico, simetria dinâmica, integrabilidade quântica e caos quântico são introduzidos na seção 8.3. Utilizando o formalismo do método análogo clássico, fundamentado nos estados coerentes generalizados, derivamos os correspondentes quânticos de várias propriedades dinâmicas de um sistema clássico, incluindo uma definição consistente de graus de liberdade quânticos [ZFYW89, ZFY90].

Toda seção 8.4 é dedicada a mostrar que os parênteses de Poisson obtidos do PVDT, resultado detalhado na seção 2.2, coincidem com a estrutura simplética definida naturalmente sobre as órbitas adjuntas de $\mathfrak{L}_G$ [SK81]. Também demonstramos que os parênteses de Poisson reproduzem as relações de comutação da álgebra geradora do grupo dinâmico do sistema. Na subseção 8.4.1 encontramos as órbitas adjuntas de $su(3)$, a álgebra de interesse no modelo de poço triplo.

Uma revisão sobre o Pseudopotencial, que representa uma boa aproximação para a interação bosônica aos pares no condensado, é encontrada na seção 8.5, onde também discutimos algumas condições de validade de nosso modelo [Hua28, PW98].

8.1 Fundamentação

O modelo do condensado em poço triplo está fundamentado principalmente na teoria quântica de muitas partículas [NO98, FW71, Mey01], na qual encontramos vários conceitos importantes como a segunda quantização, estados simetrizados e os operadores de criação e aniquilação bosônicos. Entretanto, muito de nossa interpretação do modelo é devida à teoria de grupos, suas álgebras e representações [Gil74, Ham62, Lip02, Hal03].

Esta seção contém uma revisão de vários tópicos relevantes ao entendimento do trabalho, que são abordados na construção e interpretação do modelo, assuntos presentes no capítulo 3.

Na subseção 8.1.1 introduzimos o princípio da simetrização de estados, que conduz a elaboração do espaço de Fock bosônico. Também demonstramos várias identidades úteis no tratamento de sistemas de muitas partículas, constituindo as ferramentas matemáticas usadas repetidamente no corpo principal do texto.

O conceito de simetrização tensorial é melhor explorado na subseção 8.1.2, onde revisamos o método de simetrização de Young. Contudo, o resultado mais importante mostrado é a invariância dos espaços com simetria definida por transformações lineares inversíveis, constituintes do grupo $GL(n)$.

Então, na subseção 8.1.3 provamos que os espaços de simetria definida continuam invariantes sob a ação de $SU(3)$ [LF88, Gas66, Sch68, MJB66, Swa63], o grupo das transformações unitárias e unimodulares em três dimensões. Finalmente, mostramos que as representações irredutíveis totalmente simétricas de $SU(3)$ agem sobre o espaço de Fock bosônico de três modos, como esperado do grupo dinâmico do sistema.

Reunindo os resultados anteriores da seção, estendemos o formalismo de pseudo-spins de Schwinger ao grupo $SU(3)$ na subseção 8.1.4. Desta maneira, associamos os operadores de criação e aniquilação bosônicos às transformações do grupo, produzindo uma ferramenta fundamental na interpretação do modelo e na aplicação da teoria de estados coerentes generalizados.

8.1.1 Espaço de Fock Bosônico

O espaço de Hilbert de um sistema de N partículas $\mathbb{H}_N$ é simplesmente o produto tensorial dos N espaços de Hilbert de cada partícula. Considerando que o espaço de Hilbert $\mathbb{H}$ de cada partícula, quando tomada independentemente, é igual ao das outras, podemos escrever:

$$\mathbb{H}_N = \underbrace{\mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \otimes \dots \otimes \mathbb{H}}_{N \text{ vezes}} \equiv \mathbb{H}^{\otimes N}. \quad (8.1.1)$$

Se $\{|\alpha\rangle\}$ é uma base ortonormal do espaço de Hilbert de partícula única $\mathbb{H}$, então uma base ortonormal de $\mathbb{H}_N$ pode ser construída pelo produto tensorial de N estados da base $\{|\alpha\rangle\}$:

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle; \quad (8.1.2)$$

onde α_i é o estado da i -ésima partícula. Utilizamos aqui a notação do ket do espaço produto com chaves para distinguir do estado de N partículas idênticas que introduziremos mais a frente. A relação de completude em $\mathbb{H}_N$ é dada por:

$$\sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \langle \alpha_1, \dots, \alpha_N| = \mathbf{1}. \quad (8.1.3)$$

Embora todos os estados em (8.1.2) sejam matematicamente possíveis, é um fato em última instância experimental que apenas os estados totalmente simétricos ou antissimétricos em relação à troca dos

estados de qualquer par de partículas são observados na natureza. É também um fato, demonstrado no contexto da mecânica quântica de campos sob as hipóteses de localidade, casualidade e invariância de Lorenz, que partículas que apresentam estados totalmente simétricos são aquelas de spin inteiro, chamadas de bósons, enquanto partículas de spin semi-inteiro possuem estados totalmente antissimétricos e são chamadas de férmions. Já que neste trabalho tratamos de condensados de Bose-Einstein, vamos nos concentrar nos espaços de estados totalmente simétricos, onde habitam os bósons. Partículas compostas de qualquer número de bósons ou número par de férmions se comportam como bósons para energias baixas comparadas a energia de ligação de suas partículas constituintes.

Definimos um estado totalmente simétrico sob permutação de partículas como:

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = |\alpha_{P_1}, \alpha_{P_2}, \dots, \alpha_{P_N}\rangle; \quad (8.1.4)$$

para toda permutação $\{P_1, P_2, \dots, P_N\}$ dos índices $\{1, 2, \dots, N\}$. Podemos obter os estados (8.1.4) dos estados (8.1.2), introduzindo o operador de simetrização S_B , definido por:

$$S_B|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \equiv \frac{1}{N!} \sum_P |\alpha_{P_1}, \alpha_{P_2}, \dots, \alpha_{P_N}\rangle; \quad (8.1.5)$$

onde a somatória indica soma sobre todas permutações $\{P_1, P_2, \dots, P_N\}$ de $\{1, 2, \dots, N\}$. Podemos mostrar que S_B é um projetor:

$$\begin{aligned} S_B^2|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle &= \left(\frac{1}{N!}\right)^2 \sum_{P, P'} |\alpha_{P'_1 P_1}, \alpha_{P'_2 P_2}, \dots, \alpha_{P'_N P_N}\rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_P \left(\frac{1}{N!} \sum_Q |\alpha_{Q_1}, \alpha_{Q_2}, \dots, \alpha_{Q_N}\rangle \right) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_P S_B|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= S_B|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle; \end{aligned} \quad (8.1.6)$$

onde $Q_i \equiv P'_i P_i$ é a composição destas duas permutações, que percorre todas possíveis permutações quando P' também percorre todas as permutações, mantendo P fixo.

Os estados obtidos de (8.1.5) já são totalmente simétricos por permutação de partículas, mas antes de usá-los para redefinir os estados de (8.1.4) vamos calcular sua normalização. Notando que S_B é Hermitiano, escrevemos:

$$\begin{aligned} \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | S_B^2 |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle &= \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N | S_B |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_P \langle \alpha_1 | \alpha_{P_1} \rangle \langle \alpha_2 | \alpha_{P_2} \rangle \dots \langle \alpha_N | \alpha_{P_N} \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \prod_{j=1}^d n_j!. \end{aligned} \quad (8.1.7)$$

Aqui n_j é o número de partículas que estão no j -ésimo estado da base ordenada $\{|\alpha\rangle\}$ dentro do produto $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$. Também supomos que o espaço $\mathbb{H}$ é d -dimensional.

Utilizando a normalização calculada, podemos então redefinir os estados simetrizados como:

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \equiv \sqrt{\frac{N!}{\prod_j n_j!}} S_B |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle. \quad (8.1.8)$$

Os estados de (8.1.8) formam uma base ortonormal para o espaço de Hilbert $\mathbb{B}_N$ de N bósons, que é a projeção de $\mathbb{H}_N$ por S_B :

$$\mathbb{B}_N = S_B \mathbb{H}_N. \quad (8.1.9)$$

Da mesma forma, podemos obter a identidade em $\mathbb{B}_N$ por projeção de (8.1.3), utilizando a normalização de (8.1.8):

$$\begin{aligned} S_B \mathbb{1} S_B &= \mathbb{1}_{\mathbb{B}_N} \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} S_B |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \langle \alpha_1, \dots, \alpha_N| S_B \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \frac{\prod_j n_j!}{N!} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \langle \alpha_1, \dots, \alpha_N|. \end{aligned} \quad (8.1.10)$$

Então, convém introduzirmos uma notação para os estados totalmente simétricos que elimina as somas redundantes em (8.1.10), sobre estados idênticos por uma permutação de partículas, segundo (8.1.4).

Se n_j é a população, ou número de partículas, no j -ésimo estado da base de partícula única do espaço $\mathbb{H}$ dentro de um estado $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$ de $\mathbb{B}_N$, podemos definir a seguinte notação, utilizando a simetria sob permutação de partículas:

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle &\equiv |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= |\alpha_{P_1}, \alpha_{P_2}, \dots, \alpha_{P_N}\rangle. \end{aligned} \quad (8.1.11)$$

Empregando (8.1.11), podemos eliminar as somas sobre estados idênticos em (8.1.10), notando que o número de vezes que cada estado aparece na soma é justamente o inverso do pré-fator $\frac{\prod_j n_j!}{N!}$:

$$\sum_{n_1 + \dots + n_d = N} |n_1, \dots, n_d\rangle \langle n_1, \dots, n_d| = \mathbb{1}_{\mathbb{B}_N}. \quad (8.1.10')$$

Note que, para os estados de $\mathbb{B}_N$, as populações devem obedecer à restrição:

$$\sum_{j=1}^d n_j = N; \quad \text{para } n_j \in \mathbb{N}, \text{ incluindo o zero.} \quad (8.1.12)$$

Um operador arbitrário O no espaço $\mathbb{H}_N$ deve ter seus elementos de matriz invariantes sob permutação de partículas, se estas forem indistinguíveis:

$$\{\alpha_1, \dots, \alpha_N | O | \alpha'_1, \dots, \alpha'_N\} = \{\alpha_{P_1}, \dots, \alpha_{P_N} | O | \alpha'_{P'_1}, \dots, \alpha'_{P'_N}\}. \quad (8.1.13)$$

A representação destes operadores no espaço $\mathbb{B}_N$ é obtida da representação na base canônica, formada pelos estados (8.1.2) de $\mathbb{H}_N$, pela aplicação do projetor S_B .

Um operador é chamado de **operador de um corpo** U se sua ação sobre o estado de N partículas $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$ é a soma da ação de U sobre cada partícula:

$$U|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle = \sum_{i=1}^N U_i|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle; \quad (8.1.14)$$

onde U_i é o operador que age apenas no espaço da i -ésima partícula.

Um exemplo de operador de um corpo é o operador de energia cinética de um sistema, já que a energia cinética do sistema completo é a soma das energias cinéticas de cada partícula.

Similarmente, um **operador de dois corpos** V é aquele cuja ação é a soma das ações sobre cada par distinto de partículas:

$$\begin{aligned} V|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_{ij}|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq N} V_{ij}|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle; \end{aligned} \quad (8.1.15)$$

na qual V_{ij} é o operador que age apenas nas partículas i e j . Note que usamos o argumento de (8.1.13) para fazer $V_{ij} = V_{ji}$ em (8.1.15).

Um **operador de n corpos** R , de maneira geral, é aquele cuja ação é a soma das operações sobre cada conjunto distinto de n partículas:

$$R|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle = \frac{1}{n!} \sum_{1 \leq i_1 \neq \dots \neq i_n \leq N} R_{i_1 \dots i_n}|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle. \quad (8.1.16)$$

Analogamente, $R_{i_1 i_2 \dots i_N}$ é o operador sobre as partículas $i_1, i_2, \dots, i_N$.

Finalmente vamos introduzir os operadores que geram todo o espaço de Hilbert de bósons idênticos, pela aplicação em um estado de referência, e formam uma base da álgebra de operadores neste espaço: os **operadores de criação e aniquilação bosônicos**.

Seja $|\beta\rangle \in \mathbb{H}$, definimos o operador de criação bosônico em $|\beta\rangle$ como:

$$\begin{aligned} a_\beta^\dagger |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &\equiv \sqrt{n_\beta + 1} |\beta, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle; \text{ ou equivalentemente} \\ a_\beta^\dagger |n_1, \dots, n_d\rangle &\equiv \sqrt{n_\beta + 1} |n_1, \dots, n_\beta + 1, \dots, n_d\rangle; \end{aligned} \quad (8.1.17)$$

onde n_β é a população do estado $|\beta\rangle$ em $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$; ou seja, **antes** da aplicação de $a_\beta^\dagger$.

Vemos em (8.1.17) que o resultado da aplicação de $a_\beta^\dagger$ em $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$ é criar mais uma partícula no estado de partícula única $|\beta\rangle$, ressimetrizando o estado normalizado de $N + 1$ partículas gerado.

Definimos agora o estado de vácuo $|0\rangle$, que representa um estado de zero partículas. Logo, temos naturalmente que:

$$a_\beta^\dagger |0\rangle = |\beta\rangle. \quad (8.1.18)$$

Notamos também que $a_\beta^\dagger$ não opera dentro de um espaço $\mathbb{B}_N$, mas de $\mathbb{B}_N$ para $\mathbb{B}_{N+1}$. Então, definimos o espaço de Fock bosônico como o espaço de estados para qualquer número de bósons idênticos; ou seja, a seguinte soma direta:

$$\mathbb{B} \equiv \mathbb{B}_0 \oplus \mathbb{B}_1 \oplus \mathbb{B}_2 \oplus \dots = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathbb{B}_N. \quad (8.1.19)$$

Aqui claramente $\mathbb{B}_0 = \{|0\rangle\}$ e $\mathbb{B}_1 = \mathbb{H}$. A relação de completeza no espaço de Fock pode ser escrita como:

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_d=0}^{\infty} |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_d| = \mathbb{1}. \quad (8.1.20)$$

As propriedades de simetria por permutação de partículas dos estados no espaço de Fock atribuem relações de comutação entre operadores de criação em diferentes estados de partícula única, também conhecidos como modos:

$$\begin{aligned} a_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma}^{\dagger} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= \sqrt{(n_{\gamma} + 1)(n_{\beta} + 1)} |\beta, \gamma, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= \sqrt{(n_{\gamma} + 1)(n_{\beta} + 1)} |\gamma, \beta, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= a_{\gamma}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle. \end{aligned} \quad (8.1.21)$$

Como um elemento arbitrário de $\mathbb{B}$ pode ser escrito como uma combinação linear de estados $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$, temos então que:

$$[a_{\beta}^{\dagger}, a_{\gamma}^{\dagger}] = 0. \quad (8.1.22)$$

Então, podemos escrever qualquer estado da base de $\mathbb{B}$, sem ambigüidades, como uma aplicação sucessiva de operadores de criação no estado de vácuo:

$$|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle = \frac{(a_1^{\dagger})^{n_1} (a_2^{\dagger})^{n_2} \dots (a_d^{\dagger})^{n_d}}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_d!}} |0\rangle; \quad (8.1.23)$$

para $a_i^{\dagger}$ o operador de criação no i -ésimo estado da base ortonormal ordenada $\{|\alpha\rangle\}$ de $\mathbb{H}$.

Agora procuramos a ação dos operadores adjuntos aos $a_i^{\dagger}$, os operadores de aniquilação a_i . Primeiramente, tomamos Hermitiano conjugado da relação (8.1.22), obtendo as relações de comutação entre os operadores de aniquilação em estados distintos:

$$[a_{\gamma}, a_{\beta}] = 0. \quad (8.1.24)$$

A ação de a_{β} pela direita segue da equação adjunta de (8.1.17). A ação de a_{β} pela esquerda deduzimos calculando seu elemento de matriz entre dois estados de $\mathbb{B}$:

$$\langle \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M | a_{\lambda} | \alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_N \rangle = \sqrt{n_{\lambda} + 1} \langle \lambda, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M | \alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_N \rangle. \quad (8.1.25)$$

Claramente o resultado é não nulo apenas no caso que $M = N - 1$. Logo, a_{λ} tem a ação de reduzir uma partícula do estado a sua direita. Em particular, o resultado é sempre nulo se o estado à direita é o vácuo, então:

$$a_{\lambda} |0\rangle = 0. \quad (8.1.26)$$

Agora, introduzindo uma identidade no espaço de Fock, obtemos:

$$\begin{aligned}
a_\lambda |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{M!} \sum_{\alpha'_1 \dots \alpha'_M} \left(\prod_j n'_j! \right) \sqrt{n'_\lambda + 1} \langle \lambda, \alpha'_1, \dots, \alpha'_M | \alpha_1, \dots, \alpha_N \rangle |\alpha'_1, \dots, \alpha'_M\rangle \\
&= \sum_{\alpha'_1 \dots \alpha'_M} \frac{\prod_j n'_j!}{(N-1)!} \sqrt{n'_\lambda + 1} \langle \lambda, \alpha'_1, \dots, \alpha'_{N-1} | \alpha_1, \dots, \alpha_N \rangle |\alpha'_1, \dots, \alpha'_{N-1}\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \frac{\delta_{\lambda \alpha_i}}{n_\lambda} \sqrt{n'_\lambda + 1} |\alpha_1, \dots, \alpha_{i-1}, \alpha_{i+1}, \dots, \alpha_N\rangle \\
&= \sqrt{n_\lambda} |n_1, \dots, n_\lambda - 1, \dots, n_d\rangle \\
&= a_\lambda |n_1, \dots, n_\lambda, \dots, n_d\rangle.
\end{aligned} \tag{8.1.27}$$

Em (8.1.27), usamos que a sobreposição $\langle \lambda, \alpha'_1, \dots, \alpha'_M | \alpha_1, \dots, \alpha_N \rangle$ é não nula somente se $n'_i = n_i$, para $i \neq \lambda$, e $n'_\lambda + 1 = n_\lambda$, onde os n_i (n'_i) são as populações de $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$ ($|\alpha'_1, \dots, \alpha'_M\rangle$). Neste caso, temos que $M = N - 1$, ao passo que o número de vezes que uma permutação de $\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ é igual a $\{\lambda, \alpha'_1, \dots, \alpha'_{N-1}\}$ é idêntico a $\frac{(N-1)!}{\prod_j n'_j!}$, se λ é igual a algum α_i . No entanto, λ é n_λ vezes igual a

α_i , portanto corrigimos a última somatória por $\frac{1}{n_\lambda}$. A última somatória entre as equações de (8.1.27) é não nula n_λ vezes, com todos os termos não nulos idênticos e contendo uma partícula a menos no estado λ .

Logo, a ação do operador a_λ se resume a retirar uma partícula no estado $|\lambda\rangle$ de $|n_1, \dots, n_d\rangle$, ressimetrizando o estado normalizado obtido, além de multiplicar o resultado por um fator $\sqrt{n_\lambda}$.

Para concluirmos a álgebra dos operadores de criação e aniquilação, devemos calcular os comutadores entre os $a_\beta^\dagger$ e os a_γ . Aplicando estes dois operadores sobre um estado arbitrário da base de $\mathbb{B}$, temos:

$$\begin{aligned}
a_\beta^\dagger a_\gamma |n_1, \dots, n_d\rangle &= \sqrt{n_\gamma} a_\beta^\dagger |n_1, \dots, n_\gamma - 1, \dots, n_d\rangle \\
&= (1 - \delta_{\beta\gamma}) \sqrt{n_\gamma(n_\beta + 1)} |n_1, \dots, n_\beta + 1, \dots, n_\gamma - 1, \dots, n_d\rangle \\
&\quad + \delta_{\beta\gamma} n_\gamma |n_1, \dots, n_d\rangle.
\end{aligned} \tag{8.1.28}$$

Ou aplicando os operadores na ordem inversa:

$$\begin{aligned}
a_\gamma a_\beta^\dagger |n_1, \dots, n_d\rangle &= \sqrt{n_\beta + 1} a_\gamma |n_1, \dots, n_\beta + 1, \dots, n_d\rangle \\
&= (1 - \delta_{\beta\gamma}) \sqrt{n_\gamma(n_\beta + 1)} |n_1, \dots, n_\beta + 1, \dots, n_\gamma - 1, \dots, n_d\rangle \\
&\quad + \delta_{\beta\gamma} (n_\gamma + 1) |n_1, \dots, n_d\rangle.
\end{aligned} \tag{8.1.29}$$

Subtraindo (8.1.28) de (8.1.29) e usando o fato que operamos sobre um estado arbitrário da base de $\mathbb{B}$, temos:

$$[a_\gamma, a_\beta^\dagger] = \delta_{\gamma\beta}. \quad (8.1.30)$$

Note de (8.1.28) que o estado $|n_1, \dots, n_d\rangle$ é auto-estado do operador $a_\beta^\dagger a_\beta$ com autovalor igual à população no estado $|\beta\rangle$. Então, definimos o operador de número de partículas no estado de partícula única $|\beta\rangle$ como:

$$\hat{n}_\beta \equiv a_\beta^\dagger a_\beta. \quad (8.1.31)$$

Em comparação com (8.1.12), o operador de número total de partículas no sistema é:

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{n}_i. \quad (8.1.32)$$

Podemos escrever os operadores de criação e aniquilação bosônicos em uma outra base $\{|\tilde{\alpha}\rangle\}$ de $\mathbb{H}$, mas em termos de nossos $a_\alpha^\dagger$ e a_α da base $\{|\alpha\rangle\}$. Se a transformação de base entre $\{|\tilde{\alpha}\rangle\}$ e $\{|\alpha\rangle\}$ é dada por:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{\alpha} \langle\alpha|\tilde{\alpha}\rangle |\alpha\rangle. \quad (8.1.33)$$

Então, por definição, temos para o operador de criação $a_\alpha^\dagger$ no estado $|\tilde{\alpha}\rangle$:

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger S_B |\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_N\rangle &= \sqrt{N+1} S_B |\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_N\rangle \\ &= \sqrt{N+1} \sum_{\alpha} \langle\alpha|\tilde{\alpha}\rangle S_B |\alpha, \tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_N\rangle \\ &= \sum_{\alpha} \langle\alpha|\tilde{\alpha}\rangle a_\alpha^\dagger S_B |\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_N\rangle; \end{aligned} \quad (8.1.34)$$

onde usamos que $a_\alpha^\dagger S_B |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle = \sqrt{N+1} S_B |\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$, como vemos facilmente de (8.1.8) e (8.1.17). Como $S_B |\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_N\rangle$ representa um estado arbitrário não normalizado da base de $\mathbb{B}$, obtemos a seguinte identidade:

$$a_\alpha^\dagger = \sum_{\tilde{\alpha}} \langle\alpha|\tilde{\alpha}\rangle a_{\tilde{\alpha}}^\dagger; \quad (8.1.35)$$

e sua identidade adjunta:

$$a_{\tilde{\alpha}} = \sum_{\alpha} \alpha \langle\tilde{\alpha}|\alpha\rangle a_\alpha. \quad (8.1.35')$$

Então, as relações de comutação entre os $a_\beta^\dagger$ e os a_γ ficam:

$$\begin{aligned} [a_{\tilde{\gamma}}, a_{\tilde{\beta}}^\dagger] &= \sum_{\gamma, \beta} \langle\beta|\tilde{\beta}\rangle \langle\tilde{\gamma}|\gamma\rangle [a_\gamma, a_\beta^\dagger] \\ &= \langle\tilde{\gamma}|\tilde{\beta}\rangle. \end{aligned} \quad (8.1.36)$$

Para uma base ortonormal $\{|\tilde{\alpha}\rangle\}$ recuperamos o resultado (8.1.30). Uma base de especial interesse de $\mathbb{H}$ é a base de coordenadas $\{|\vec{r}\rangle\}$, na qual os operadores de criação e aniquilação recebem o nome de

operadores de campo, com a notação própria $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$ e $\hat{\psi}(\vec{r})$, respectivamente. Usando (8.1.36), temos que a relação de comutação entre os operadores de campo é:

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')] = \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (8.1.37)$$

Por fim, vamos mostrar como representar os operadores de muitas partículas em termos de operadores de criação e aniquilação.

Supondo que a base $\{|\alpha\rangle\}$ de $\mathbb{H}$ diagonaliza o operador de um corpo U , temos de (8.1.14):

$$U|\alpha\rangle = U_\alpha|\alpha\rangle; \quad (8.1.38)$$

onde U_α é autovalor de U em $|\alpha\rangle$. Então claramente temos que:

$$\begin{aligned} U|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= \sum_{\alpha=1}^d U_\alpha n_\alpha |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^d U_\alpha \hat{n}_\alpha |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle. \end{aligned} \quad (8.1.39)$$

Como $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$ é um estado arbitrário da base de $\mathbb{B}$, temos:

$$U = \sum_{\alpha} U_\alpha \hat{n}_\alpha = \sum_{\alpha} \langle \alpha | U | \alpha \rangle a_\alpha^\dagger a_\alpha. \quad (8.1.40)$$

Fazendo a transformação para uma base arbitrária $\{|\beta\rangle\}$ de $\mathbb{H}$, utilizando (8.1.35), obtemos:

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\alpha, \beta, \beta'} U_\alpha \langle \alpha | \beta' \rangle \langle \beta | \alpha \rangle a_\beta^\dagger a_{\beta'} \\ &= \sum_{\beta, \beta'} \langle \beta | U \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha | \beta' \rangle a_\beta^\dagger a_{\beta'} \\ &= \sum_{\beta, \beta'} \langle \beta | U | \beta' \rangle a_\beta^\dagger a_{\beta'}. \end{aligned} \quad (8.1.41)$$

Para a base de coordenadas, a expressão (8.1.41) assume a forma:

$$U = \int d^3r d^3r' \langle \vec{r} | U | \vec{r}' \rangle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}'). \quad (8.1.41')$$

Note também que a expansão, dada por (8.1.35), dos operadores de campo nos operadores de aniquilação e criação da base $\{|\alpha\rangle\}$ é:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\vec{r}) a_{\alpha}^\dagger \quad \text{e} \quad \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r}) a_{\alpha}; \quad (8.1.42)$$

onde $\langle \vec{r} | \alpha \rangle = \psi_{\alpha}(\vec{r})$, a função de onda do estado $|\alpha\rangle$ no espaço de coordenadas.

Agora, supondo que a base gerada por estados do tipo $|\alpha, \alpha'\rangle$ de $\mathbb{H}_2$ diagonaliza o operador de dois corpos V , temos:

$$V|\alpha, \alpha'\rangle = V_{\alpha\alpha'}|\alpha, \alpha'\rangle. \quad (8.1.43)$$

Então, para um estado arbitrário da base de $\mathbb{B}$, obtido do produto tensorial de uma base privilegiada que diagonaliza V , obtemos usando (8.1.15):

$$V|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} V_{\alpha\alpha'} \hat{n}_\alpha (\hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'}) |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle; \quad (8.1.44)$$

onde $\hat{n}_\alpha (\hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'})$ é o operador que conta o número de pares de partículas nos estados $|\alpha\rangle$ e $|\alpha'\rangle$. No entanto, utilizando as relações de comutação:

$$\begin{aligned} \hat{n}_\alpha (\hat{n}_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'}) &= a_\alpha^\dagger a_\alpha a_{\alpha'}^\dagger a_{\alpha'} - \delta_{\alpha\alpha'} a_\alpha^\dagger a_\alpha \\ &= a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}^\dagger a_{\alpha'} a_\alpha. \end{aligned} \quad (8.1.45)$$

Desta forma, o operador de dois corpos pode reescrito como:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} \{\alpha, \alpha' | V | \alpha, \alpha'\} a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}^\dagger a_{\alpha'} a_\alpha. \quad (8.1.46)$$

Transformando este resultado para uma base arbitrária do espaço de duas partículas:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta', \gamma, \gamma'} V_{\alpha\alpha'} \langle \beta | \alpha \rangle \langle \gamma | \alpha' \rangle \langle \alpha | \beta' \rangle \langle \alpha' | \gamma' \rangle a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger a_{\gamma'} a_{\beta'} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta, \beta', \gamma, \gamma'} \{\beta, \gamma | V | \alpha, \alpha'\} \{\alpha, \alpha' | \beta', \gamma'\} a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger a_{\gamma'} a_{\beta'} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta, \beta', \gamma, \gamma'} \{\beta, \gamma | V | \beta', \gamma'\} a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger a_{\gamma'} a_{\beta'}. \end{aligned} \quad (8.1.47)$$

Na base de coordenadas, para uma interação local $\langle \vec{r}, \vec{r}' | V | \vec{r}'', \vec{r}''' \rangle = V(\vec{r} - \vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}'') \delta(\vec{r}' - \vec{r}''')$, temos:

$$V = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}'). \quad (8.1.48)$$

Generalizamos facilmente os resultados anteriores para um operador de n corpos:

$$R = \frac{1}{n!} \sum_{\lambda_1, \dots, \lambda_n} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \{\lambda_1, \dots, \lambda_n | R | \sigma_1, \dots, \sigma_n\} a_{\lambda_1}^\dagger \dots a_{\lambda_n}^\dagger a_{\sigma_n} \dots a_{\sigma_1}. \quad (8.1.49)$$

8.1.2 Simetrização de Tensores: Bases para $GL(n)$

Suponha um espaço vetorial n -dimensional de base ortonormal $\{|i\rangle\}$ ($i = 1, \dots, n$), que denotamos por $\mathbb{H}$. Agora, suponha também uma transformação linear inversível g sobre este espaço pertencente a $GL(n)$, o grupo das transformações lineares inversíveis em n dimensões. A ação de g sobre um vetor $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$ é dada por:

$$\langle i | \psi' \rangle = D_{ij}(g) \langle j | \psi \rangle; \quad (8.1.50)$$

onde já introduzimos a notação implícita de soma sobre índices repetidos. $\langle i | \psi \rangle$ é a componente de $|\psi\rangle$ no elemento $|i\rangle$ da base, enquanto $D_{ij}(g)$ é a representação padrão de $GL(n)$; ou seja, é a representação

na qual $GL(n)$ age sobre um espaço n dimensional na forma usual^{8.1}. Então, sob a ação de $GL(n)$, o vetor $|\psi\rangle$ se transforma da seguinte forma:

$$|\psi\rangle = \langle i|\psi\rangle|i\rangle \xrightarrow{g|\psi\rangle=|\psi'\rangle} |\psi'\rangle = D_{ij}(g)\langle j|\psi\rangle|i\rangle. \quad (8.1.51)$$

Assim, vemos que os elementos da base se transformam sob a ação de $GL(n)$ da seguinte maneira:

$$|j'\rangle = |i\rangle D_{ij}(g). \quad (8.1.52)$$

Se realizarmos o produto tensorial $\mathbb{H}^{\otimes 2} \equiv \mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$, temos que uma base natural para este espaço é dada pelo produto tensorial da base $\{|i\rangle\}$; ou seja, elementos do tipo $|i, j\rangle \equiv |i\rangle \otimes |j\rangle$, que segundo (8.1.52) devem se transformar sob a ação de $g \in GL(n)$ como:

$$|k', m'\rangle = |i, j\rangle D_{ik}(g) D_{jm}(g). \quad (8.1.53)$$

Generalizando, o produto tensorial $\mathbb{H}^{\otimes N}$ tem como base ortonormal $\{|i, j, \dots, k\rangle = |i\rangle \otimes |j\rangle \otimes \dots \otimes |k\rangle\}$, que transforma-se sob g de acordo com:

$$|j'_1, j'_2, \dots, j'_N\rangle = |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle D_{i_1 j'_1}(g) D_{i_2 j'_2}(g) \dots D_{i_N j'_N}(g). \quad (8.1.54)$$

Então, as transformações da representação padrão de $GL(n)$ no espaço n -dimensional $\mathbb{H}$ induzem transformações do grupo no espaço n^N -dimensional $\mathbb{H}^{\otimes N}$, cuja representação é dada pelo produto de N representações padrões, que denotamos como:

$$D_{(i)(j)}^N(g) \equiv D_{i_1 i_2 \dots i_N, j_1 j_2 \dots j_N}^N(g) \equiv D_{i_1 j_1}(g) D_{i_2 j_2}(g) \dots D_{i_N j_N}(g). \quad (8.1.55)$$

A representação D^N de $GL(n)$ age no espaço $\mathbb{H}^{\otimes N}$, cuja base denotamos por^{8.2}:

$$|(i)\rangle \equiv |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \underbrace{|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle}_{N \text{ estados}}. \quad (8.1.56)$$

No entanto, a representação D^N não é irredutível; ou seja, existem subespaços invariantes não triviais de $\mathbb{H}^{\otimes N}$ sob a aplicação de $D^N(g)$, para todo $g \in GL(n)$.

Por exemplo, no espaço $\mathbb{H}^{\otimes 2}$, estados simétricos ou antissimétricos por permutação de partículas transformam-se entre si sob a ação de $D^2(g)$:

$$\begin{aligned} (|i_1, i_2\rangle \pm |i_2, i_1\rangle) D_{(i)(j)}^2(g) &= (|i_1, i_2\rangle \pm |i_2, i_1\rangle) D_{i_1 j_1}(g) D_{i_2 j_2}(g) \\ &= |i_1, i_2\rangle D_{i_1 j_1}(g) D_{i_2 j_2}(g) \pm |i_2, i_1\rangle D_{i_1 j_1}(g) D_{i_2 j_2}(g) \\ &= |j'_1, j'_2\rangle \pm |j'_2, j'_1\rangle. \end{aligned} \quad (8.1.57)$$

Isto acontece porque as operações de permutação de índices de um estado comutam com a aplicação de $D^N(g)$. Definimos o operador de permutação de índices P por:

^{8.1}De certa forma, esta é a representação que define $GL(n)$.

^{8.2}Não empregamos nesta subseção a notação $|\cdot\rangle$, encontrada na subseção anterior para os estados não simetrizados de muitas partículas.

$$P|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = |i_{P_1}, i_{P_2}, \dots, i_{P_N}\rangle; \quad (8.1.58)$$

onde $\{P_1, P_2, \dots, P_N\}$ é uma permutação de $\{1, 2, \dots, N\}$. Temos então:

$$\begin{aligned} P(|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle D_{(i)(j)}^N(g)) &= P|j'_1, j'_2, \dots, j'_N\rangle \\ &= |j'_{P_1}, j'_{P_2}, \dots, j'_{P_N}\rangle \\ &= |i_{P_1}, i_{P_2}, \dots, i_{P_N}\rangle D_{P(i)P(j)}^N(g) \\ &= (P|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle) D_{(i)(j)}^N(g). \end{aligned} \quad (8.1.59)$$

Aqui utilizamos que a transformação $D_{(i)(j)}^N(g)$ é bissimétrica nos índices; ou seja, quando a mesma permutação é aplicada nos dois conjuntos de índices (i) e (j) o produto das N transformações não se altera:

$$\begin{aligned} D_{P(i)P(j)}^N &= D_{i_{P_1}j_{P_1}}(g) D_{i_{P_2}j_{P_2}}(g) \dots D_{i_{P_N}j_{P_N}}(g) \\ &= D_{i_1j_1}(g) D_{i_2j_2}(g) \dots D_{i_Nj_N}(g) \\ &= D_{(i)(j)}^N(g). \end{aligned} \quad (8.1.60)$$

Desta forma, vemos que o espaço $\mathbb{H}^{\otimes N}$ é redutível em espaços invariantes sob a ação do grupo $GL(n)$ e estes espaços são formados por estados de simetria definida sob permutação de índices.

Estados de simetria definida são obtidos aplicando-se os simetrizadores de Young Y aos estados de $\mathbb{H}^{\otimes N}$ da base $\{|i_1, \dots, i_N\rangle\}$. Uma determinada simetria é definida por um padrão de Young, o qual introduzimos agora.

Suponha que o estado $|i\rangle$, da base conveniente de $\mathbb{H}$, seja representado por uma “caixa” $\boxed{i}$, onde $i = 1, \dots, n$. Um estado da base de $\mathbb{H}^{\otimes 2}$ é então representado por duas caixas, mas agora podemos dispor estas caixas de duas formas distintas $\boxed{i}\boxed{j}$ e $\boxed{i \atop j}$, onde a primeira indica simetrização entre os índices colocados nas caixas e a segunda sugere antissimetrização. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \boxed{i}\boxed{j} &\propto |i, j\rangle + |j, i\rangle; \\ \boxed{i \atop i} &\propto |i, i\rangle; \\ \boxed{i \atop j} &\propto |i, j\rangle - |j, i\rangle. \end{aligned} \quad (8.1.61)$$

Em geral, um padrão de Young para o espaço $\mathbb{H}^{\otimes N}$ é um conjunto de N caixas dispostas em l linhas, com λ_i caixas por linha, de forma que simetrização é indicada entre os elementos de uma mesma linha e antissimetrização entre elementos colocados em uma mesma coluna. Na construção de um padrão de Young, algumas regras devem ser observadas, de maneira que não surjam ambigüidades ou padrões sem utilidade:

1. O número de caixas em uma linha não deve ser maior que na linha superior; ou seja, $\lambda_i \geq \lambda_{i+1}$.

2. As caixas nas diferentes linhas devem ser alinhadas à esquerda.
3. Se $N > n$, devemos ter $l \leq n$.

A regra 3 exclui a situação em que o número de índices (estados) é menor que o possível número de linhas. Então, ao preencheremos o padrão com índices, não somos obrigados a repetir pelo menos um índice em pelo menos uma coluna. Como os índices em uma mesma coluna implicam em antissimetrização, temos que os simetrizadores de Young gerados por este padrão são identicamente nulos, como resultado de antissimetrizar em índices repetidos.

O preenchimento de um padrão de Young com os n índices dos estados de $\mathbb{H}$ deve ser feito de forma regular; ou seja, a fim de evitar que preenchimentos diferentes de um mesmo padrão levem a simetrizadores de Young idênticos ou nulos, devemos seguir as seguintes regras de preenchimento regular:

4. Índices colocados em uma mesma linha devem **não decrescer** da esquerda para a direita, assim impedimos que, devido a simetrização de índices em uma linha, preenchimentos diferentes produzam simetrizadores idênticos.
5. Índices em uma mesma coluna devem **crescer** de cima para baixo, desta forma impedimos, além de que preenchimentos diferentes gerem antissimetrizadores equivalentes, que existam índices repetidos em uma mesma coluna, resultando em uma antissimetrização identicamente nula.

Um padrão de Young preenchido regularmente, segundo as regras (1-5), é chamado de tabela de Young e especifica unicamente um simetrizador de Young, que por sua vez realiza um estado de simetria definida de $\mathbb{H}^{\otimes N}$. Cada padrão de Young distinto especifica um subespaço invariante de simetria definida de $\mathbb{H}^{\otimes N}$, sob a ação de $GL(n)$.

O simetrizador de Young $Y = AS$ é construído de uma tabela de Young da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 A &= \prod_{i=1}^c A_i; \\
 A_i &= \sum_{\{P\}_{c_i}} \delta_P P;
 \end{aligned}
 \tag{8.1.62}$$

onde A é o antissimetrizador, que consiste no produto dos antissimetrizadores A_i de cada uma das c colunas de um padrão de Young. Os A_i são formados pela soma sobre todas permutações $\{P\}_{c_i}$ dos índices da i -ésima coluna, cada permutação multiplicada por sua paridade δ_P . A paridade de uma permutação é $+1$ se o número de transposições (permutações de dois elementos) necessárias para levar os m objetos da permutação $\{P_1, P_2, \dots, P_m\}$ em $\{1, 2, \dots, m\}$ é par, ao passo que a paridade é -1 se o número de transposições é ímpar. O outro constituinte de Y é:

$$\begin{aligned}
 S &= \prod_{j=1}^l S_j; \\
 S_j &= \sum_{\{P\}_{l_j}} P.
 \end{aligned}
 \tag{8.1.63}$$

S é o simetrizador, que é o produto dos simetrizadores S_j das l linhas da tabela de Young. S_j é a soma de todas as possíveis permutações dos índices da linha j .

Observando às regras (1-3), temos que um padrão de Young pode ser denotado por $\vec{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_l]$, onde λ_i é o número de caixas na i -ésima linha do padrão. Note que $\sum_{i=1}^l \lambda_i = N$, o número de produtos tensoriais do espaço $\mathbb{H}$. A partição $\vec{\lambda}$ especifica um subespaço invariante por $GL(n)$. Como os elementos $D_{ij}(g)$ da representação que define $GL(n)$ não possuem qualquer outra condição restritiva, o único processo de redução de $\mathbb{H}^{\otimes N}$ a espaços invariantes sob $GL(n)$ é a simetrização de índices. Portanto, $\vec{\lambda}$ especifica uma representação irredutível de $GL(n)$ e cada tabela de Young construída pelo preenchimento do padrão $\vec{\lambda}$ fornece um elemento da base do espaço que carrega esta representação irredutível. Aplicando o simetrizador Y , dado pelo preenchimento com os índices $\{i_1, i_2, \dots, i_N\}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) no padrão $\vec{\lambda}$, ao estado $|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle$, obtemos um estado de simetria definida da base do subespaço invariante de $\mathbb{H}^{\otimes N}$ associado a $\vec{\lambda}$.

Agora vamos exemplificar este método de obtenção dos estados da base para as representações irredutíveis de $GL(n)$, com $n = 2$ e $N = 3$. Os possíveis padrões de Young com três caixas, que respeitam as regras (1-3), são aqueles de partições $\vec{\lambda}_1 = [3]$ e $\vec{\lambda}_2 = [2, 1]$:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \quad \text{e} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} . \quad (8.1.64)$$

[3] [2, 1]

Por exemplo, podemos formar as seguintes tabelas de Young do padrão $\vec{\lambda}_1$, seguindo as regras de preenchimento (4-5):

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \text{e} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 2 & 2 & 2 \\ \hline \end{array}. \quad (8.1.65)$$

Ou seja, a representação irredutível de $GL(2)$, associada à partição $\vec{\lambda}_1$, age sobre um espaço quadridimensional, cuja base é dada por:

$$\begin{aligned} |\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\rangle &= Y_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}} |1, 1, 1\rangle = |1, 1, 1\rangle; \\ |\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline \end{array}\rangle &= Y_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline \end{array}} |1, 1, 2\rangle \\ &= \left[\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \right] |1, 1, 2\rangle \\ &= |1, 1, 2\rangle + |1, 2, 1\rangle + |2, 1, 1\rangle; \\ |\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 2 \\ \hline \end{array}\rangle &= Y_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 2 \\ \hline \end{array}} |1, 2, 2\rangle \\ &= \left[\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \right] |1, 2, 2\rangle \\ &= |1, 2, 2\rangle + |2, 1, 2\rangle + |2, 2, 1\rangle; \\ |\begin{array}{|c|c|c|} \hline 2 & 2 & 2 \\ \hline \end{array}\rangle &= Y_{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 2 & 2 & 2 \\ \hline \end{array}} |2, 2, 2\rangle = |2, 2, 2\rangle; \end{aligned} \quad (8.1.66)$$

onde utilizamos a notação $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & m \\ P_1 & P_2 & \dots & P_m \end{pmatrix}$ para operador de permutação, que indica na linha

inferior a permutação que deve ser feita no conjunto de objetos da linha superior. Assim, encontramos um método simples para escrevermos as bases associadas às representações irredutíveis de $GL(n)$, a partir da base canônica de $\mathbb{H}^{\otimes N}$, obtida do produto tensorial de uma base conveniente de $\mathbb{H}$.

8.1.3 Representações Totalmente Simétricas de $SU(3)$

Sabemos como obter as bases dos espaços invariantes que suportam as representações irredutíveis do grupo geral de transformações lineares em n dimensões, $GL(n)$. Agora, queremos saber se estas representações continuam irredutíveis se restringimos $GL(n)$ a um de seus subgrupos; ou seja, vamos ver se as bases encontradas para $GL(n)$ continuam a gerar espaços que não possuem subespaços invariantes não triviais, quando impomos novas restrições sobre as transformações lineares $D_{ij}(g)$.

Em outras palavras, queremos mostrar em especial que o único processo de redução de $\mathbb{H}^{\otimes N}$ a espaços invariantes continua sendo a simetrização de estados, quando vamos de $GL(3)$ para $SU(3)$, restringindo $D_{ij}(g)$ às transformações unitárias e de determinante um para $\mathbb{H}$ tridimensional.

Reduzir uma representação significa que, para uma certa base^{8.3}, as representações matriciais de todos os elementos do grupo assumem uma mesma forma de blocos, onde cada bloco age sobre um subespaço invariante sob a ação do grupo. Se os blocos não podem ser reduzidos em blocos menores para todos os elementos do grupo, por uma nova mudança de base, dizemos que estes blocos formam representações irredutíveis do grupo.

No caso de $GL(n)$ aplicado ao espaço $\mathbb{H}^{\otimes N}$, podemos reduzir a representação D^N a blocos irredutíveis, mudando sua base para a base de estados de simetria definida:

$$\left(\begin{array}{c} D^N(g) \end{array} \right) \xrightarrow{\text{Simetrização}} \left(\begin{array}{ccc} D_{\tilde{\lambda}_1}(g) & 0 & \cdots \\ 0 & D_{\tilde{\lambda}_2}(g) & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots \end{array} \right). \quad (8.1.67)$$

De (8.1.55), temos que os elementos de matriz de $D^N(g)$ são produtos de ordem N dos elementos da representação padrão $D_{ij}(g)$. Quando transformamos a base para obtermos a forma reduzida de (8.1.67), temos que os elementos de matriz das representações irredutíveis $D_{\tilde{\lambda}}(g)$ são combinações lineares dos $D_{(i)(j)}^N(g)$, logo são polinômios homogêneos nos elementos $D_{ij}(g)$ com todos os termos de ordem N .

Para um determinado subgrupo H de $GL(n)$, temos as representações induzidas $D_{\tilde{\lambda}}(h)$, onde $h \in H$. Se a representação $D_{\tilde{\lambda}}(h)$ é redutível neste subgrupo, então uma mudança de base apropriada pode trazer $D_{\tilde{\lambda}}(h)$ a uma forma de blocos para todo elemento $h \in H$. No entanto, nenhuma mudança de base pode trazer $D_{\tilde{\lambda}}(g)$ à forma de blocos para todo $g \in GL(n)$, pois sabemos que esta representação é irredutível em $GL(n)$.

Sob a nova mudança de base, que leva $D_{\tilde{\lambda}}(h)$ à forma reduzida, temos que os elementos de matriz continuam a ser polinômios homogêneos de ordem N nos $D_{ij}(h)$. Então, a representação é redutível em H se um determinado conjunto de polinômios de ordem N homogêneos $\{\mathcal{P}_\alpha(D_{ij}(g))\}$ se anula identicamente para todo $h \in H$, formando uma estrutura de blocos em $D_{\tilde{\lambda}}(g)$, mas não para todo $g \in GL(n)$.

O grupo $GL(n)$ consiste em todas transformações lineares inversíveis de coeficientes complexos. Considerando $SL(n)$ como o subgrupo H de $GL(n)$, correspondente às transformações de $GL(n)$ cujo determinante é um ($\det(D(h)) = 1$), temos que todo elemento de $GL(n)$ pode ser escrito na forma:

^{8.3}A base obtida por simetrização no caso de $GL(n)$.

$$D(g) = [\det(D(g))]^{\frac{1}{n}} D(h); \quad h \in SL(n) \text{ e } g \in GL(n). \quad (8.1.68)$$

Ou seja, para cada elemento de $GL(n)$ há um elemento correspondente de $SL(n)$ com determinante unitário.

De (8.1.68) e da homogeneidade do conjunto de polinômios $\{\mathcal{P}_\alpha(D_{ij}(g))\}$, vemos que todos estes respeitam uma igualdade:

$$\mathcal{P}_\alpha(D_{ij}(g)) = [\det(D(g))]^{\frac{N}{n}} \mathcal{P}_\alpha(D_{ij}(h)). \quad (8.1.69)$$

Logo, se o conjunto de polinômios se anula para todo $h \in SL(n)$, então se anula também para todo $g \in GL(n)$, o que contraria a hipótese de irreducibilidade de $D_{\vec{\lambda}}(g)$ em $GL(n)$. Portanto, as representações $D_{\vec{\lambda}}(g)$ também são irreducíveis em $SL(n)$ e as bases que geram os espaços invariantes sob ação destas representações ainda podem ser obtidas pelo processo de simetrização de $\mathbb{H}^{\otimes N}$.

Agora, vamos considerar apenas o caso específico de $n = 3$. Vamos mostrar que as representações irreducíveis $D_{\vec{\lambda}}(g)$ de $SL(3)$ continuam irreducíveis em $SU(3)$; ou seja, quando restringimos os elementos de $SL(3)$ à condição de unitariedade:

$$D^\dagger(g) = D^{-1}(g) = D(g^{-1}); \quad g \in SU(3). \quad (8.1.70)$$

Por definição, a álgebra de Lie $\mathfrak{L}_G$ de um grupo de Lie matricial G é o conjunto de todas matrizes A tais que $\exp(itA) \in G$, para todo número real t . Então, utilizando a identidade:

$$\det[\exp(itA)] = \exp[it \operatorname{Tr}(A)]. \quad (8.1.71)$$

Temos que a álgebra de Lie de $SL(3)$, denotada por $sl(3)$, quando em sua representação padrão, que define a álgebra, é o conjunto de todas matrizes 3×3 de traço nulo, pois de (8.1.71) vemos que $\det[\exp(itA)] = 1$ implica em $\operatorname{Tr}(A) = 0$. Uma base para as matrizes 3×3 de traço nulo pode ser dada pelos oito elementos seguintes:

$$(E_{ij})_{km} \equiv \delta_{ik} \delta_{jm}; \quad i \neq j \text{ e } i, j, k, m = 1, 2, 3; \quad (8.1.72)$$

$$Q_1 \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad Q_2 \equiv \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

Um elemento qualquer de $sl(3)$ é escrito como:

$$A = \sum_{i \neq j} \alpha_{ij} E_{ij} + \sum_{k=1}^2 \beta_k Q_k; \quad \alpha_{ij}, \beta_k \in \mathbb{C}. \quad (8.1.73)$$

A condição de unitariedade de $SU(3)$ fornece:

$$[\exp(itA)]^\dagger = \exp(-itA^\dagger) = [\exp(itA)]^{-1} = \exp(-itA). \quad (8.1.74)$$

Conseqüentemente, a unitariedade do grupo implica em $A = A^\dagger$. Portanto, a álgebra de Lie de $SU(3)$, denotada por $su(3)$, é o conjunto de todas matrizes 3×3 que, além de possuírem traço nulo, são Hermitianas. Uma base conveniente para a representação padrão de $su(3)$ é fornecida pelas seguintes matrizes, que são combinações lineares dos elementos da base (8.1.72):

$$\left. \begin{aligned} J_{ij} &\equiv i(E_{ij} - E_{ji}); \\ P_{ij} &\equiv E_{ij} + E_{ji}; \end{aligned} \right\} \text{ para } (i, j) = (1, 3), (2, 1), (3, 2); \quad (8.1.75)$$

$$Q_1 \text{ e } Q_2.$$

Logo, um elemento qualquer de $su(3)$ é escrito como:

$$\begin{aligned} A' &= \sum_{(i,j)} (\alpha'_{ij} J_{ij} + \beta'_{ij} P_{ij}) + \sum_{k=1}^2 \gamma'_k Q_k; \quad \alpha'_{ij}, \beta'_{ij}, \gamma'_k \in \mathbb{R} \\ &= \sum_{(j,k)} [(\beta'_{jk} + i\alpha'_{jk})E_{jk} + (\beta'_{jk} - i\alpha'_{jk})E_{kj}] + \sum_{m=1}^2 \gamma'_m Q_m; \end{aligned} \quad (8.1.76)$$

onde a somatória $\sum_{(i,j)}$ indica soma sobre $(i, j) = (1, 3), (2, 1), (3, 2)$. Podemos ver facilmente em (8.1.76)

que se permitirmos que os coeficientes α'_{jk} , β'_{jk} e γ'_m sejam complexos, então reobtemos os elementos da álgebra $sl(3)$ dados em (8.1.73). Em outras palavras, se os coeficientes de (8.1.76) são restritos aos reais, temos a álgebra $su(3)$; se permitimos valores complexos, temos $sl(3)$. Por este motivo dizemos que $sl(3)$ é a complexificação da álgebra real $su(3)$.

Da teoria de grupos e suas representações, sabemos que para toda representação $\Gamma(g)$ de um grupo de Lie G , agindo em um espaço $\mathbb{V}$, existe uma única representação $\gamma(A)$ de sua álgebra de Lie $\mathfrak{L}_G$, agindo sobre o mesmo espaço, tal que:

$$\Gamma(g) = \exp(i\gamma(A)); \text{ se } g = \exp(iA) \in G, A \in \mathfrak{L}_G. \quad (8.1.77)$$

Este resultado diz basicamente que toda representação de um grupo de Lie induz uma representação de sua álgebra e vice-versa. Então, as representações irredutíveis de $SL(3)$, que denotamos por $D_{\tilde{\chi}}(g)$, induzem representações $d_{\tilde{\chi}}(A)$ de $sl(3)$ que agem também sobre os espaços de simetria definida sob permutação de índices.

Outro conhecido resultado é que, para grupos conexos^{8.4}, uma representação Γ do grupo é irredutível se, e somente se, a representação associada γ de sua álgebra também é irredutível.

Como os grupos $SU(3)$ e $SL(3)$ são conexos, podemos concluir que a representação $d_{\tilde{\chi}}$, associada a $D_{\tilde{\chi}}$, é irredutível para $sl(3)$, portanto, se esta irredutibilidade for mantida para a subálgebra $su(3)$, concluímos também que a representação $D_{\tilde{\chi}}$ é irredutível quando restrita ao subgrupo $SU(3)$.

Então, um elemento qualquer A' da subálgebra $su(3)$ pode ser representado por:

$$d_{\tilde{\chi}}(A') = \sum_{(j,k)} (\beta'_{jk} + i\alpha'_{jk})d_{\tilde{\chi}}(E_{jk}) + (\beta'_{jk} - i\alpha'_{jk})d_{\tilde{\chi}}(E_{kj}) + \sum_m \gamma'_m d_{\tilde{\chi}}(Q_m); \quad (8.1.78)$$

para todos os coeficientes reais na somatória. Se a representação $d_{\tilde{\chi}}(A')$ é redutível a uma forma de blocos, por uma mudança de base apropriada, para todo $A' \in su(3)$, então certas combinações lineares dos α'_{jk} , β'_{jk} e γ'_m se anulam para todos os valores reais destes coeficientes.

Mas, se estas combinações lineares se anulam para todos os valores reais dos coeficientes independentes, então elas devem se anular também se estes coeficientes assumirem qualquer valor complexo.

^{8.4}Ou seja, grupos em que existe um caminho contínuo entre dois elementos arbitrários. Por exemplo, dados dois elementos g_a e g_b do grupo conexo G , podemos construir o caminho $g(t)$, parametrizado pela variável real $t \in [a, b]$, tal que $g(a) = g_a$ e $g(b) = g_b$.

Desta forma, a representação $d_{\vec{\lambda}}(A)$ seria redutível também para todo $A \in sl(3)$, o que contraria nossos resultados anteriores de irreducibilidade de $SL(3)$. Portanto, $d_{\vec{\lambda}}$ permanece irreducível quando os elementos da álgebra são restritos a $su(3)$ e, conseqüentemente, $D_{\vec{\lambda}}(g)$ permanece irreducível quando restringimos os elementos ao subgrupo $SU(3)$.

Assim, o método de simetrização de estados com os operadores de Young fornece espaços invariantes mínimos não triviais também sob a aplicação das transformações do grupo $SU(3)$. Contudo, na natureza observamos restrições às simetrias matematicamente realizáveis de padrões de Young, de maneira que devemos investigar a física envolvida em um problema de muitas partículas.

Se o espaço vetorial $\mathbb{H}$, introduzido na seção anterior, é o espaço de Hilbert tridimensional de uma única partícula ao qual atribuímos a base ortonormal $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, então é um postulado da mecânica quântica que o espaço de N partículas, cada uma isoladamente restrita a $\mathbb{H}$, é dado pelo produto tensorial $\mathbb{H}^{\otimes N}$. Um elemento da base ortonormal deste espaço é obtido pelo produto tensorial de N estados da base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, associada a cada partícula.

Na mecânica quântica, temos também que a evolução temporal de um estado de um sistema conservativo é dada por uma transformação linear unitária. Para um estado arbitrário $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$, temos:

$$U(t)|\psi(0)\rangle = |\psi(t)\rangle. \quad (8.1.79)$$

Como $\mathbb{H}$ é tridimensional, então o conjunto de todas transformações unitárias do tipo (8.1.79) forma o grupo $U(3)$. No entanto, a condição de unitariedade impõe que o determinante de todos os operadores U neste grupo tenham **valor absoluto** igual a um. Portanto, todo elemento de $U(3)$ pode ser escrito como uma fase vezes um operador unitário de determinante um:

$$U = e^{i\phi}U'; \quad \phi \in \mathbb{R}, \det(U') = 1. \quad (8.1.80)$$

Então, a equação (8.1.79) toma a forma:

$$U(t)|\psi(0)\rangle = e^{i\phi(t)}U'(t)|\psi(0)\rangle = e^{i\phi(t)}|\psi'(t)\rangle. \quad (8.1.81)$$

Na mecânica quântica, uma fase global, dependente ou independente do tempo, não altera o conteúdo físico do estado. Logo, vemos que $|\psi(t)\rangle$ é equivalente a $|\psi'(t)\rangle$. Desta forma, podemos restringir, sem perda de generalidade, as evoluções unitárias do sistema a aquelas de determinante unitário; ou seja, a $SU(3)$, no caso tridimensional.

Se N partículas **idênticas** e **não interagentes**, cada uma isoladamente restrita ao espaço $\mathbb{H}$, evoluem todas da mesma forma^{8.5} e unitariamente, então o operador de evolução deve ser dado pelo produto tensorial de N operadores no espaço de partícula única; ou seja, pelo produto de N representações padrões de $SU(3)$, exatamente como fizemos na equação (8.1.54), mas desta vez colocando as restrições de unitariedade e unimodulariedade sobre os $D(g)$.

Os subespaços invariantes sob aplicação da evolução temporal são os espaços de simetria definida de permutação dos índices das partículas. Logo, o sistema inicializado em um destes subespaços permanece nele durante toda sua evolução conservativa.

Porém, devemos lembrar que na natureza os sistemas de N partículas idênticas são encontrados em apenas dois subespaços: os totalmente simétricos, para as partículas chamadas bósons, e totalmente antissimétricos, para os férmions.

^{8.5}Ou seja, com a mesma operação de $SU(3)$ agindo sobre cada uma, o que é esperado de uma evolução unitária de partículas idênticas.

Os espaços totalmente simétricos são obtidos pela aplicação de simetrizadores de Young construídos do padrão com N caixas dispostas horizontalmente:

$$\underbrace{\boxed{} \boxed{} \boxed{} \boxed{} \dots \boxed{}}_{N \text{ caixas}} \equiv \vec{\lambda}_S = [N]; \quad (8.1.82)$$

onde devemos preencher as caixas regularmente com os índices dos estados $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, no caso de $\mathbb{H}$ tridimensional. É fácil ver que o número de preenchimentos regulares de (8.1.82), com três possíveis valores de índices, é igual ao número de formas que podemos colocar N objetos idênticos em três caixas, ou seja:

$$\dim(\mathbb{B}_N) = \frac{(N+2)!}{N!2!} = \frac{(N+2)(N+1)}{2}. \quad (8.1.83)$$

Logo, a dimensão do subespaço de $\mathbb{H}^{\otimes N}$ em que age a representação totalmente simétrica de $SU(3)$, denotada doravante por Γ^N , cresce com o quadrado do número de partículas, como vemos em (8.1.83). Computacionalmente isto é bastante interessante, já que no problema de muitos bósons ficaremos restritos ao espaço em que age Γ^N , cuja dimensão cresce apenas polinomialmente com o número de partículas, diferentemente da dimensão do espaço completo $\mathbb{H}^{\otimes N}$, que aumenta exponencialmente com N .

Vemos também que os simetrizadores de Young construídos de (8.1.82) são equivalentes aos simetrizadores do espaço de Fock bosônico em cada espaço $\mathbb{B}_N$, encontrados em (8.1.5), a menos de um fator de normalização. Portanto, o espaço totalmente simétrico, sobre o qual age a representação Γ^N de $SU(3)$, constitui o espaço de Fock $\mathbb{B}_N$ para N bósons. Assim, apenas utilizando os conceitos da teoria de grupos e os postulados da mecânica quântica, associamos o espaço bosônico de N partículas ao espaço em que agem as representações totalmente simétricas por permutação de índices de $SU(3)$ e, portanto, a um subespaço invariante e irredutível sob a ação do grupo. Ainda mais, de forma natural encontramos $SU(3)$ como grupo dinâmico do sistema^{8.6}, no caso em que cada partícula isoladamente fica restrita a um espaço tridimensional.

8.1.4 Formalismo de Schwinger

Uma base para o espaço invariante sobre o qual age a representação totalmente simétrica por permutação de partículas Γ^N de $SU(3)$ é dada pelos estados totalmente simétricos de N partículas idênticas. Podemos usar a notação de populações de (8.1.23), para o caso de apenas três modos, representando os três estados de uma base conveniente do espaço $\mathbb{H}$ de partícula única, denotados por $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$. Resumindo, uma base para o espaço invariante por Γ^N é fornecida pelos estados:

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, n_3\rangle &= \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} (a_3^\dagger)^{n_3}}{\sqrt{n_1! n_2! n_3!}} |0\rangle, \text{ com } \sum_{i=1}^3 n_i = N; \\ &= \sqrt{\frac{N!}{\prod_{j=1}^3 n_j!}} S_B |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle, \alpha_k = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (8.1.84)$$

Aqui utilizamos novamente a notação da subseção 8.1.1 para o produto tensorial não simetrizado de N estados, $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle$.

^{8.6}Grupo que fornece a evolução unitária.

Vimos que o espaço gerado pelos vetores da base (8.1.84), para determinado N , é invariante e irreduzível sob a aplicação de transformações lineares do grupo $GL(3)$, em especial também sob a ação dos subgrupos $SL(3)$ e $SU(3)$. Portanto, $\mathbb{B}_N$ não possui subespaços invariantes não triviais sob a ação destes grupos. Vimos também que este espaço é invariante sob a aplicação das álgebras $sl(3)$ e $su(3)$, que têm representações irreduzíveis induzidas pelas representações Γ^N de seus grupos. De agora em diante, vamos denominar as representações induzidas das álgebras nos espaços totalmente simétricos por γ^N .

A representação γ^1 ou padrão, que age sobre o espaço $\mathbb{H}$ gerado por $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, dos operadores da base de $su(3)$ são dadas em (8.1.75). Vamos reescrever de forma explícita estas representações matriciais:

$$\begin{aligned}\gamma^1(J_{13}) &\doteq i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1(J_{21}) \doteq i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1(J_{32}) \doteq i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \gamma^1(P_{13}) &\doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1(P_{21}) \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1(P_{32}) \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \gamma^1(Q_1) &\doteq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1(Q_2) \doteq \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{8.1.85}$$

Estas matrizes são as análogas em $su(3)$ às matrizes de Pauli em $su(2)$; ou seja, um conjunto de matrizes da base para a representação padrão da álgebra e, portanto, Hermitianas de traço nulo. Juntamente com a identidade, estas matrizes formam uma base para as matrizes 3×3 , se permitirmos combinações lineares de coeficientes complexos. Outra base bastante útil para as matrizes 3×3 é a canônica:

$$\gamma_{km}^1(E_{ij}) \equiv \delta_{ik}\delta_{jm}; \quad i, j, k, m = 1, 2, 3.\tag{8.1.86}$$

Não é surpreendente que as matrizes de (8.1.86) formem uma base para a representação padrão de $gl(3)$, álgebra de $GL(3)$. Note que as matrizes não diagonais ($i \neq j$) em (8.1.86) são os mesmos elementos da base de $sl(3)$ dados em (8.1.72). Vemos também que os elementos da base de $su(3)$, dados em (8.1.85), são combinações lineares dos (8.1.86), portanto suas relações de comutação podem ser obtidas a partir das relações bastante simples que temos para a base de $gl(3)$, apenas lembrando que a operação de comutação é bilinear e independente de representação:

$$[E_{ij}, E_{km}] = \delta_{jk}E_{im} - \delta_{im}E_{kj}.\tag{8.1.87}$$

A ação destes geradores nos vetores da base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ é dada, seguindo (8.1.52), por:

$$|j'\rangle = \sum_i |i\rangle \gamma_{ij}^1(E_{km}).\tag{8.1.88}$$

Utilizando (8.1.86) podemos escrever facilmente estas transformações:

$$\sum_i |i\rangle \gamma_{ij}^1(E_{km}) = \delta_{mj}|k\rangle = |j'\rangle; \quad j = 1, 2, 3.\tag{8.1.89}$$

Podemos ver em (8.1.89) que a ação dos geradores E_{km} é devolver o estado $|k\rangle$ no lugar do estado $|m\rangle$, quando aplicado sobre este, ou zero quando aplicado em outro estado.

Da definição de álgebra de Lie, temos:

$$g = \exp \left(i \sum_{k,m=1}^3 \alpha_{km} E_{km} \right) \in GL(3); \text{ onde } A = \sum_{k,m} \alpha_{km} E_{km} \in gl(3), \alpha_{km} \in \mathbb{C}. \quad (8.1.90)$$

Supondo que a representação padrão $D(g)$ de $GL(3)$ induz a representação padrão $d(A)$ de $gl(3)$, ambas agindo no espaço $\mathbb{H}$, temos de (8.1.90):

$$D(g) = \exp[id(A)]. \quad (8.1.90')$$

Colocando (8.1.90') em (8.1.54), obtemos:

$$\begin{aligned} |\beta'_1, \dots, \beta'_N\rangle &= \sum_{(\alpha)} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle D_{\alpha_1\beta_1}(g) \dots D_{\alpha_N\beta_N}(g) \\ &= \sum_{(\alpha)} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle [\exp(id_{[1]}(A))]_{\alpha_1\beta_1} \dots [\exp(id_{[N]}(A))]_{\alpha_N\beta_N} \\ &\equiv \sum_{(\alpha)} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle [\exp(i \sum_{j=1}^N d_{[j]}(A))]_{(\alpha)(\beta)}; \end{aligned} \quad (8.1.91)$$

onde $d_{[j]}(A)$ indica a representação padrão de $gl(3)$ agindo sobre o espaço $\mathbb{H}$ da j -ésima partícula, ou seja:

$$d_{[j]}(A) \equiv \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes d(A) \otimes \dots \otimes \mathbf{1}. \quad (8.1.92)$$

Portanto, $d_{[j]}(A)$ comuta com $d_{[k]}(A')$ para $j \neq k$, considerando todos os elementos A e A' em $gl(3)$. Então, de (8.1.91), vemos que a representação de $GL(3)$, obtida do produto tensorial de N representações $D(g)$:

$$D^N(g) = D(g) \otimes D(g) \otimes \dots \otimes D(g), \quad (8.1.93)$$

induz a representação produto tensorial de $gl(3)$, fornecida pela soma:

$$d^N(A) = \sum_{j=1}^N d_{[j]}(A). \quad (8.1.94)$$

Esta nova representação claramente preserva as relações de comutação:

$$\begin{aligned}
[d^N(A), d^N(A')] &= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N [d_{[j]}(A), d_{[k]}(A')] \\
&= \sum_{j=1}^N [d_{[j]}(A), d_{[j]}(A')] \\
&= \sum_{j=1}^N \sum_{k,m} \beta_{km} d_{[j]}(E_{km}) \\
&= \sum_{k,m} \beta_{km} d^N(E_{km}).
\end{aligned} \tag{8.1.95}$$

Na penúltima passagem da última equação usamos que o comutador entre dois elementos de $gl(3)$ pode ser escrito como uma combinação linear dos geradores de sua base, pois a álgebra é fechada por comutação.

Então, vamos obter a operação dos geradores E_{km} de $gl(3)$ sobre um estado arbitrário, definido em (8.1.84), da base do espaço bosônico $\mathbb{B}_N$:

$$\begin{aligned}
O_{E_{ij}} |n_1, n_2, n_3\rangle &= O_{E_{ij}} \left(\sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! n_3!}} S_B |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \right) \\
&= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} S_B O_{E_{ij}} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \\
&= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} S_B \sum_{\beta_1, \dots, \beta_N} |\beta_1, \dots, \beta_N\rangle d_{(\beta)(\alpha)}^N(E_{ij}) \\
&= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} S_B \sum_{(\beta)} \sum_{k=1}^N |\beta_1, \dots, \beta_N\rangle \delta_{\beta_1 \alpha_1} \delta_{\beta_2 \alpha_2} \dots d_{\beta_k \alpha_k}(E_{ij}) \dots \delta_{\beta_N \alpha_N} \\
&= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} S_B \sum_{k=1}^N |\alpha_1\rangle \otimes \dots \otimes \left(\sum_{\beta_k} |\beta_k\rangle d_{\beta_k \alpha_k}(E_{ij}) \right) \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle;
\end{aligned} \tag{8.1.96}$$

onde utilizamos que operadores de permutação de índices, ou compostos de permutações como S_B , comutam com operadores bissimétricos nos índices, como vimos em (8.1.59).

Agora, vamos considerar dois casos distintos em (8.1.96): E_{ij} com $i = j$ ou $i \neq j$ ($i, j = 1, 2, 3$). Primeiramente, consideramos o caso $i = j$, utilizando (8.1.89):

$$\begin{aligned}
O_{E_{jj}}|n_1, n_2, n_3\rangle &= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} S_B \sum_{k=1}^N |\alpha_1\rangle \otimes \dots \otimes (\delta_{j\alpha_k}|j\rangle) \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle \\
&= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} n_j S_B |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \\
&= n_j |n_1, n_2, n_3\rangle \\
&= a_j^\dagger a_j |n_1, n_2, n_3\rangle.
\end{aligned} \tag{8.1.97}$$

Já para o caso $i \neq j$:

$$\begin{aligned}
O_{E_{ij}}|n_1, n_2, n_3\rangle &= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} S_B \sum_{k=1}^N |\alpha_1\rangle \otimes \dots \otimes (\delta_{j\alpha_k}|i\rangle) \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle \\
&= \sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}} S_B \sum_{k=1}^N \delta_{j\alpha_k} |\alpha_1, \dots, \alpha_{k-1}, i, \alpha_{k+1}, \dots, \alpha_N\rangle \\
&= \sqrt{n_j(n_i + 1)} |n_i + 1, n_j - 1, n_m\rangle, \quad m \neq i, m \neq j; \\
&= a_i^\dagger a_j |n_1, n_2, n_3\rangle.
\end{aligned} \tag{8.1.98}$$

Resumindo:

$$O_{E_{ij}} = a_i^\dagger a_j = \vec{a}^\dagger d(E_{ij}) \vec{a}; \quad \vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}. \tag{8.1.99}$$

Ou seja, um gerador da álgebra $gl(3)$ pode ser escrito como uma combinação de um operador de criação e um operador de aniquilação no espaço de Fock de três modos. Combinações de números iguais de operadores de criação e aniquilação são justamente aquelas que conservam o número total de partículas em um estado $|n_1, n_2, n_3\rangle$, fato já esperado, pois o espaço $\mathbb{B}_N$ é invariante sob a ação do grupo $GL(3)$ e conseqüentemente de sua álgebra $gl(3)$. Notemos que as relações de comutação (8.1.87) são preservadas pela álgebra dos operadores bosônicos:

$$\begin{aligned}
[O_{E_{ij}}, O_{E_{km}}] &= [a_i^\dagger a_j, a_k^\dagger a_m] \\
&= \delta_{jk} a_i^\dagger a_m - \delta_{im} a_k^\dagger a_j \\
&= \delta_{jk} O_{E_{im}} - \delta_{im} O_{E_{kj}}.
\end{aligned} \tag{8.1.100}$$

Como os geradores de $SU(3)$, encontrados em (8.1.85) na representação padrão, são combinações lineares dos E_{ij} , temos claramente que os operadores da base $su(3)$ podem ser representados no espaço de Fock bosônico por:

$$\begin{aligned}
J_{jk} &= i\vec{a}^\dagger[d(E_{jk}) - d(E_{kj})]\vec{a} = i(a_j^\dagger a_k - a_k^\dagger a_j); \\
P_{jk} &= \vec{a}^\dagger[d(E_{jk}) + d(E_{kj})]\vec{a} = a_j^\dagger a_k + a_k^\dagger a_j; \\
Q_1 &= \vec{a}^\dagger \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \vec{a} = \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2); \\
Q_2 &= \vec{a}^\dagger \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \vec{a} = \frac{1}{3}(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 - 2a_3^\dagger a_3).
\end{aligned} \tag{8.1.101}$$

Por conveniência, denominamos os operadores associados aos elementos da base de $su(3)$ com os mesmos símbolos utilizados para suas representações padrões em (8.1.75).

Os operadores obtidos em (8.1.101) são análogos aos conhecidos operadores de Schwinger para $su(2)$, mas generalizados para a álgebra $su(3)$, quando esta age em espaços totalmente simétricos por permutação de partículas. Em geral, a operação de $A \in su(3)$ em $\mathbb{B}_N$ é dada por:

$$A = \vec{a}^\dagger \gamma^1(A) \vec{a}. \tag{8.1.102}$$

Usando (8.1.102) e as relações de comutação bosônicas, mostramos que:

$$\begin{aligned}
[A, a_i^\dagger |0\rangle] &= \sum_{j,k} \gamma_{jk}^1(A) a_j^\dagger [a_k, a_i^\dagger] |0\rangle \quad \therefore \\
A(a_i^\dagger |0\rangle) &= \sum_j (a_j^\dagger |0\rangle) \gamma_{ji}^1(A).
\end{aligned} \tag{8.1.103}$$

Ou seja, como previsto, os estados $a_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle$ ($i = 1, 2, 3$), onde $|0\rangle$ é o estado de vácuo, se transformam de acordo com a representação γ^1 de $su(3)$, ao passo que o conjunto $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ forma uma base do espaço em que age esta representação.

8.2 Estados Coerentes de Mínima Incerteza

Definimos a **ação adjunta da álgebra $su(n)$** sobre a própria álgebra como:

$$ad_A S = [A, S]; \quad A, S \in su(n). \tag{8.2.1}$$

Como a álgebra é fechada por comutação, podemos escrever o resultado de (8.2.1) em uma base arbitrária $\{A_i\}$ de $su(n)$, dadas as relações de comutação entre os elementos da base:

$$[A_j, A_k] = \sum_m i c_{jk}^m A_m. \tag{8.2.2}$$

As constantes c_{jk}^m são os fatores de estrutura da álgebra^{8.7}. Então, utilizando (8.2.2) e as expansões de A e S na base escolhida de $su(n)$, reescrevemos (8.2.1) como:

^{8.7}O fator i em (8.2.2) vem da convenção dos físicos, que definem a álgebra de Lie em termos da exponencial e^{itA} , não apenas por e^{tA} como os matemáticos; ou seja, para os físicos a álgebra é fechada por $-i[A_j, A_k]$.

$$\begin{aligned}
ad_A S &= [\sum_m a^m A_m, \sum_n s^n A_n] \\
&= \sum_{m,n,k} i a^m s^n c_{mn}^k A_k \\
&= \sum_{n,k} s^n A_k \left(i \sum_m a^m c_{mn}^k \right) \\
&\equiv \sum_{n,k} s^n A_k p_{kn}(A).
\end{aligned} \tag{8.2.3}$$

Acima, definimos a representação adjunta da álgebra:

$$p_{mn}(A) \equiv i \sum_k a^k c_{kn}^m. \tag{8.2.4}$$

A aplicação adjunta sucessiva fornece:

$$ad_A(ad_B S) = \sum_{n,j,k} s^n A_j p_{jk}(A) p_{kn}(B). \tag{8.2.5}$$

Portanto, utilizando a definição (8.2.4):

$$(p_A p_B)_{ij} = - \sum_{k,m,n} a^k b^n c_{km}^i c_{nj}^m. \tag{8.2.6}$$

O traço desta “multiplicação” de elementos da representação adjunta da álgebra é invariante por uma mudança da base da álgebra:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(p(A)p(B)) &= - \sum_{k,m,n,i} a^k b^n c_{km}^i c_{ni}^m \\
&= \sum_{k,n} \left(- \sum_{m,i} c_{km}^i c_{ni}^m \right) a^k b^n \\
&\equiv \sum_{k,n} k_{kn} a^k b^n.
\end{aligned} \tag{8.2.7}$$

Aqui definimos a métrica simétrica:

$$k_{ij} \equiv - \sum_{k,m} c_{im}^k c_{jk}^m. \tag{8.2.8}$$

A esta métrica associamos um produtor escalar em $su(n)$:

$$\langle A, B \rangle = \sum_{i,j} k_{ij} a^i b^j. \tag{8.2.9}$$

Se uma transformação unitária da base da álgebra é feita:

$$A_j = \sum_i \tilde{A}_i U_{ij}. \quad (8.2.10)$$

Então, as coordenadas de um elemento de $su(3)$ transformam-se como:

$$\begin{aligned} A &= \sum_j a^j A_j \\ &= \sum_{j,k} a^j \tilde{A}_k U_{kj} \\ &= \sum_k \tilde{a}^k \tilde{A}_k \rightarrow \tilde{a}^k = \sum_j U_{kj} a^j. \end{aligned} \quad (8.2.11)$$

Agora, buscamos a transformação dos fatores de estrutura:

$$\begin{aligned} [A_i, A_j] &= \sum_{k,m} [\tilde{A}_k, \tilde{A}_m] U_{ki} U_{mj} \\ &= \sum_n c_{ij}^n A_n \\ &= \sum_{n,l} c_{ij}^n \tilde{A}_l U_{ln}. \end{aligned} \quad (8.2.12)$$

Invertendo a equação:

$$\begin{aligned} [\tilde{A}_\mu, \tilde{A}_\nu] &= \sum_{n,l,i,j} c_{ij}^n \tilde{A}_l U_{ln} U_{i\mu}^\dagger U_{j\nu}^\dagger \\ &= \sum_l \left(\sum_{i,j,n} U_{ln} c_{ij}^n U_{i\mu}^\dagger U_{j\nu}^\dagger \right) \tilde{A}_l \\ &\equiv \sum_l \tilde{c}_{\mu\nu}^l \tilde{A}_l. \end{aligned} \quad (8.2.13)$$

Portanto:

$$\tilde{c}_{\mu\nu}^l = \sum_{i,j,k} U_{lk} c_{ij}^k U_{i\mu}^\dagger U_{j\nu}^\dagger. \quad (8.2.14)$$

Por fim, utilizando a equação anterior, vemos que a métrica se transforma como:

$$\begin{aligned} \tilde{k}_{\mu\nu} &= - \sum_{\sigma,\rho} \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma \tilde{c}_{\nu\sigma}^\rho \\ &= - \sum_{\sigma,\rho} \sum_{i,j,k} \sum_{l,m,n} U_{\sigma i} c_{jk}^i U_{j\mu}^\dagger U_{k\rho}^\dagger U_{\rho l} c_{mn}^l U_{m\nu}^\dagger U_{n\sigma}^\dagger \\ &= - \sum_{i,j,k,m} c_{jk}^i c_{mi}^k U_{j\mu}^\dagger U_{m\nu}^\dagger \\ &= \sum_{j,m} k_{jm} U_{j\mu}^\dagger U_{m\nu}^\dagger. \end{aligned} \quad (8.2.15)$$

Desta forma, o produto escalar é invariante:

$$\begin{aligned} \sum_{\mu,\nu} \tilde{k}_{\mu\nu} \tilde{a}^\mu \tilde{b}^\nu &= \sum_{\mu,\nu} \sum_{i,j,k,l} k_{ij} U_{i\mu}^\dagger U_{j\nu}^\dagger U_{\mu k} a^k U_{\nu l} b^l \\ &= \sum_{i,j} k_{ij} a^i b^j. \end{aligned} \quad (8.2.16)$$

Para álgebras semi-simples, o que inclui $su(n)$ para $n > 1$, k é inversível, o que nos permite definir o seguinte operador, usando a notação $k^{ij} = k_{ij}^{-1}$:

$$C_{(2)} = \sum_{ij} k^{ij} A_i A_j. \quad (8.2.17)$$

Este operador é conhecido como Casimir quadrático, que comuta com todos elementos da álgebra [Ham62]:

$$[C_{(2)}, A] = 0, \quad \forall A \in su(n). \quad (8.2.18)$$

Vamos calcular a métrica k_{ij} e o Casimir quadrático para $su(3)$, a álgebra interessante ao modelo de um condensado em poço triplo. Primeiramente, devemos encontrar os fatores de estrutura das relações de comutação entre os seguintes geradores:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{1}{2}(E_{11} - E_{22}), & Q_2 &= \frac{1}{3}(E_{11} + E_{22} - 2E_{33}); \\ J_x &= i(E_{32} - E_{23}), & J_y &= i(E_{13} - E_{31}), & J_z &= i(E_{21} - E_{12}); \\ P_1 &= E_{13} + E_{31}, & P_2 &= E_{21} + E_{12}, & P_3 &= E_{32} + E_{23}; \end{aligned} \quad (8.2.19)$$

onde os E_{ij} obedecem às relações de comutação:

$$[E_{ij}, E_{km}] = \delta_{jk} E_{im} - \delta_{im} E_{kj}. \quad (8.2.20)$$

Portanto, as relações de comutação entre os geradores de (8.2.19) são:

$$\begin{aligned} [Q_1, Q_2] &= 0, & [Q_1, P_1] &= -\frac{i}{2} J_y, & [Q_1, P_2] &= i J_z, & [Q_1, P_3] &= -\frac{i}{2} J_x; \\ [Q_1, J_y] &= \frac{i}{2} P_1, & [Q_1, J_z] &= -i P_2, & [Q_1, J_x] &= \frac{i}{2} P_3, & [Q_2, P_1] &= -i J_y; \\ [Q_2, P_2] &= 0, & [Q_2, P_3] &= i J_x, & [Q_2, J_y] &= i P_1, & [Q_2, J_z] &= 0; \\ [Q_2, J_x] &= -i P_3, & [P_1, P_2] &= -i J_x, & [P_1, P_3] &= i J_z, & [P_1, J_y] &= -i(2Q_1 + 3Q_2); \\ [P_1, J_z] &= -i P_3, & [P_1, J_x] &= i P_2, & [P_2, P_3] &= -i J_y, & [P_2, J_y] &= i P_3; \\ [P_2, J_z] &= i 4Q_1, & [P_2, J_x] &= -i P_1, & [P_3, J_y] &= -i P_2, & [P_3, J_z] &= i P_1; \\ [P_3, J_x] &= -i(2Q_1 - 3Q_2), & [J_y, J_z] &= i J_x, & [J_y, J_x] &= -i J_z, & [J_z, J_x] &= i J_y. \end{aligned} \quad (8.2.21)$$

Então, colocando os elementos da base na ordem $\{Q_1, Q_2, P_1, P_2, P_3, J_x, J_y, J_z\}$ e empregando a definição (8.2.8), obtemos o tensor k para os fatores de estrutura fornecidos acima:

$$k = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}. \quad (8.2.22)$$

A inversa de k é encontrada trivialmente:

$$k^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12} \end{pmatrix}. \quad (8.2.23)$$

Portanto, usando (8.2.17), temos o Casimir quadrático de $su(3)$:

$$C_{(2)} = \frac{1}{3}Q_1^2 + \frac{1}{4}Q_2^2 + \frac{1}{12} \sum_{i=1}^3 (P_i^2 + J_i^2). \quad (8.2.24)$$

Introduzindo a representação em termos de operadores de criação e aniquilação de (8.1.101) e utilizando as relações de comutação bosônicas usuais, podemos reescrever o Casimir quadrático como:

$$C_{(2)} = \frac{\hat{N}}{3} \left(\frac{\hat{N}}{3} + 1 \right). \quad (8.2.25)$$

O Casimir quadrático, como esperado, determina uma representação totalmente simétrica de $SU(3)$, pois especifica unicamente o número de partículas do sistema, que também é invariante dentro do espaço em que age esta representação. Logo, o número total de partículas e o Casimir quadrático não são invariantes independentes dentro do espaço que carrega uma das representações Γ^N de $SU(3)$, considerando problemas de muitos bósons idênticos.

Uma base ortonormal de $su(3)$ é dada por $\left\{ \frac{Q_1}{\sqrt{3}}, \frac{Q_2}{2}, \frac{P_1}{2\sqrt{3}}, \frac{P_2}{2\sqrt{3}}, \frac{P_3}{2\sqrt{3}}, \frac{J_x}{2\sqrt{3}}, \frac{J_y}{2\sqrt{3}}, \frac{J_z}{2\sqrt{3}} \right\}$, como podemos ver em (8.2.23). Para esta base teríamos a métrica $k_{ij} = k^{ij} = \delta_{ij}$, considerando o produto escalar em (8.2.9).

Agora, definimos o operador de incerteza total da álgebra $su(n)$ como:

$$(\Delta A)^2 \equiv \sum_{i,j} k^{ij} (A_i - \langle A_i \rangle)(A_j - \langle A_j \rangle); \quad (8.2.26)$$

onde os escalares $\langle A_i \rangle$ são as médias dos operadores associados aos elementos da base de $su(n)$, definidas em um espaço de Hilbert $\mathbb{H}$ para estado arbitrário $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$. A média de (8.2.26) em $|\psi\rangle$ é a incerteza total deste estado em relação a $su(n)$:

$$\begin{aligned}
\langle (\Delta A)^2 \rangle &= \sum_{i,j} k^{ij} \langle (A_i A_j - A_i \langle A_j \rangle - A_j \langle A_i \rangle + \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle) \rangle. \\
&= \sum_{i,j} k^{ij} (\langle A_i A_j \rangle - \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle).
\end{aligned} \tag{8.2.27}$$

Em geral, podemos encontrar uma base ortonormal para $su(n)$, como fizemos anteriormente para $su(3)$. Então, sem perda de generalidade, fazemos $k^{ij} = \delta_{ij}$:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \sum_i \langle A_i^2 \rangle - \langle A_i \rangle^2. \tag{8.2.27'}$$

Supomos também que $\mathbb{H}$ carrega uma representação irredutível de $SU(n)$ e, portanto, é auto-espaço de autovalor $\lambda_{(2)}$ do Casimir quadrático $C_{(2)}$ de $su(n)$. Para uma métrica ortonormal, temos $C_{(2)} = \sum_i A_i^2$, justamente o operador cuja média aparece no primeiro termo de (8.2.27').

Podemos mostrar que a incerteza (8.2.27) é invariante por uma troca de base em $su(n)$. Então, usando (8.2.10) e (8.2.15), obtemos:

$$\begin{aligned}
\langle (\Delta A)^2 \rangle &= \sum_{i,j} k^{ij} (\langle A_i A_j \rangle - \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle) \\
&= \sum_{i,j,k,m} \tilde{k}^{km} U_{ik}^\dagger U_{jm}^\dagger \sum_{n,l} U_{ni} U_{lj} (\langle \tilde{A}_n \tilde{A}_l \rangle - \langle \tilde{A}_n \rangle \langle \tilde{A}_l \rangle) \\
&= \sum_{k,m} \tilde{k}^{km} (\langle \tilde{A}_k \tilde{A}_m \rangle - \langle \tilde{A}_k \rangle \langle \tilde{A}_m \rangle).
\end{aligned} \tag{8.2.28}$$

A incerteza (8.2.27) também é invariante por uma transformação pertencente a $SU(n)$, o grupo gerado por $su(n)$, sobre o estado $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \psi' | (\Delta A)^2 | \psi' \rangle &= \langle \psi | \Gamma^\dagger(g) (\Delta A)^2 \Gamma(g) | \psi \rangle \\
&= \sum_{i,j} k^{ij} [\langle \psi | \Gamma^\dagger(g) A_i \Gamma(g) \Gamma^\dagger(g) A_j \Gamma(g) | \psi \rangle - \langle \psi | \Gamma^\dagger(g) A_i \Gamma(g) | \psi \rangle \langle \psi | \Gamma^\dagger(g) A_j \Gamma(g) | \psi \rangle].
\end{aligned} \tag{8.2.29}$$

Aqui utilizamos a notação $\Gamma(g)$ para a representação unitária de $g \in SU(n)$ que age sobre $\mathbb{H}$. Empregando a definição da **ação adjunta do grupo** sobre a álgebra:

$$g A_i g^{-1} = \sum_j A_j d_{ji}(g); \tag{8.2.30}$$

e também o resultado^{8.8}:

$$k^{-1} = d(g) k d^T(g), \quad \forall g \in SU(n); \tag{8.2.31}$$

obtemos de (8.2.29):

^{8.8}Este resultado é mostrado na seção 8.4, nas equações (8.4.34) e (8.4.35).

$$\begin{aligned}
\langle \psi' | (\Delta A)^2 | \psi' \rangle &= \sum_{i,j} k^{ij} \left[\sum_{k,m} (\langle \psi | A_k A_m | \psi \rangle - \langle \psi | A_k | \psi \rangle \langle \psi | A_m | \psi \rangle) d_{ki}(g^{-1}) d_{mj}(g^{-1}) \right] \\
&= \sum_{k,m} \left(\sum_{i,j} d_{ki}(g^{-1}) d_{mj}(g^{-1}) k^{ij} \right) (\langle \psi | A_k A_m | \psi \rangle - \langle \psi | A_k | \psi \rangle \langle \psi | A_m | \psi \rangle) \quad (8.2.32) \\
&= \sum_{k,m} k^{km} (\langle \psi | A_k A_m | \psi \rangle - \langle \psi | A_k | \psi \rangle \langle \psi | A_m | \psi \rangle) \\
&= \langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle.
\end{aligned}$$

Para $su(n)$, os $r = n^2 - 1$ operadores A_i da base são Hermitianos de traço nulo e podem ser separados em dois conjuntos. Primeiramente, podemos definir $q = n - 1$ operadores de Cartan H_k , que geram a subálgebra comutativa máxima de $su(n)$, como exemplo temos os geradores Q_1 e Q_2 de $su(3)$. Os outros $p = r - q$ operadores, os P_i e J_i para $su(3)$, são combinações lineares dos operadores de levantamento e abaixamento E_{ij} ($i \neq j$), estes últimos formam uma base para a álgebra complexificada $su^*(n) = sl(n)$, juntamente com os H_k .

Como os H_k comutam entre si, podemos sempre encontrar uma base em $\mathbb{H}$ que diagonaliza todos H_k simultaneamente, lembrando que no caso das representações totalmente simétricas de $SU(3)$ esta base é justamente composta dos estados $|n_1, n_2, n_3\rangle$:

$$H_k |\vec{h}\rangle = h_k |\vec{h}\rangle. \quad (8.2.33)$$

Talvez sejam necessários mais números quânticos além dos h_k para especificar unicamente um vetor desta base, mas omitimos outros índices por simplicidade. As relações de comutação entre os H_k e os E_{ij} são geralmente do tipo [Gil74]:

$$[H_i, E_{jk}] = \alpha_{ijk} E_{jk}, \text{ para } j \neq k. \quad (8.2.34)$$

As constantes α_{ijk} não devem ser nulas para todo i . A relação de comutação (8.2.34) exige que $E_{jk} |\vec{h}\rangle$ seja zero ou um novo autovetor de H_i com autovalor $h_i + \alpha_{ijk}$:

$$\begin{aligned}
H_i E_{jk} |\vec{h}\rangle &= E_{jk} H_i |\vec{h}\rangle + \alpha_{ijk} E_{jk} |\vec{h}\rangle \\
&= (h_i + \alpha_{ijk}) E_{jk} |\vec{h}\rangle.
\end{aligned} \quad (8.2.35)$$

Como os H_i são Hermitianos, temos que seus autovetores com autovalores diferentes são ortogonais:

$$\langle \vec{h} | E_{jk} | \vec{h} \rangle = 0. \quad (8.2.36)$$

As representações irredutíveis de $su(n)$ agem sobre espaços finitos. Então, existe um estado $|\vec{h}_M\rangle$ único que é aniquilado por todos operadores de levantamento [Hal03]:

$$E_{jk} |\vec{h}_M\rangle = 0, \quad j > k; \quad (8.2.37)$$

onde escolhemos as raízes positivas simples, como na seção 4.1, tal que os operadores de levantamento sejam aqueles com $j > k$. A quantidade $\sum_{i=1}^q h_i^2$ é maximizada em $|\vec{h}_M\rangle$, considerando todos os vetores da

base que diagonaliza simultaneamente os H_i [DF77]. A propriedade (8.2.37) define o vetor de máximo peso da representação irredutível de $SU(n)$ que age sobre $\mathbb{H}$.

Vemos facilmente em (8.2.27') que $(\Delta A)^2$ é um operador positivo-definido. Logo, o operador de incerteza total possui um autovalor mínimo e sua menor média é atingida para os auto-estados deste autovalor. Portanto, o estado que minimiza $\langle (\Delta A)^2 \rangle$ deve satisfazer necessariamente:

$$(\Delta A)^2 |\psi\rangle \propto |\psi\rangle \rightarrow \left(\sum_i A_i^2 - 2A_i \langle A_i \rangle + \langle A_i \rangle^2 \right) |\psi\rangle \propto |\psi\rangle. \quad (8.2.38)$$

Não há perda de generalidade na escolha da base ortogonal $\{A_i\}$ de $su(n)$, devido à invariância de $\langle (\Delta A)^2 \rangle$ por uma mudança de base da álgebra. Como o primeiro termo da somatória em (8.2.38) é simplesmente o Casimir quadrático e tomamos $\mathbb{H}$ como auto-espaço de autovalor $\lambda_{(2)}$ de $C_{(2)}$, então a condição necessária para o estado que minimiza a incerteza pode ser simplificada:

$$\sum_i A_i \langle A_i \rangle |\psi\rangle \propto |\psi\rangle. \quad (8.2.38')$$

Agora, vamos supor que um dos autovetores que satisfaz (8.2.38') é um estado da base $\{|\vec{h}\rangle\}$. Então, utilizando (8.2.33) e (8.2.36), obtemos:

$$\sum_i A_i \langle A_i \rangle |\vec{h}\rangle = \sum_j H_j \langle H_j \rangle |\vec{h}\rangle = \sum_k h_k^2 |\vec{h}\rangle. \quad (8.2.39)$$

Pois as médias dos elementos da base da álgebra A_i , que são combinações lineares Hermitianas apenas dos E_{ij} , são todas nulas, devido a (8.2.36). Portanto, considerando (8.2.38) e (8.2.39), vemos que a incerteza é minimizada para o vetor que maximiza $\sum_k h_k^2$; ou seja, o vetor de máximo peso $|\vec{h}_M\rangle$.

Sabendo que, dentre os vetores da base $|\vec{h}\rangle$, o estado de máximo peso possui a incerteza mínima, vamos agora encontrar a solução geral da minimização de $\langle (\Delta A)^2 \rangle$.

Note que um elemento $\sum_i n_i A_i$ da álgebra $su(n)$, no qual os n_i são as componentes de um vetor real de norma unitária em um espaço r -dimensional, é uma matriz Hermitiana de traço nulo e pode ser diagonalizada por uma transformação unitária de similaridade. Portanto, esta matriz pode ser reescrita como uma combinação linear $\sum_k a_k H_k$ dos elementos diagonais da álgebra, onde a_k é um vetor real em q dimensões. Ainda mais, a transformação unitária diagonalizante é uma operação de $SU(n)$, o que mostraremos na seção 8.4.1 no caso específico de $SU(3)$:

$$\Gamma(\hat{n}) \sum_j n_j A_j \Gamma^\dagger(\hat{n}) = \sum_k a_k H_k. \quad (8.2.40)$$

Aqui novamente Γ é a representação de um elemento de $SU(n)$ que age sobre $\mathbb{H}$. Aplicando a equação (8.2.40) sobre um estado da base $|\vec{h}\rangle$, obtemos:

$$\sum_j n_j A_j \Gamma^\dagger(\hat{n}) |\vec{h}\rangle = \sum_k h_k a_k \Gamma^\dagger(\hat{n}) |\vec{h}\rangle. \quad (8.2.41)$$

Considerando $|\psi\rangle = \Gamma^\dagger(\hat{n}) |\vec{h}\rangle$ e

$$n_j = \frac{\langle \psi | A_j | \psi \rangle}{\sqrt{\sum_i (\langle \psi | A_i | \psi \rangle)^2}}; \quad (8.2.42)$$

retornamos a equação (8.2.41):

$$\sum_j \frac{A_j \langle A_j \rangle}{\sqrt{\sum_i \langle A_i \rangle^2}} |\psi\rangle = \sum_k h_k a_k(\hat{n}) |\psi\rangle. \quad (8.2.43)$$

Multiplicando (8.2.43) por $\langle \psi |$ à esquerda, para um estado $|\psi\rangle$ normalizado, obtemos:

$$\sqrt{\sum_j \langle A_j \rangle^2} = \sum_k h_k a_k. \quad (8.2.44)$$

Contudo, o lado esquerdo de (8.2.44) é invariante por transformações do grupo sobre $|\psi\rangle$, como vimos em parte do cálculo de (8.2.32) para uma métrica não diagonal, desta maneira concluímos que o valor da equação pode ser encontrado para $\Gamma(\hat{n}) = \mathbb{1}$:

$$\sqrt{\sum_j \langle \psi | A_j | \psi \rangle^2} = \sqrt{\sum_j \langle \vec{h} | A_j | \vec{h} \rangle^2} = \sqrt{\sum_k h_k^2}; \quad (8.2.45)$$

onde utilizamos novamente (8.2.33) e (8.2.36). Substituindo (8.2.45) em (8.2.44), temos:

$$a_i(\hat{n}) = \frac{h_i}{\sqrt{\sum_k h_k^2}}. \quad (8.2.46)$$

Colocando (8.2.46) em (8.2.43), juntamente com (8.2.45), obtemos:

$$\sum_j \frac{A_j \langle A_j \rangle}{\sqrt{\sum_i \langle A_i \rangle^2}} |\psi\rangle = \sum_k \frac{h_k^2}{\sqrt{\sum_m h_m^2}} |\psi\rangle \rightarrow \sum_j A_j \langle A_j \rangle |\psi\rangle = \sum_k h_k^2 |\psi\rangle. \quad (8.2.47)$$

Vemos que $|\psi\rangle = \Gamma^\dagger(\hat{n}) |\vec{h}\rangle \equiv \Gamma(g) |\vec{h}\rangle$, para $g \in SU(n)$, tem o mesmo autovalor de $|\vec{h}\rangle$ no operador $\sum_j A_j \langle A_j \rangle$, comparando (8.2.39) e (8.2.47).

Como todos os estados de $\mathbb{H}$ podem ser escritos como uma combinação linear da base $\{|\vec{h}\rangle\}$ e os outros estados de mesma incerteza de $|\vec{h}_M\rangle$ podem ser obtidos deste por uma transformação do grupo, vemos finalmente que os vetores do tipo $\Gamma(g) |\vec{h}_M\rangle$ são aqueles que minimizam a incerteza dentro de $\mathbb{H}$.

Este resultado já era esperado, primeiramente, porque vimos que a incerteza da álgebra é invariante por transformações do grupo e, conseqüentemente, esperamos que os estados com $\langle (\Delta A)^2 \rangle$ mínima estejam ligados por transformações de $SU(n)$. Também devemos observar que a escolha da representação dos elementos H_k , constituintes da base da subálgebra comutativa máxima em $su(n)$, não é única; ou seja, o estado $\Gamma(g) |\vec{h}_M\rangle$ é o estado de máximo peso de alguma representação unitariamente equivalente dos H_k .

Notamos também que $\Gamma(g) |\vec{h}_M\rangle$ é justamente a definição do estado coerente mais próximo ao clássico [Per86], recordando da decomposição $\Gamma(g) = \Gamma(\Theta)\Gamma(s)$, onde $s \in S$ e $\Theta \in G/S$, para S o grupo de estabilidade de $|\vec{h}_M\rangle$.

Podemos ver que a expressão da incerteza total da álgebra $su(n)$ em um estado normalizado $|\psi\rangle$ também possui valor máximo, pois:

$$\begin{aligned}\langle(\Delta A)^2\rangle &= \sum_{i,j} k^{ij} (\langle A_i A_j \rangle - \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle) \\ &= \langle C_{(2)} \rangle - \sum_{i,j} k^{ij} \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle \\ &= \lambda_{(2)} - \sum_{i,j} k^{ij} \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle.\end{aligned}\tag{8.2.48}$$

Para métrica k^{ij} positiva-definida, é claro que $\langle(\Delta A)^2\rangle$ possui máximo em $\mathbb{H}$. O valor deste máximo é $\langle(\Delta A)^2\rangle = \lambda_{(2)}$ se, e somente se, existe $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$ tal que:

$$\langle\psi|A_i|\psi\rangle = 0; \quad i = 1, \dots, r.\tag{8.2.49}$$

Como os elementos A_i formam uma base da álgebra, podemos reescrever (8.2.49) da seguinte forma:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = 0, \quad \forall A \in su(n).\tag{8.2.49'}$$

Logo, possui incerteza máxima todo estado cuja média é nula em qualquer elemento da álgebra.

Muitas das representações irredutíveis de $SU(n)$ carregam um espaço $\mathbb{H}$ que possui estados que satisfazem (8.2.49'). As poucas exceções encontradas são conhecidas como sistemas degenerados. Alguns exemplos de sistemas degenerados de nosso interesse são [Kly]:

1. Representações n -dimensionais de $SU(n)$.
2. Representações de $SU(n)$ em espaços de formas bilineares antissimétricas para n ímpar.

O estado que maximiza a incerteza de $su(n)$ é chamado de estado maximamente emaranhado, no sentido generalizado, em relação a esta álgebra. Note a oposição entre o estado coerente próximo ao clássico, que minimiza a incerteza, e o estado maximamente emaranhado que maximiza $\langle(\Delta A)^2\rangle$.

Considerando a invariância de $\langle(\Delta A)^2\rangle$ sob a ação do grupo, temos que $\Gamma(g)|\psi\rangle$ também é maximamente emaranhado em relação à álgebra, se $|\psi\rangle$ maximiza a incerteza.

Para $SU(3)$, o estado de máximo peso de uma representação totalmente simétrica é $|0, 0, N\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle 0, 0, N | (\Delta A)^2 | 0, 0, N \rangle &= \frac{N}{3} \left(\frac{N}{3} + 1 \right) - \langle \frac{Q_2}{2} \rangle^2 \\ &= \frac{N^2}{9} + \frac{N}{3} - \frac{N^2}{9} = \frac{N}{3}.\end{aligned}\tag{8.2.50}$$

Portanto, o desvio $\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle} \equiv (\Delta A)_{rms}$ cresce com a raiz do número de partículas, de modo que o desvio por partícula $(\Delta A)_{rms}/N$ vai a zero quando $N \rightarrow \infty$.

Em uma representação irredutível totalmente simétrica de $SU(3)$, para N múltiplo de 3, é fácil verificar que o estado $|\frac{N}{3}, \frac{N}{3}, \frac{N}{3}\rangle$ satisfaz (8.2.49'):

$$\langle \frac{N}{3}, \frac{N}{3}, \frac{N}{3} | (\Delta A)^2 | \frac{N}{3}, \frac{N}{3}, \frac{N}{3} \rangle = \frac{N}{3} \left(\frac{N}{3} + 1 \right).\tag{8.2.51}$$

Esta incerteza cresce com o quadrado do número de partículas, logo $(\Delta A)_{rms} \propto N$ e o desvio por partícula vai a um valor constante quando $N \rightarrow \infty$, conservando as flutuações quânticas mesmo no limite macroscópico do sistema.

Como assumimos que $\mathbb{H}$ é um auto-espço de autovalor $\lambda_{(2)}$ de $C_{(2)}$, retornando em (8.2.48), vemos que uma variação do valor da incerteza depende, dentro de uma representação irredutível, apenas do valor do segundo termo do lado direito da equação. Este fato nos motiva a fazer a seguinte definição:

$$\begin{aligned}\langle(\Delta A)^2\rangle &= \lambda_{(2)} - \sum_{i,j} k^{ij} \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle \\ &\equiv \lambda_{(2)} - \mathcal{P}_{su(n)}(|\psi\rangle).\end{aligned}\tag{8.2.52}$$

Ou seja, o primeiro termo do lado direito é invariante em $\mathbb{H}$, enquanto o segundo termo definimos como a **pureza generalizada**, que é uma função do estado $|\psi\rangle$ e diferencia a incerteza entre os estados dentro de $\mathbb{H}$. A pureza é máxima no estado coerente mais próximo ao clássico, ao passo que a incerteza é mínima. Desta forma, convém denominarmos o estado coerente mais próximo ao clássico como o **estado separável generalizado**. Já o estado maximamente emaranhado tem pureza mínima e incerteza máxima.

Para uma base ortonormal da álgebra, com $k^{ij} = \delta_{ij}$, podemos reescrever a pureza como:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{su(n)} &= \sum_{i,j} k^{ij} \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle \\ &= \sum_i \langle A_i \rangle^2 \\ &= \sum_i [\text{Tr}(A_i \rho)]^2 \\ &= \sum_{i,j} \text{Tr} [\text{Tr}(A_i \rho) \text{Tr}(A_j \rho) p(A_i) p(A_j)];\end{aligned}\tag{8.2.53}$$

onde usamos que:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(A \rho) \quad \text{e} \quad \rho = |\psi\rangle\langle\psi|.\tag{8.2.54}$$

Também empregamos a seguinte relação para a representação adjunta da álgebra, segundo (8.2.7):

$$\begin{aligned}\text{Tr}(p(A_i) p(A_j)) &= k_{ij} \\ &= \delta_{ij}, \text{ no caso ortonormal.}\end{aligned}\tag{8.2.55}$$

Portanto:

$$\mathcal{P}_{su(n)}(|\psi\rangle) = \text{Tr}(\rho_{su(n)}^2).\tag{8.2.56}$$

Acima definimos o estado reduzido $\rho_{su(n)}$ como a projeção do estado ρ na representação adjunta da álgebra, ou seja:

$$\rho_{su(n)} = \sum_i \text{Tr}(A_i \rho) p(A_i).\tag{8.2.57}$$

A pureza generalizada da álgebra, escrita em (8.2.56), tem a mesma forma da pureza convencional encontrada na literatura para sistemas bipartites, mas com o traço parcial feito na álgebra. Note também que sempre podemos encontrar uma normalização tal que a pureza tenha valor de uma unidade nos estados separáveis:

$$K = \max_h \sum_k h_k^2. \quad (8.2.58)$$

Com esta normalização, temos:

$$0 \leq \mathcal{P}_{su(n)}(|\psi\rangle) \equiv \frac{1}{K} \text{Tr}(\rho_{su(n)}^2) \leq 1. \quad (8.2.59)$$

A primeira igualdade somente acontece se existe um estado em $\mathbb{H}$ que satisfaz (8.2.49').

Podemos caracterizar a projeção $\rho_{su(n)}$ como o estado reduzido na álgebra devido à seguinte identidade:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(p(A)\rho_{su(n)}) &= \text{Tr} \left[p(A) \sum_i \text{Tr}(A_i \rho) p(A_i) \right] \\ &= \sum_i \text{Tr}(A_i \rho) \sum_j a^j \text{Tr}(p(A_j) p(A_i)) \\ &= \sum_i a^i \text{Tr}(A_i \rho) \\ &= \text{Tr}(A \rho) = \langle A \rangle. \end{aligned} \quad (8.2.60)$$

Para o caso $k_{ij} = \delta_{ij}$. Então, de (8.2.60), temos que a projeção $\rho_{su(n)}$ guarda a informação de todas as médias dos operadores de $su(n)$. O operador densidade reduzido $\rho_{su(n)}$ é puro quando ρ é coerente e misto para os estados emaranhados, no conceito generalizado.

A medida de pureza generalizada não depende do particionamento do sistema ou da base escolhida para o espaço $\mathbb{H}$, apenas da álgebra escolhida para o seu cálculo, tornando esta medida mais versátil que a medida convencional. Podemos escolher a álgebra de forma a considerar automaticamente regras de superseleção ou selecionar apenas uma porção das correlações quânticas de interesse para uma determinada aplicação.

8.3 Integrabilidade e Graus de Liberdade Quânticos

Na mecânica clássica, o espaço de fase M tem dimensão igual a duas vezes o número l de graus de liberdade do sistema físico associado. Um estado clássico é definido como um ponto em M , enquanto grandezas observáveis são representadas por funções sobre este espaço. O sistema clássico autônomo de Hamiltoniana $\mathcal{H}$ é considerado integrável se existem l constantes do movimento $\mathcal{O}_i$ independentes, tais que os parênteses de Poisson entre elas sejam todos nulos:

$$\{\mathcal{O}_i, \mathcal{O}_j\} = 0; \quad i, j = 1, \dots, l. \quad (8.3.1)$$

Nesta definição, deixamos implícito que $\mathcal{H}$ é um dos $\mathcal{O}_i$, devido à conservação de energia no sistema.

Já na mecânica quântica, um estado é representado por um vetor no espaço de Hilbert, enquanto grandezas observáveis são operadores auto-adjuntos sobre estes estados. Contudo, o espaço de Hilbert não tem interpretação física semelhante ao espaço de fase, pois sua dimensão não tem relação com os graus de liberdade do sistema e no limite clássico ele não é reduzido a M . Assim, não é simples definir um conceito de integrabilidade na mecânica quântica de maneira análoga ao da mecânica clássica, tendo em vista que mesmo o conceito de número de graus de liberdade quânticos não é muito intuitivo.

Em muitos sistemas físicos, nos quais podemos desconsiderar a estrutura interna de suas partículas, é claro que o número de graus de liberdade do sistema, quantizado canonicamente, deve ser igual à soma do número de coordenadas espaciais de cada partícula. No entanto, quando levamos em conta a estrutura interna das partículas, entre outros efeitos quânticos sem equivalentes clássicos, não é mais simples contar o número total de graus de liberdade do sistema. Como exemplo, temos o modelo do condensado em poço triplo, onde vimos que o espaço de fase associado ao sistema é apenas quadridimensional, devido ao princípio de simetrização e à dimensão do espaço de Hilbert de partícula única, independentemente do valor de N . Logo, neste modelo o número de graus de liberdade não é intuitivo, mesmo desconsiderando os graus de liberdade internos dos bósons.

Portanto, é importante formalizar o conceito de graus de liberdade para sistemas quânticos e, conseqüentemente, também estender conceitos como integrabilidade e caos à mecânica quântica.

Considere um sistema quântico com espaço de Hilbert $\mathbb{H}$. Dizemos que este sistema tem grupo dinâmico G se seu Hamiltoniano H e todos seus operadores de transição T podem ser escritos como funções dos r geradores $\{A_i\}$ do grupo:

$$H(A_i) \text{ e } T(A_i) \rightarrow G \text{ é grupo dinâmico.} \quad (8.3.2)$$

Como já vimos, $\{A_i\}$ é uma base da álgebra real $\mathfrak{L}_G$, r -dimensional. Por simplicidade, vamos supor que $\mathbb{H}$ carrega uma representação irredutível de G . Podemos também assumir que existem v cadeias ς^i de subgrupos associadas ao grupo dinâmico, cada uma de tamanho s_i :

$$G \supset \begin{cases} (G_{s_1}^1 \supset G_{s_1-1}^1 \supset \dots \supset G_1^1) \equiv \varsigma^1; \\ (G_{s_2}^2 \supset G_{s_2-1}^2 \supset \dots \supset G_1^2) \equiv \varsigma^2; \\ \vdots \\ (G_{s_v}^v \supset G_{s_v-1}^v \supset \dots \supset G_1^v) \equiv \varsigma^v. \end{cases} \quad (8.3.3)$$

O espaço $\mathbb{H}$ é caracterizado por um conjunto completo de observáveis comutantes $\mathfrak{C}$, ou CCOC, formado de observáveis básicos independentes do sistema e excluindo, por conveniência, o Hamiltoniano H , de maneira que a definição do CCOC dependa apenas da estrutura de $\mathbb{H}$ e não de uma dinâmica específica:

$$\mathfrak{C} = \{O_i, \text{ tal que } [O_i, O_j] = 0, \text{ para } i, j = 1, \dots, m\}. \quad (8.3.4)$$

Os elementos de uma base $\{|\vec{\alpha}\rangle\}$ de $\mathbb{H}$ podem ser especificados pelos autovalores dos l componentes não completamente degenerados (NCD) de $\mathfrak{C}$:

$$O_i|\vec{\alpha}\rangle = \alpha_i|\vec{\alpha}\rangle; \quad i = 1, \dots, l. \quad (8.3.5)$$

Dado que um operador completamente degenerado de $\mathfrak{C}$ é definido por:

$$O_i|\psi\rangle = c|\psi\rangle; \quad \forall |\psi\rangle \in \mathbb{H}, \quad i = l+1, \dots, m. \quad (8.3.6)$$

Portanto, os operadores completamente degenerados são múltiplos da identidade por uma constante, dentro de uma representação irredutível de G . Como suas médias são constantes no tempo, estes observáveis não possuem informação dinâmica e devem ser excluídos da definição dos graus de liberdade quânticos, pois devem representar constantes quando transferidos ao espaço de fase clássico associado.

Enfim, definimos o número de **graus de liberdade quântico-dinâmicos** (GLQD) como o número l de autovalores, conhecidos como números quânticos, necessários para especificar um estado da base

de $\mathbb{H}$, relacionados aos $l \leq m$ componentes NCD de $\mathfrak{C}$. Note que esta definição é única, inclui os graus de liberdade internos do sistema e depende apenas da estrutura do espaço de Hilbert.

Desejamos que a definição dos GLQD seja consistente com os graus de liberdade clássicos. A correspondência é clara novamente no exemplo de partículas sem estrutura interna, pois quando quantizamos as variáveis clássicas de posição das partículas, obtemos o conjunto dos operadores de posição, que forma um CCOC com todos elementos NCD. Sabemos que os autovalores destes operadores determinam um vetor da base de posição em $\mathbb{H}$. Portanto, neste caso o número de GLQD coincide com o número de graus de liberdade clássicos.

Podemos agora definir a **integrabilidade quântica**, considerando integrável o sistema se, e somente se, um elemento da base de $\mathbb{H}$ pode ser especificado pelos autovalores de l , igual ao número de GLQD, operadores O'_j observáveis, comutantes, NCD e constantes de movimento, no sentido da equação de Heisenberg. Note que nesta definição, diferentemente da definição de CCOC, permitimos que H seja um dos O'_j :

$$i \frac{dO'_j}{dt} = [O'_j, H] = 0 \quad \text{e} \quad [O'_j, O'_k] = 0; \quad j, k = 1, \dots, l \quad \longleftrightarrow \quad \text{Sistema quântico integrável.} \quad (8.3.7)$$

Sempre que o sistema é integrável podemos encontrar um CCOC que especifica uma base de $\mathbb{H}$ na qual a representação de H é diagonal. Logo, podemos medir l quantidades independentes simultaneamente na base de energia, diferentemente de um sistema não integrável, onde esta medida em estados estacionários não é possível.

O sistema quântico com grupo dinâmico G tem **simetria dinâmica** em G se o Hamiltoniano pode ser expresso em termos dos operadores Casimir de alguma cadeia ς^i de subgrupos:

$$H = H(C_{j(k)}^i); \quad \text{para } i \text{ fixo, } j = 1, \dots, s_i \text{ e } k = 1, \dots, \lambda_j^i; \quad (8.3.8)$$

onde $C_{j(k)}^i$ é o k -ésimo Casimir do subgrupo G_j^i da cadeia ς^i . A quantidade λ_j^i é a ordem da álgebra $\mathfrak{L}_{G_j^i}$ associada a G_j^i , definida como o número de operadores Casimir independentes desta álgebra ou, equivalentemente, como a dimensão da subálgebra comutativa máxima de $\mathfrak{L}_{G_j^i}$. A definição de simetria dinâmica leva ao seguinte teorema:

Teorema 8.3.1. *Um sistema quântico de grupo dinâmico G e simetria dinâmica neste grupo é integrável.*

Provamos este teorema notando que podemos construir um CCOC de cada cadeia ς^i de subgrupos, denominado $\mathfrak{C}^i$, composto dos operadores Casimir $\{C_{(k)}\}$ de G e dos operadores Casimir $\{C_{j(k)}^i\}$ dos subgrupos da cadeia, pois estes operadores são construídos de maneira que o comutador de qualquer par escolhido entre eles é nulo. Dizemos que a cadeia ς^i é canônica se os operadores $\{C_{(k)}\}$ e $\{C_{j(k)}^i\}$ são suficientes para formar $\mathfrak{C}^i$. No entanto, se estes não forem suficientes, podemos sempre encontrar outros operadores $\{\tilde{O}_k\}$, que comutam entre si e com os operadores Casimir do grupo e da cadeia, para completar os m operadores necessários de um CCOC no caso de ς^i não canônica:

$$\mathfrak{C}^i \equiv \{O_\nu; \nu = 1, \dots, m\} = \begin{cases} \{C_{(k)}\} \cup \{C_{\alpha(\beta)}^\mu\}, & \text{se } \varsigma^i \text{ canônica;} \\ \{C_{(k)}\} \cup \{C_{\alpha(\beta)}^\mu\} \cup \{\tilde{O}_\tau\}, & \text{se } \varsigma^i \text{ não canônica.} \end{cases} \quad (8.3.9)$$

Então, podemos especificar um elemento da base de $\mathbb{H}$ com os autovalores de l operadores NCD de $\mathfrak{C}^i$. Se o sistema tem simetria dinâmica em G , considerando (8.3.8) e (8.3.9), temos:

$$[H(C_{j(k)}^i), O_\nu] = 0; \quad \nu = 1, \dots, m. \quad (8.3.10)$$

Logo, existem pelo menos l operadores comutantes, NCD, independentes e constantes de movimento. Deste modo, o sistema é integrável. Conforme o teorema 8.3.1, vemos também que a não integrabilidade implica na quebra da simetria dinâmica do sistema.

Agora, definimos o conjunto $\mathcal{E} = \{X_i\}$ de **excitações elementares**, constituído do número mínimo de operadores sobre $\mathbb{H}$ tais que:

$$|\psi\rangle = F(X_i)|\Phi_0\rangle, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathbb{H}; \quad (8.3.11)$$

onde $F(X_i)$ é um polinômio nos operadores X_i de excitações elementares e $|\Phi_0\rangle \in \mathbb{H}$ é um estado de referência escolhido de forma que o número de elementos em $\mathcal{E}$ é mínimo. Comparando com os resultados mostrados na seção 4.1, para o caso detalhado de $SU(3)$, e na seção 8.2, para o caso geral de $SU(n)$, vemos que os operadores X_i são justamente os operadores de abaixamento E_{ij} , escolhidos tais que $i < j$, que não aniquilam o estado de referência, selecionado como o estado de máximo peso de uma representação irredutível de $su(n)$.

O número de operadores de abaixamento associados à álgebra r -dimensional $su(n)$ é $\frac{r-\lambda}{2}$, onde λ é a ordem da álgebra^{8.9}. Em geral, o número de operadores de abaixamento que produzem resultado não nulo quando aplicados ao estado de máximo peso é igual ao número de índices necessários para especificar um estado na base de $\mathbb{H}$. Portanto, o número de operadores de excitações elementares é igual ao número de operadores NCD em um CCOC de $\mathbb{H}$ e, por definição, também é idêntico aos $l \leq \frac{r-\lambda}{2}$ GLQD do sistema.

Novamente nos referindo à seção 4.1, onde tratamos do caso das representações irredutíveis totalmente simétricas da álgebra $su(3)$, temos que os elementos da base $\{|n_1, n_2, n_3 = N - n_1 - n_2\rangle\}$ precisam de apenas dois índices independentes para a sua especificação. Todos os estados desta base podem ser obtidos por sucessiva aplicação dos dois operadores de abaixamento E_{13} e E_{23} no estado de máximo peso $|0, 0, N\rangle$, pois para o terceiro operador de abaixamento temos $E_{12}|0, 0, N\rangle = 0$. Então, para as representações γ^N de $su(3)$, o conjunto de excitações elementares é $\mathcal{E} = \{E_{13}, E_{23}\}$, composto justamente pelos dois operadores que, juntamente com seus adjuntos, aparecem na parametrização exponencial do elemento Θ do espaço quociente $SU(3)/U(2)$, em (4.1.23), e na definição do estado coerente, em (4.1.24). A dimensão do espaço de fase M , obtido para o análogo clássico do modelo de três modos, é o número de variáveis reais necessárias para parametrizar o espaço topologicamente equivalente $SU(3)/U(2)$. Então, a partir de (4.1.24), vemos que esta dimensão é 4 e, portanto, o número de graus de liberdade da analogia clássica é 2, metade da dimensão de M e justamente o número de elementos em $\mathcal{E}$.

Como também explicado na seção 8.2, de maneira geral, a base da álgebra r -dimensional $su(n)$ pode ser dividida em $\lambda = n - 1$ operadores H_k , que geram a subálgebra comutativa máxima, e outros $r - \lambda$ operadores que são combinações lineares Hermitianas dos operadores de abaixamento e levantamento E_{ij} , com $i \neq j$. Se escolhermos o estado de referência como o estado de máximo peso $|\vec{h}_M\rangle$ da representação irredutível de $su(n)$ que age sobre $\mathbb{H}$, então o estado coerente desta representação é gerado pelos l operadores de abaixamento que não aniquilam $|\vec{h}_M\rangle$, acompanhados de seus operadores adjuntos, pois os outros operadores são facilmente vistos como pertencentes ao grupo de estabilidade do estado de referência:

^{8.9}Lembrando que $r = n^2 - 1$.

$$|\mathbb{H}; \Theta\rangle \equiv \exp \left[\sum'_{i>j} (\theta_{ij} E_{ij} - \theta_{ij}^* E_{ji}) \right] |\vec{h}_M\rangle; \quad (8.3.12)$$

onde a soma $\sum'_{i>j}$ é feita somente sobre os operadores tais que $E_{ij}|\vec{h}_M\rangle \neq 0$. Logo, o estado coerente é parametrizado por l , igual ao número de excitações elementares e também ao número de GLQD, coeficientes complexos θ_{ij} . O espaço de fase, topologicamente equivalente ao grupo de estabilidade de $|\vec{h}_M\rangle$, tem $2l$ dimensões, como esperado.

Esta comparação com resultados de outras seções nos leva a definição do espaço de fase de um sistema quântico como o espaço de fase do análogo clássico. Ou seja, o **espaço de fase quântico** M de um sistema, cujo número de GLQD é igual a l , é definido como o espaço isomorfo ao espaço quociente G/S , onde G é o grupo dinâmico do sistema e S é o subgrupo de estabilidade máximo de $\mathbb{H}$. Escolher o subgrupo S máximo equivale a escolher o estado de referência em $\mathbb{H}$ de forma que o conjunto de excitações elementares é mínimo.

Como resultado da última definição, temos que $\dim M = 2l$. Logo, o número de GLQD é uma propriedade fundamental do sistema quântico, que determina de maneira única a dimensão do espaço de fase.

Definir o espaço de fase quântico como o mesmo do análogo clássico torna consistentes os conceitos de integrabilidade quântica e clássica. Por exemplo, no caso em que $SU(3)$ é o grupo dinâmico do sistema, vimos que as médias dos observáveis são fatoradas no limite clássico exato $N \rightarrow \infty$. Em geral, de acordo com (4.3.24), a média nos estados coerentes de um observável $O'_j(A_k)$, escrito em termos dos operadores $\{A_k\}$ da base de $su(3)$, tem o seguinte limite clássico:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle N; \vec{w} | O'_j(A_k) | N; \vec{w} \rangle = O'_j(\langle N; \vec{w} | A_k | N; \vec{w} \rangle) = O'_j(\mathcal{A}_k(\vec{w}^*, \vec{w})). \quad (8.3.13)$$

Ainda considerando apenas as representações totalmente simétricas de $SU(3)$, se $\{O'_j(A_k)\}$ é um conjunto de $l = 2$ observáveis NCD, comutantes e constantes do movimento, então o sistema quântico é integrável. Portanto, em cálculo semelhante a (4.3.29), podemos mostrar que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle N; \vec{w} | [O'_j(A_k), O'_m(A_k)] | N; \vec{w} \rangle = i \{O'_j(\mathcal{A}_k), O'_m(\mathcal{A}_k)\} = 0; \quad j, m = 1, 2. \quad (8.3.14)$$

Logo, os parênteses de Poisson entre as funções sobre o espaço de fase, obtidas dos limites clássicos das constantes de movimento quânticas, são nulos e, segundo (8.3.1), o sistema clássico associado também é integrável.

Por fim, suponha que, em um sistema quântico de grupo dinâmico G no espaço de Hilbert $\mathbb{H}$, o Hamiltoniano H tenha simetria dada por $R \in G$:

$$RHR^{-1} = H. \quad (8.3.15)$$

Então, de acordo com a definição de estado coerente (4.1.7), a representação de H no espaço de fase tem a mesma simetria:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}(\Theta) &= \langle \mathbb{H}; \Theta | H | \mathbb{H}; \Theta \rangle = \langle \mathbb{H}; \Theta | R H R^{-1} | \mathbb{H}; \Theta \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | \Theta^\dagger R H R^{-1} \Theta | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | s^{-1} \Theta'^\dagger H \Theta' s | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \mathbb{H}; \Theta' | H | \mathbb{H}; \Theta' \rangle = \mathcal{H}(\Theta');
\end{aligned} \tag{8.3.16}$$

onde utilizamos a decomposição (4.1.6) do elemento $R^{-1}\Theta = \Theta's \in G$, com $s \in S$ e $\Theta' \in G/S$. Assim, vemos que a Hamiltoniana fica invariante se suas variáveis são transformadas pela ação da simetria R . Portanto, o conceito de simetria quântica é consistente com o clássico.

Com o conceito de integrabilidade quântica bem fundamentado, podemos facilmente estender também a idéia clássica de caos. Então, dizemos que um sistema apresenta **caos quântico** se seu análogo clássico apresenta caos no sentido usual. Note que os graus de liberdade internos do sistema, assim como outros fenômenos sem correspondentes clássicos, também são considerados nesta definição de caos quântico.

8.4 Álgebras de Lie e Estrutura Simplética

Seja $\{A_1, A_2, \dots, A_r\}$ uma base da álgebra de Lie real $\mathfrak{L}_G$ do grupo de Lie G , por definição, temos:

$$\mathfrak{L}_G = \{A, \text{ tal que } A = \sum_{i=1}^r \alpha^i A_i; \alpha^i \in \mathbb{R}\}. \tag{8.4.1}$$

A álgebra $\mathfrak{L}_G$ é fechada pela operação bilinear de comutação. Para os elementos da base, temos as seguintes relações:

$$[A_i, A_j] = -[A_j, A_i] = \sum_k c_{ij}^k A_k. \tag{8.4.2}$$

As constantes c_{ij}^k são os fatores de estrutura da álgebra. Da definição de álgebra de Lie, podemos obter um elemento de G , o grupo associado a $\mathfrak{L}_G$, pelo mapa exponencial^{8.10}:

$$\exp(tA) \in G, \text{ para todo } t \in \mathbb{R}. \tag{8.4.3}$$

A operação de comutação também satisfaz a identidade de Jacobi para elementos de $\mathfrak{L}_G$:

$$[A, [A', A'']] + [A', [A'', A]] + [A'', [A, A']] = 0 \tag{8.4.4}$$

Utilizando os fatores de estrutura, podemos escrever a relação de comutação entre dois elementos arbitrários de $\mathfrak{L}_G$:

$$[A', A''] = \sum_{i,j,k} \alpha'^i \alpha''^j c_{ij}^k A_k = A \in \mathfrak{L}_G. \tag{8.4.5}$$

^{8.10}Nesta seção, diferentemente do restante deste trabalho, usamos por conveniência a definição “dos matemáticos” para álgebra de Lie, que difere da “notação dos físicos” por um fator i . Isto é, em vez de $\exp(tA) \in G$, os físicos geralmente usam $\exp(itA) \in G$, com $A \in \mathfrak{L}_G$.

O espaço dual a $\mathfrak{L}_G$ é o espaço de todas funções lineares sobre $\mathfrak{L}_G$, denotado por $\mathfrak{L}_G^*$. Uma base conveniente de $\mathfrak{L}_G^*$ é dada por:

$$B^j : A = \sum_{i=1}^r \alpha^i A_i \rightarrow B^j(A) = \alpha^j \in \mathbb{R}, \text{ para } j = 1, \dots, r. \quad (8.4.6)$$

Então, para um elemento B qualquer de $\mathfrak{L}_G^*$, podemos escrever:

$$B = \sum_{i=1}^r \beta_i B^i \rightarrow B(A) = \sum_i \beta_i \alpha^i. \quad (8.4.7)$$

Agora, considere os espaços de funções lineares e de funções arbitrárias sobre $\mathfrak{L}_G^*$, que denominamos por $\mathfrak{L}_G^{**}$ e $\mathcal{F}$, respectivamente. O espaço $\mathfrak{L}_G^{**}$ é isomorfo a $\mathfrak{L}_G$ e podemos escrevê-lo como:

$$\mathfrak{L}_G^{**} = \{\mathcal{A}, \text{ tal que } \mathcal{A} = \sum_{i=1}^r \alpha^i A_i; \alpha^i \in \mathbb{R}\}. \quad (8.4.8)$$

O conjunto $\{A_i\}$ ($i = 1, \dots, r$) forma uma base de $\mathfrak{L}_G^{**}$, tal que:

$$\mathcal{A}(B) = \sum_{i=1}^r \alpha^i A_i(B), \text{ com } A_i(B) = \beta_i. \quad (8.4.9)$$

Para um par de funções $F_1, F_2 \in \mathcal{F}$, definimos a forma simplética natural da álgebra $\mathfrak{L}_G$:

$$\{F_1, F_2\}_{\vec{\beta}} = \sum_{i,j=1}^r \frac{\partial F_1}{\partial \beta_i} \mathcal{M}_{ij} \frac{\partial F_2}{\partial \beta_j}, \text{ com } \mathcal{M}_{ij}(\vec{\beta}) \equiv \sum_{k=1}^r c_{ij}^k \beta_k; \quad (8.4.10)$$

onde $\vec{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_r)^T$ é o conjunto de coordenadas que parametriza naturalmente um elemento B no espaço $\mathfrak{L}_G^*$.

A operação $\{.,.\}$ reproduz as relações de comutação (8.4.2) no espaço $\mathfrak{L}_G^{**}$, ou seja:

$$\begin{aligned} \{A_i, A_j\}_{\vec{\beta}} &= \sum_{k,m} \frac{\partial A_i(B)}{\partial \beta_k} \sum_n c_{km}^n \beta_n \frac{\partial A_j(B)}{\partial \beta_m} \\ &= \sum_n c_{ij}^n \beta_n = \sum_n c_{ij}^n A_n(B). \end{aligned} \quad (8.4.11)$$

Agora, tomamos a aplicação adjunta de G como a ação deste grupo sobre $\mathfrak{L}_G$, definida como:

$$Ad_g A \equiv g A g^{-1}, \text{ para } g \in G \text{ e } A \in \mathfrak{L}_G. \quad (8.4.12)$$

Considerando (8.4.3), mostramos que $Ad_g A \in \mathfrak{L}_G$:

$$e^{t Ad_g A} = e^{t g A g^{-1}} = g e^{t A} g^{-1} \in G \therefore Ad_g A \in \mathfrak{L}_G. \quad (8.4.13)$$

Se a operação adjunta do grupo sobre a álgebra produz outro elemento da álgebra, então podemos escrevê-lo como uma combinação linear dos elementos da base $\{A_i\}$, definindo a representação adjunta $d(g)$ do grupo:

$$Ad_g A_i = \sum_j A_j d_{ji}(g). \quad (8.4.14)$$

Ou, de forma geral, para qualquer elemento de $\mathfrak{L}_G$:

$$Ad_g A = \sum_{i,j} \alpha^i A_j d_{ji}(g). \quad (8.4.14')$$

Então, sob a aplicação do grupo, as coordenadas de um elemento de $\mathfrak{L}_G$ se transformam como:

$$\alpha^i \xrightarrow{g} \sum_j \alpha^j d_{ij}(g). \quad (8.4.15)$$

Podemos ver facilmente que $d(g)$ é realmente uma representação, no sentido que possui as propriedades de um homomorfismo:

$$\begin{aligned} (gg') A_i (gg')^{-1} &= \sum_j A_j d_{ji}(gg'); \\ gg' A_i g'^{-1} g^{-1} &= \sum_{j,k} A_k d_{kj}(g) d_{ji}(g') \quad \therefore d(gg') = d(g) d(g'). \end{aligned} \quad (8.4.16)$$

A representação coadjunta de G é definida como a inversa da transposta da representação adjunta:

$$\hat{d}(g) \equiv d^T(g^{-1}). \quad (8.4.17)$$

A esta representação associamos a ação de G sobre $\mathfrak{L}_G^*$:

$$B^j \xrightarrow{g} \sum_k B^k \hat{d}_{kj}(g). \quad (8.4.18)$$

Ou, para um elemento qualquer de $\mathfrak{L}_G^*$:

$$B = \sum_j \beta_j B^j \xrightarrow{g} \sum_{j,k} \beta_j B^k \hat{d}_{kj}(g). \quad (8.4.18')$$

Então, sob a ação de G , as coordenadas de um vetor no espaço $\mathfrak{L}_G^*$ se transformam como:

$$\beta_i \xrightarrow{g} \sum_j \beta_j \hat{d}_{ij}(g); \quad (8.4.19)$$

que também tomamos como a ação do grupo sobre o espaço $\mathfrak{L}_G^*$. Por fim, definimos a ação de G sobre $\mathcal{F}$ da seguinte forma:

$$(T_g F)(\vec{\beta}) = F(\vec{\beta}_{g^{-1}}). \quad (8.4.20)$$

Aqui introduzimos a notação:

$$\vec{\beta}_{g^{-1}} \equiv \hat{d}(g^{-1}) \vec{\beta}. \quad (8.4.21)$$

Note que estamos representando o elemento de $\mathfrak{L}_G^*$, sobre o qual age $F(\vec{\beta})$, por suas coordenadas $\vec{\beta}$ na base definida em (8.4.6).

Para um elemento $g \in G$ temos, em particular, a parametrização exponencial:

$$g = \exp \left(\sum_j \tau^j A_j \right), \text{ com } \tau^j \in \mathbb{R}. \quad (8.4.22)$$

A ação adjunta do grupo assume a seguinte forma quando utilizamos esta parametrização:

$$\begin{aligned} Ad_g A &= \exp \left(\sum_j \tau^j A_j \right) A \exp \left(- \sum_k \tau^k A_k \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\sum_j \tau^j A_j, A]_{(n)}. \end{aligned} \quad (8.4.23)$$

Empregando a notação:

$$[A, A']_{(n)} = \underbrace{[[\dots [A, [A, A']] \dots]]}_{n \text{ comutadores}}. \quad (8.4.24)$$

Considerando a correspondência entre as operações $[\cdot, \cdot]$, de (8.4.2), e $\{\cdot, \cdot\}$, de (8.4.11), definidas respectivamente nos espaços isomorfos $\mathfrak{L}_G$ e $\mathfrak{L}_G^{**}$, temos claramente que:

$$Ad_g A_i = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\sum_j \tau^j A_j, A_i]_{(n)} = \sum_j A_j d_{ji}(g); \quad (8.4.25)$$

corresponde a:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \{ \sum_j \tau^j A_j, A_i \}_{(n)} = \sum_j A_j d_{ji}(g). \quad (8.4.26)$$

A notação $\{\cdot, \cdot\}_{(n)}$ é análoga a (8.4.24).

Então, podemos mostrar que a ação T_g do grupo sobre $\mathfrak{L}_G^{**}$ corresponde à ação de Ad_g sobre $\mathfrak{L}_G$:

$$\begin{aligned} (T_g A_i)(\vec{\beta}) &= A_i(\vec{\beta}_{g^{-1}}) = (\vec{\beta}_{g^{-1}})_i \\ &= \sum_j \beta_j \hat{d}_{ij}(g^{-1}) \\ &= \sum_j A_j(\vec{\beta}) d_{ji}(g). \end{aligned} \quad (8.4.27)$$

A última equação é a correspondente em $\mathfrak{L}_G^{**}$ a (8.4.14). Ainda mais, comparando (8.4.26) e (8.4.27), temos:

$$(T_g A_i)(\vec{\beta}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \{ \sum_{j=1}^r \tau^j A_j(\vec{\beta}), A_i(\vec{\beta}) \}_{(n)}. \quad (8.4.28)$$

Assim, concluímos a correspondência entre Ad_g e T_g nos espaços $\mathfrak{L}_G$ e $\mathfrak{L}_G^{**}$, respectivamente.

Mostramos agora que os geradores A_j de $\mathfrak{L}_G^{**}$ são responsáveis também pela ação simplética de G em $\mathcal{F}$. Primeiramente, usando (8.4.28), escrevemos:

$$\begin{aligned}
(T_g \mathcal{A}_i)(\vec{\beta}) &= (\vec{\beta}_{g^{-1}})_i = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{ \sum_j \tau^j \mathcal{A}_j(\vec{\beta}), \mathcal{A}_i(\vec{\beta}) \right\}_{(n)} \\
&= \mathcal{A}_i(\vec{\beta}) + \sum_{j,k} \tau^j c_{ji}^k \mathcal{A}_k(\vec{\beta}) + \frac{1}{2} \sum_{j,k,m,n} \tau^j c_{ji}^k \tau^m c_{mk}^n \mathcal{A}_n(\vec{\beta}) + \dots \\
&= \beta_i + \sum_{j,k} \tau^j c_{ji}^k \beta_k + \frac{1}{2} \sum_{j,k,m,n} \tau^j c_{ji}^k \tau^m c_{mk}^n \beta_n + \dots \\
&\equiv \beta_i + \sum_k Q_{ki} \beta_k + \frac{1}{2} \sum_{k,n} Q_{ki} Q_{nk} \beta_n + \dots \\
&= \sum_k \beta_k [\exp(Q)]_{ki}.
\end{aligned} \tag{8.4.29}$$

Aqui definimos:

$$Q_{ij} \equiv \sum_k \tau^k c_{kj}^i. \tag{8.4.30}$$

Comparando (8.4.27) com (8.4.29), obtemos:

$$d_{ki}(g) = \hat{d}_{ik}(g^{-1}) = [\exp(Q)]_{ki}. \tag{8.4.31}$$

Devido à linearidade da transformação de $\vec{\beta}$ sob G , podemos escrever:

$$\begin{aligned}
(T_g F)(\vec{\beta}) &= F(\vec{\beta}_{g^{-1}}) = \exp \left[\sum_{i,j} \beta_j Q_{ji} \frac{\partial}{\partial \beta_i} \right] F(\vec{\beta}) \\
&= F(\vec{\beta}) + \sum_{i,j,k} \tau^k c_{ki}^j \beta_j \frac{\partial F(\vec{\beta})}{\partial \beta_i} + \dots \\
&= F(\vec{\beta}) + \sum_{i,k,m} \tau^m \frac{\partial \mathcal{A}_m(\vec{\beta})}{\partial \beta_k} \mathcal{M}_{ki} \frac{\partial F(\vec{\beta})}{\partial \beta_i} + \dots \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{ \sum_i \tau^i \mathcal{A}_i(\vec{\beta}), F(\vec{\beta}) \right\}_{(n)};
\end{aligned} \tag{8.4.32}$$

onde usamos a definição dos parênteses $\{.,.\}$, encontrada em (8.4.10), e a identidade para transformações lineares de argumentos de funções:

$$f(\vec{y}) = f(\vec{x}^T M) = \exp \left\{ \sum_{i,j} x_i [\ln(M)]_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \right\} f(\vec{x}). \tag{8.4.33}$$

Logo, considerando (8.4.32), temos que a base de funções lineares sobre $\mathfrak{L}_G^*$, dada pelos $\mathcal{A}_i$, gera a ação simplética de G sobre $\mathcal{F}$, obtida da ação da representação coadjunta sobre as coordenadas $\vec{\beta}$.

A métrica invariante de $\mathfrak{L}_G$, já encontrada na seção 8.2 com a “notação dos físicos”, é definida como:

$$k_{ij} \equiv \sum_{k,m} c_{im}^k c_{jk}^m. \tag{8.2.8'}$$

Assumindo que k pode ser invertida, o que acontece para as álgebras ditas semi-simples, podemos definir o operador invariante conhecido como Casimir quadrático:

$$C_{(2)} = \sum_{ij} k_{ij}^{-1} A_i A_j; \quad (8.2.17)$$

tal que:

$$[C_{(2)}, A] = 0, \quad \forall A \in \mathfrak{L}_G. \quad (8.2.18)$$

Então, para g dado por (8.4.22), temos:

$$\begin{aligned} Ad_g C_{(2)} &= g C_{(2)} g^{-1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\sum_j \tau^j A_j, C_{(2)}]_{(n)} = C_{(2)} \\ &= \sum_{i,j} k_{ij}^{-1} g A_i g^{-1} g A_j g^{-1} \\ &= \sum_{i,j,k,m} k_{ij}^{-1} A_k d_{ki}(g) A_m d_{mj}(g). \end{aligned} \quad (8.4.34)$$

Comparando (8.4.34) com (8.2.17), obtemos:

$$\begin{aligned} k^{-1} &= d(g) k^{-1} d^T(g) \quad \text{ou} \\ \hat{d}(g) &= k d(g) k^{-1}. \end{aligned} \quad (8.4.35)$$

Esta relação entre as representações adjunta e coadjunta, quando k é inversível, nos possibilita identificar os espaços vetoriais $\mathfrak{L}_G$ e $\mathfrak{L}_G^*$ de forma compatível com a ação de G sobre estes espaços. Assim, podemos identificar as coordenadas $\vec{\beta}$ de um elemento de $\mathfrak{L}_G^*$ com as coordenadas $\vec{\alpha}$ de um elemento de $\mathfrak{L}_G$ da seguinte forma:

$$\vec{\beta} = k \vec{\alpha}. \quad (8.4.36)$$

Sob a ação de G , $\vec{\beta}$ se transforma segundo (8.4.19). Utilizando esta equação juntamente com (8.4.36), temos:

$$\begin{aligned} \vec{\beta}_g &= \hat{d}(g) \vec{\beta} = (k d(g) k^{-1}) \vec{\beta} \\ &= k d(g) (k^{-1} \vec{\beta}) = k (d(g) \vec{\alpha}) = k \vec{\alpha}_g. \end{aligned} \quad (8.4.37)$$

Identidade consistente com a relação (8.4.15).

A órbita de um ponto de referência $\vec{\alpha}_0$ no espaço $\mathfrak{L}_G$ é o espaço de todos os pontos obtidos de $\vec{\alpha}_0$ pela ação do grupo G , ou seja:

$$\gamma(\vec{\alpha}_0) \equiv \{\vec{\alpha}, \text{ tal que } \vec{\alpha} = d(g) \vec{\alpha}_0, \quad g \in G\}. \quad (8.4.38)$$

O mesmo conceito pode ser estendido para as órbitas em $\mathfrak{L}_G^*$ sob a ação da representação coadjunta:

$$\gamma^*(\vec{\beta}_0) \equiv \{\vec{\beta}, \text{ tal que } \vec{\beta} = \hat{d}(g)\vec{\beta}_0, g \in G\}. \quad (8.4.39)$$

Chamamos de grupo de estabilidade H em $\mathfrak{L}_g$, associado ao ponto de referência $\vec{\alpha}_0$, o subgrupo de G tal que:

$$H \equiv \{h, \text{ tal que } \vec{\alpha}_0 = d(h)\vec{\alpha}_0, h \in G\}. \quad (8.4.40)$$

Ou seja, o grupo de estabilidade é o subgrupo de ações de G que deixa o ponto de referência invariante. Novamente, o conceito de grupo de estabilidade pode ser estendido para uma órbita em $\mathfrak{L}_g^*$:

$$H^* \equiv \{h^*, \text{ tal que } \vec{\beta}_0 = \hat{d}(h^*)\vec{\beta}_0, h^* \in G\}. \quad (8.4.41)$$

Para todo elemento $g \in G$ há uma única decomposição de g no produto de dois elementos do grupo, sendo que um pertence a um subgrupo, por exemplo $h \in H$ ($h^* \in H^*$), e o outro pertence ao subconjunto de G chamado espaço quociente, denotado por G/H (G/H^*). Então, podemos escrever:

$$\begin{aligned} g &= ch, \quad g \in G, h \in H, c \in G/H \quad \text{ou} \\ g &= c^*h^*, \quad g \in G, h^* \in H^*, c^* \in G/H^*. \end{aligned} \quad (8.4.42)$$

Colocando a decomposição (8.4.42) na definição de órbita (8.4.38) e utilizando a propriedade (8.4.40) de definição de H , temos:

$$\begin{aligned} \gamma(\vec{\alpha}_0) &= \{\vec{\alpha} \mid \vec{\alpha} = d(c)d(h)\vec{\alpha}_0; c \in G/H, h \in H\} \\ &= \{\vec{\alpha} \mid \vec{\alpha} = d(c)\vec{\alpha}_0; c \in G/H\}. \end{aligned} \quad (8.4.43)$$

Portanto, uma órbita em $\mathfrak{L}_G$ é definida por seu ponto de referência $\vec{\alpha}_0$, que por sua vez está associado a um grupo de estabilidade H . Desta forma, a órbita equivale a ação do espaço quociente G/H sobre $\vec{\alpha}_0$ e pode ser parametrizada por meio do elemento $c \in G/H$. Raciocínio análogo pode ser feito para $\gamma^*(\vec{\beta}_0)$, empregando H^* e G/H^* , na construção de órbitas em $\mathfrak{L}_G^*$.

Se dois pontos de referência, não necessariamente ligados por uma transformação do grupo, têm o mesmo subgrupo de estabilidade, então suas órbitas são topologicamente idênticas, pois são parametrizadas pelo mesmo espaço quociente.

Como há uma correspondência um para um entre os pontos de uma órbita e os elementos do espaço quociente, convém estendermos a denominação de órbita em $\mathfrak{L}_G$ ($\mathfrak{L}_G^*$) a G/H (G/H^*).

Agora, vamos mostrar que órbitas definidas em $\mathfrak{L}_G$ e $\mathfrak{L}_G^*$, associadas respectivamente aos pontos de referência $\vec{\alpha}_0$ e $\vec{\beta}_0$ conectados por (8.4.36), são equivalentes, uma vez que possuem mesmo grupo de estabilidade. Empregando a definição de grupo de estabilidade:

$$\vec{\alpha}_0 = d(h)\vec{\alpha}_0, \quad \forall h \in H; \quad (8.4.44)$$

Então, usando (8.4.35):

$$\begin{aligned} \hat{d}(h)\vec{\beta}_0 &= k d(h) k^{-1} k \vec{\alpha}_0 \\ &= k \vec{\alpha}_0 = \vec{\beta}_0 \quad \therefore h \in H^*. \end{aligned} \quad (8.4.45)$$

Podemos partir de um elemento h^* de H^* e por processo semelhante mostrar que todo h^* também pertence a H . Logo, concluímos que $H = H^*$, se $\vec{\beta}_0 = k\vec{\alpha}_0$. Portanto, órbitas em $\mathfrak{L}_G$ e $\mathfrak{L}_G^*$ são equivalentes.

Para resumir o que obtivemos até aqui, lembremos da definição de classe de um grupo:

$$\mathfrak{C}_{g_0} \equiv \{g' \mid g' = gg_0g^{-1}, \text{ para algum } g \in G\}; \quad (8.4.46)$$

onde a classe $\mathfrak{C}_{g_0}$ tem como elemento de referência g_0 , cuja parametrização exponencial é dada por:

$$g_0 = \exp(A_0) = \exp\left(\sum_{i=1}^r \alpha_0^i A_i\right). \quad (8.4.47)$$

Então, os elementos da classe de g_0 são dados por:

$$\begin{aligned} gg_0g^{-1} &= \exp(gA_0g^{-1}) = \exp(Ad_g A_0) \\ &= \exp\left(\sum_{i,j} \alpha_0^i d_{ji}(g) A_j\right) \\ &= \exp\left(\sum_{i,j} \alpha_0^i d_{ji}(c) A_j\right) \\ &= \exp(Ad_c A_0). \end{aligned} \quad (8.4.48)$$

Em (8.4.48) usamos que o ponto $\vec{\alpha}_0$ parametriza g_0 , com grupo de estabilidade H , e consideramos $c \in G/H$. Logo, os elementos da classe $\mathfrak{C}_{g_0}$ são parametrizados pelos pontos da órbita de $\vec{\alpha}_0$; ou seja, pelos elementos de G/H . Fica evidente, também de (8.4.48), uma definição alternativa do grupo de estabilidade, equivalente a (8.4.40):

$$H = \{h \mid hA_0h^{-1} = A_0, h \in G\}. \quad (8.4.40')$$

Da discussão anterior, fica claro como encontrar todas as órbitas em $\mathfrak{L}_G$ e, conseqüentemente, suas correspondentes em $\mathfrak{L}_G^*$, se conhecermos as classes de G . Dado um elemento representante g_0 da classe $\mathfrak{C}_{g_0}$, tomamos seu elemento gerador A_0 na álgebra $\mathfrak{L}_G$ e encontramos seu subgrupo de estabilidade H por (8.4.40'). Assim, obtemos a órbita desta classe, parametrizada pelos elementos de G/H . Realizando este processo para todas classes de G , encontramos todas órbitas em sua álgebra.

Agora, considere uma função $F(\vec{\beta}) \in \mathcal{F}$, cujo domínio é restrito a órbita $\gamma(\vec{\beta}_0)$. Supomos também que neste domínio $\{\mathcal{A}_j(\vec{\beta}), F(\vec{\beta})\} = 0$, para todo $\mathcal{A}_j(\vec{\beta})$ da base de $\mathfrak{L}_G^*$. Utilizando (8.4.20) e (8.4.32), obtemos:

$$\begin{aligned} (T_{c^{-1}}F)(\vec{\beta}_0) &= F(\vec{\beta}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{ \sum_j \tau^j \mathcal{A}_j(\vec{\beta}_0), F(\vec{\beta}_0) \right\}_{(n)} \\ &= F(\vec{\beta}_0); \end{aligned} \quad (8.4.49)$$

onde $\vec{\beta} = \hat{d}(c)\vec{\beta}_0$ representa um ponto arbitrário na órbita $\gamma(\vec{\beta}_0)$, parametrizada pelos elementos $c \in G/H$. Então, considerando (8.4.49), vemos que $F(\vec{\beta})$ é constante na órbita.

Doravante, passamos a trabalhar apenas dentro da órbita de $\mathfrak{L}_G^*$ com ponto de referência $\vec{\beta}_0$. Neste domínio, podemos reescrever a definição do grupo de estabilidade:

$$\begin{aligned} H &= \{h \mid \vec{\beta}_0 = \hat{d}(h)\vec{\beta}_0, h \in G\} \\ &= \{h \mid d^T(h)\vec{\beta}_0 = \vec{\beta}_0, h \in G\} \\ &= \{h \mid (\beta_0)_i = \sum_{j=1}^r (\beta_0)_j d_{ji}(h), h \in G\}. \end{aligned} \quad (8.4.50)$$

Aqui utilizamos também a definição (8.4.17). Então, redefinimos as funções lineares $\mathcal{A}_j$ ($j = 1, \dots, r$), restritas à órbita determinada por G/H :

$$\mathcal{A}_j(c) \equiv \sum_{k=1}^r \mathcal{A}_k(e) d_{kj}(c^{-1}); \text{ com } \mathcal{A}_k(e) = (\beta_0)_k, c \in G/H. \quad (8.4.51)$$

O elemento e é a identidade do grupo G . Esta redefinição foi motivada pela correspondência entre os elementos $c \in G/H$ e os elementos $\vec{\beta}$ da órbita em $\mathfrak{L}_G^*$ com referência $\vec{\beta}_0$, ou seja:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_j(c) &= \sum_{k=1}^r \mathcal{A}_k(e) d_{kj}(c^{-1}) = \sum_k (\beta_0)_k \hat{d}_{jk}(c) \\ &= \beta_j \in \gamma(\vec{\beta}_0). \end{aligned} \quad (8.4.52)$$

As propriedades básicas dos geradores $\mathcal{A}_j$ sobre a órbita $\gamma(\vec{\beta}_0)$ são:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_j(g) &= \mathcal{A}_j(ch) = \sum_k \mathcal{A}_k(e) d_{kj}(h^{-1}c^{-1}) \\ &= \sum_{k,m} \hat{d}_{jm}(c) \hat{d}_{mk}(h) (\beta_0)_k \\ &= \sum_m \hat{d}_{jm}(c) (\beta_0)_m = \beta_j \in \gamma(\vec{\beta}_0) \\ &= \sum_m \mathcal{A}_m(e) d_{mj}(c^{-1}) = \mathcal{A}_j(c). \end{aligned} \quad (8.4.53)$$

Esta propriedade garante que as funções geradoras estão definidas sobre $\gamma(\vec{\beta}_0)$, ou equivalentemente sobre o espaço quociente G/H , pois são dependentes apenas da parametrização do elemento c obtido da decomposição (8.4.42). Outra propriedade básica é:

$$\begin{aligned} (T_g \mathcal{A}_j)(c) &= (T_g \mathcal{A}_j)(\vec{\beta}), \text{ para } \vec{\beta} = \hat{d}(c)\vec{\beta}_0 \\ &= \mathcal{A}_j(\vec{\beta}_{g^{-1}}) = \mathcal{A}_j(\hat{d}(g^{-1})\vec{\beta}) \\ &= \mathcal{A}_j(\hat{d}(g^{-1}c)\vec{\beta}_0) = \mathcal{A}_j(g^{-1}c) \\ &= \mathcal{A}_j(c'h') = \mathcal{A}_j(c'), \text{ com } c' \in G/H \text{ e } h' \in H. \end{aligned} \quad (8.4.54)$$

Aqui usamos a correspondência entre $c \in G/H$ e $\vec{\beta} = \hat{d}(c)\vec{\beta}_0 \in \gamma(\vec{\beta}_0)$ para mudar a notação do argumento de $\mathcal{A}_j$, a fim de relacionar a redefinição (8.4.51) com (8.4.20). Na última linha usamos também que $c \in G/H \subset G$ e $g \in G$, logo $g^{-1}c \in G$ e pode ser decomposto na forma (8.4.42).

Da propriedade (8.4.54), temos que a ação do grupo sobre uma função de $\mathfrak{L}_G^{**}$, aplicada a um ponto da órbita, resulta na mesma função aplicada a outro ponto da mesma órbita.

A última propriedade é obtida utilizando a parametrização (8.4.22) de $g \in G$ e a relação (8.4.28):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau^s} (T_g \mathcal{A}_j)(c)|_{\vec{\tau}=0} &= \frac{\partial}{\partial \tau^s} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{ \sum_{k=1}^r \tau^k \mathcal{A}_k(c), \mathcal{A}_j(c) \right\}_{(n)} \right) \Big|_{\vec{\tau}=0} \\ &= \frac{\partial}{\partial \tau^s} \left(\mathcal{A}_j(c) + \sum_{k,m} \tau^k c_{kj}^m \mathcal{A}_m(c) + O(\tau^2) \right) \Big|_{\vec{\tau}=0} \\ &= \left(\sum_m c_{sj}^m \mathcal{A}_m(c) + O(\tau) \right) \Big|_{\vec{\tau}=0} \\ &= \sum_m c_{sj}^m \mathcal{A}_m(c) = \{\mathcal{A}_s(c), \mathcal{A}_j(c)\}. \end{aligned} \quad (8.4.55)$$

Em geral, o subgrupo H é gerado por uma álgebra de Lie $\mathfrak{L}_H$, cuja base é formada por $q \leq r$ operadores da base de $\mathfrak{L}_G$. Logo, o espaço quociente é parametrizado por $p = r - q$ parâmetros independentes. Vemos isto facilmente na parametrização exponencial, na qual G e H são parametrizados respectivamente por r e q variáveis reais independentes. Então, na decomposição (8.4.42), devem sobrar somente p parâmetros livres para G/H .

Supondo que o espaço quociente G/H é parametrizado por p variáveis independentes $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_p)^T$, vemos que as funções pertencentes aos espaços $\mathfrak{L}_G^{**}$ e $\mathcal{F}$ devem depender apenas destes p parâmetros, quando seus domínios são restritos à órbita G/H . Como exemplo, temos as funções geradoras $\mathcal{A}_j(c) \in \mathfrak{L}_G^{**}$, que se restringem a G/H , segundo a propriedade (8.4.53), quando fazemos a parametrização $c(\vec{\xi})$.

Logo, a restrição da forma simplética (8.4.10) a uma órbita deve ter a forma geral:

$$\{F_1(c), F_2(c)\} = \sum_{i,j=1}^p \frac{\partial F_1(c)}{\partial \xi_i} \mathcal{M}_{ij}(\vec{\xi}) \frac{\partial F_2(c)}{\partial \xi_j}, \quad \text{com } F_1, F_2 \in \mathcal{F}. \quad (8.4.56)$$

A matriz $\mathcal{M}$ é $p \times p$, tal que $\mathcal{M}_{ij} = -\mathcal{M}_{ji}$. Esta matriz deve ser não degenerada ($\det(\mathcal{M}) \neq 0$), pois se $\mathcal{M}$ for degenerada, podemos encontrar uma função $F(\vec{\xi})$ que satisfaz $\{\mathcal{A}_j(\vec{\xi}), F(\vec{\xi})\} = 0$, para $j = 1, \dots, r$, mas que não é uma constante na órbita, contradizendo o resultado (8.4.49).

Baseados nos resultados que obtivemos até aqui, queremos agora construir funções lineares $\mathcal{A}_j(c(\vec{\xi}))$, sobre uma determinada órbita de $\mathfrak{L}_G^*$, detentoras de todas as propriedades já demonstradas, mas desta vez queremos relacionar sua estrutura simplética a um dado espaço de Hilbert e assim, finalmente, à estrutura simplética obtida diretamente do princípio variacional dependente do tempo (PVDT).

Consideremos um espaço de Hilbert $\mathbb{H}$ que carrega uma representação unitária irredutível Γ do grupo G , cuja métrica k de $\mathfrak{L}_G$ é não degenerada. Definimos então um estado arbitrário $|\Phi_0\rangle \in \mathbb{H}$ como estado de referência da representação Γ . Para este estado de referência, definimos o subgrupo de estabilidade H como o subgrupo máximo de G tal que:

$$H = \{h \mid \Gamma(h) |\Phi_0\rangle = e^{i\phi(h)} |\Phi_0\rangle, \quad h \in G\}. \quad (8.4.57)$$

Ou seja, o grupo de estabilidade de $|\Phi_0\rangle$ é composto pelos elementos de G que deixam este estado invariante a menos de uma fase global, que em geral depende do elemento específico de H .

Fazemos agora a ligação entre o estado $|\Phi_0\rangle$ e as órbitas em $\mathfrak{L}_G^*$, supondo que o grupo de estabilidade H de $|\Phi_0\rangle$ coincide com um dos grupos de estabilidade relacionados às órbitas de $\mathfrak{L}_G^*$ ^{8.11}, obtidos das classes de G da maneira explicada juntamente com a equação (8.4.40'). Este requerimento é fundamental para conectarmos as estruturas simpléticas que surgem naturalmente de $\mathfrak{L}_G^*$ e do PVDT. Então, definimos as quantidades:

$$\mathcal{A}_j(g) \equiv \langle \Phi_0 | \Gamma(g^{-1}) A_j \Gamma(g) | \Phi_0 \rangle. \quad (8.4.58)$$

Aqui os A_j são as representações dos geradores de G , ou dos elementos da base de $\mathfrak{L}_G$, que agem sobre $\mathbb{H}$. Vemos que as quantidades definidas em (8.4.58) carregam o grupo de estabilidade de $|\Phi_0\rangle$ e, por suposição, de uma órbita de $\mathfrak{L}_G^*$. Utilizando a decomposição (8.4.42), temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_i(g) &= \mathcal{A}_i(ch) \\ &= \langle \Phi_0 | \Gamma^\dagger(h) \Gamma^\dagger(c) A_i \Gamma(c) \Gamma(h) | \Phi_0 \rangle \\ &= e^{-i\phi(h)} e^{i\phi(h)} \langle \Phi_0 | \Gamma^\dagger(c) A_i \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \\ &= \mathcal{A}_i(c). \end{aligned} \quad (8.4.59)$$

Ou seja, as funções $\mathcal{A}_i$ têm como domínio G/H , o espaço parametrizado pelas p variáveis $\vec{\xi}$. Também vemos que o grupo de estabilidade de $|\Phi_0\rangle$ pode ser definido equivalentemente por:

$$H = \{h \mid \mathcal{A}_i(h) = \mathcal{A}_i(e); \text{ para } i = 1, \dots, r \text{ e } h \in G\}. \quad (8.4.60)$$

Outra propriedade importante das funções definidas em (8.4.58) é:

$$\begin{aligned} (T_g \mathcal{A}_i)(c) &\equiv \mathcal{A}_i(g^{-1}c) \\ &= \langle \Phi_0 | \Gamma(c^{-1}) \Gamma(g) A_i \Gamma(g^{-1}) \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \\ &= \sum_j \langle \Phi_0 | \Gamma(c^{-1}) A_j \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle d_{ji}(g) \\ &= \sum_j \mathcal{A}_j(c) d_{ji}(g) \\ &= \mathcal{A}_i(c'), \quad \text{para } g^{-1}c = c'h'. \end{aligned} \quad (8.4.61)$$

Em (8.4.61), utilizamos a definição (8.4.14) da representação adjunta e reobtivemos a ação do grupo G sobre as funções lineares de $\mathfrak{L}_g^{**}$, já vista em (8.4.27), mas desta vez para as funções construídas da forma explícita (8.4.58).

Das propriedades (8.4.59) e (8.4.61), em comparação com as propriedades (8.4.53) e (8.4.54), concluímos que os valores esperados (8.4.58) são idênticos aos geradores simpléticos sobre as órbitas de $\mathfrak{L}_G^*$, definidos em (8.4.51). Logo, aqueles carregam a estrutura simplética destes, incluindo as seguintes propriedades:

^{8.11}Por este motivo usamos a mesma designação H para as duas definições em princípio diferentes.

$$\left. \frac{\partial}{\partial \tau^s} (T_g \mathcal{A}_i)(c) \right|_{\vec{\tau}=0} = \{\mathcal{A}_s(c), \mathcal{A}_i(c)\} \equiv (D_s \mathcal{A}_i)(c); \quad (8.4.62)$$

em comparação com (8.4.55). Como os parênteses de Poisson em $\mathfrak{L}_G^{**}$ reproduzem os comutadores da álgebra de Lie $\mathfrak{L}_G$, temos também que:

$$\begin{aligned} \{\mathcal{A}_i(c), \mathcal{A}_j(c)\} &= \sum_k c_{ij}^k \mathcal{A}_k(c) \\ &= \sum_k c_{ij}^k \langle \Phi_0 | \Gamma(c^{-1}) A_k \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \Gamma(c^{-1}) [A_i, A_j] \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (8.4.63)$$

Então, convém designar a mesma notação para as médias definidas em (8.4.58) e os geradores simpléticos sobre $\mathfrak{L}_G^*$, pois as médias são representações autênticas associadas ao espaço de Hilbert dos geradores.

Neste ponto, vale notar que as funções $\mathcal{A}_i(c)$, definidas sobre as órbitas G/H , parametrizadas por $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_p)^T$ e que conservam a estrutura da álgebra $\mathfrak{L}_G$, são obtidas com a realização das médias dos operadores da álgebra nos estados:

$$|\vec{\xi}\rangle \equiv \Gamma(c(\vec{\xi})) |\Phi_0\rangle. \quad (8.4.64)$$

Chamamos os estados definidos desta maneira de **estados coerentes**. Note que estes carregam naturalmente a parametrização do espaço quociente G/H . Desta forma, temos uma correspondência entre estes estados e os elementos de G/H . O estado coerente também é altamente dependente do estado de referência escolhido, que define sua órbita sob a ação de G como consequência de seu grupo de estabilidade.

Então, a média nos estados coerentes, definidos em (8.4.64), leva os geradores A_i de G aos geradores $\mathcal{A}_i$ da estrutura simplética sobre a órbita parametrizada. Dado um estado parametrizado no espaço de Hilbert, o PVDT fornece naturalmente uma estrutura simplética sobre o espaço de parâmetros, como vimos na seção 2.2. Portanto, uma escolha possível do estado parametrizado para o PVDT é o estado coerente, que mostramos carregar uma estrutura simplética não degenerada relacionada ao grupo G . Basta agora mostrar que a estrutura simplética obtida para os estados coerentes sobre as órbitas em $\mathfrak{L}_G^*$ coincide com o que seria obtido aplicando sua parametrização no PVDT.

Começamos definindo uma função sobre o espaço de parâmetros de G/H ; ou seja, definida no espaço de p parâmetros independentes $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_p)^T$:

$$f(c) = f(\vec{\xi}). \quad (8.4.65)$$

Em (8.4.62), definimos a ação diferencial dos geradores de G sobre o espaço quociente G/H , que aqui identificamos como operadores diferenciais de primeira ordem:

$$(D_s f)(c(\vec{\xi})) \equiv \left. \frac{\partial f(g^{-1}c)}{\partial \tau^s} \right|_{g=e} \equiv \sum_{j=1}^p \mathcal{D}_{sj} \frac{\partial f(c(\vec{\xi}))}{\partial \xi_j}. \quad (8.4.66)$$

Agora, observe que o estado coerente está normalizado naturalmente a partir de sua definição, supondo que o estado de referência $|\Phi_0\rangle$ é normalizado:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{\xi} | \vec{\xi} \rangle &= \langle \Phi_0 | \Gamma^\dagger(c) \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = 1.
\end{aligned} \tag{8.4.67}$$

Então, definimos a matriz $p \times p$ dependente da sobreposição de dois estados coerentes:

$$\begin{aligned}
\Xi_{ij}(\vec{\xi}) &\equiv \left(\frac{\partial}{\partial \xi'_i} \frac{\partial}{\partial \xi_j} - \frac{\partial}{\partial \xi_i} \frac{\partial}{\partial \xi'_j} \right) \langle \Phi_0 | \Gamma^\dagger(c') \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \Big|_{\vec{\xi}=\vec{\xi}'} \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial \xi'_i} \frac{\partial}{\partial \xi_j} - \frac{\partial}{\partial \xi_i} \frac{\partial}{\partial \xi'_j} \right) \langle \vec{\xi}' | \vec{\xi} \rangle \Big|_{\vec{\xi}=\vec{\xi}'}.
\end{aligned} \tag{8.4.68}$$

Note a semelhança da definição de Ξ com a matriz η ^{8.12}, dada em (2.2.21.c), que fornece a geometria das equações de movimento para estados parametrizados no PVDt:

$$\eta = i\Xi. \tag{8.4.69}$$

Da parametrização exponencial, obtemos a seguinte identidade de operadores para representação Γ de G :

$$-A_i = \frac{\partial \Gamma(g^{-1})}{\partial \tau^i} \Big|_{g=e} = \frac{\partial}{\partial \tau^i} \exp \left(- \sum_j \tau^j A_j \right) \Big|_{g=e}. \tag{8.4.70}$$

Então, utilizando (8.4.66):

$$\begin{aligned}
A_i \Gamma(c) &= - \frac{\partial \Gamma(g^{-1})}{\partial \tau^i} \Big|_{g=e} \Gamma(c) \\
&= - \frac{\partial \Gamma(g^{-1}c)}{\partial \tau^i} \Big|_{g=e} \\
&= - \sum_j \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial \Gamma(c)}{\partial \xi_j}.
\end{aligned} \tag{8.4.71}$$

Realizando cálculos análogos, obtemos também:

$$A_i = \frac{\partial \Gamma(g)}{\partial \tau^i} \Big|_{g=e}, \tag{8.4.72}$$

que resulta em:

$$\begin{aligned}
\Gamma^{-1}(c) A_i &= \Gamma^{-1}(c) \frac{\partial \Gamma(g)}{\partial \tau^i} \Big|_{g=e} \\
&= \frac{\partial \Gamma^{-1}(g^{-1}c)}{\partial \tau^i} \Big|_{g=e} \\
&= \sum_j \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial \Gamma^{-1}(c)}{\partial \xi_j}.
\end{aligned} \tag{8.4.73}$$

^{8.12}A definição de η em (2.2.21.c) possui o logaritmo da sobreposição dos estados parametrizados. Contudo, esta diferença desaparece quando consideramos somente estados normalizados na seção 2.2.

De (8.4.71) e (8.4.73), empregando também a notação de (8.4.66), podemos escrever:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_i(c) &= \langle \Phi_0 | \Gamma^{-1}(c') A_i \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \Big|_{c=c'} \\
 &= - \langle \Phi_0 | \Gamma^{-1}(c') [D_i \Gamma(c)] | \Phi_0 \rangle \Big|_{c=c'} \\
 &= \langle \Phi_0 | [D'_i \Gamma^{-1}(c')] \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \Big|_{c=c'}.
 \end{aligned} \tag{8.4.74}$$

Derivando (8.4.74) em relação a ξ_k , temos:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{A}_i(c)}{\partial \xi_k} &= \langle \Phi_0 | \left(\frac{\partial \Gamma^{-1}(c')}{\partial \xi'_k} \right) [-D_i \Gamma(c)] + [D'_i \Gamma^{-1}(c')] \left(\frac{\partial \Gamma(c)}{\partial \xi_k} \right) | \Phi_0 \rangle \Big|_{c=c'} \\
 &= \sum_j \mathcal{D}_{ij} \langle \Phi_0 | \frac{\partial \Gamma^{-1}(c')}{\partial \xi'_j} \frac{\partial \Gamma(c)}{\partial \xi_k} - \frac{\partial \Gamma(c)}{\partial \xi_j} \frac{\partial \Gamma^{-1}(c')}{\partial \xi'_k} | \Phi_0 \rangle \Big|_{c=c'} \\
 &= \sum_j \mathcal{D}_{ij} \Xi_{jk}.
 \end{aligned} \tag{8.4.75}$$

Retornando a (8.4.63), usando também (8.4.71) e (8.4.73), escrevemos:

$$\begin{aligned}
 \{\mathcal{A}_i(c), \mathcal{A}_j(c)\} &= \langle \Phi_0 | \Gamma^{-1}(c') [A_i, A_j] \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle \Big|_{c=c'} \\
 &= - \langle \Phi_0 | [D'_i \Gamma^{-1}(c')] [D_j \Gamma(c)] - [D'_j \Gamma^{-1}(c')] [D_i \Gamma(c)] | \Phi_0 \rangle \Big|_{c=c'} \\
 &= \sum_{k,m} \mathcal{D}_{ik} \Xi_{mk} \mathcal{D}_{jm}.
 \end{aligned} \tag{8.4.76}$$

Em (8.4.56) temos a restrição da forma simplética a uma órbita, onde agora substituímos (8.4.75):

$$\begin{aligned}
 \{\mathcal{A}_i(c), \mathcal{A}_j(c)\} &= \sum_{k,m} \frac{\partial \mathcal{A}_i(\vec{\xi})}{\partial \xi_k} \mathcal{M}_{km} \frac{\partial \mathcal{A}_j(\vec{\xi})}{\partial \xi_m} \\
 &= \sum_{k,m} \sum_{\alpha,\beta} \mathcal{D}_{i\alpha} \Xi_{\alpha k} \mathcal{M}_{km} \mathcal{D}_{j\beta} \Xi_{\beta m}.
 \end{aligned} \tag{8.4.77}$$

Comparando (8.4.76) com (8.4.77), obtemos finalmente:

$$\sum_{k,m} \Xi_{\alpha k} \mathcal{M}_{km} \Xi_{\beta m} = \Xi_{\beta \alpha} \quad \therefore \quad \mathcal{M} = \Xi^{-1}. \tag{8.4.78}$$

Logo, os parênteses de Poisson naturais da álgebra $\mathfrak{L}_G$ sobre as órbitas G/H são realizados no espaço de Hilbert pela matriz Ξ de (8.4.68), quando fazemos as médias dos geradores nos estados coerentes.

Quando utilizamos a parametrização dada pelos estados coerentes no PVDT, que é a parametrização do espaço quociente G/H , obtemos os parênteses de Poisson encontrados em (2.2.29), que estão relacionados com os parênteses de Poisson naturais da álgebra, definidos em (8.4.56), por (8.4.69):

$$\begin{aligned}
\{f(\vec{\xi}), g(\vec{\xi})\}_{PVD T} &\equiv \sum_{j,k} \frac{\partial f}{\partial \xi_j} \eta_{jk}^{-1} \frac{\partial g}{\partial \xi_k} \\
&= -i \sum_{j,k} \frac{\partial f}{\partial \xi_j} \Xi_{jk}^{-1} \frac{\partial g}{\partial \xi_k} \\
&\equiv -i \{f(\vec{\xi}), g(\vec{\xi})\}_{\mathfrak{L}_G}.
\end{aligned} \tag{8.4.79}$$

Aqui f e g são duas funções definidas no espaço de fase generalizado M , equivalente topologicamente a G/H . Portanto, comparando (8.4.63) e (8.4.79), vemos que os parênteses de Poisson do PVD T também reproduzem as relações de comutação da álgebra $\mathfrak{L}_G$, a menos de um fator i :

$$i \{\mathcal{A}_j(\vec{\xi}), \mathcal{A}_k(\vec{\xi})\}_{PVD T} = \sum_m c_{jk}^m \mathcal{A}_m(\vec{\xi}). \tag{8.4.80}$$

Comparando novamente com (8.4.63), obtemos:

$$\frac{1}{i} \langle \Phi_0 | \Gamma(c^{-1}) [A_j, A_k] \Gamma(c) | \Phi_0 \rangle = \{\mathcal{A}_j(\vec{\xi}), \mathcal{A}_k(\vec{\xi})\}_{PVD T}. \tag{8.4.81}$$

Devemos lembrar que esta igualdade somente foi possível supondo que o grupo de estabilidade do estado de referência coincide com o grupo de estabilidade de alguma órbita em $\mathfrak{L}_G$.

A equação (8.4.81) possui forma semelhante a $\frac{1}{i}[x, p] \rightarrow \{x, p\}$, o princípio de correspondência de Dirac para os operadores canônicos de posição e momento, lembrando que na seção 2.2 fizemos $\hbar = 1$.

8.4.1 Órbitas Adjuntas em $su(3)$

Considere a representação padrão de $SU(3)$, que age de forma usual em três dimensões:

$$g \in SU(3) \rightarrow \Gamma^1(g). \tag{8.4.82}$$

Vimos que a representação padrão de $SU(3)$ induz a representação padrão de $su(3)$ ^{8.13}:

$$\Gamma^1(g) = e^{i\gamma^1(A)}. \tag{8.4.83}$$

A representação $\Gamma^1(g)$, por definição, é uma matriz unitária em três dimensões e, portanto, de acordo com teoremas básicos da álgebra linear, é diagonalizável por uma transformação de similaridade dada por outra matriz unitária:

$$U \Gamma^1(g) U^{-1} = D_g. \tag{8.4.84}$$

Na última equação, D_g é a matriz diagonal associada a $\Gamma^1(g)$. No entanto, sabemos que toda matriz unitária pode ser escrita como uma fase vezes outra matriz unitária de determinante um; ou seja, um elemento de $SU(3)$:

$$U = e^{i\phi} \Gamma^1(g'). \tag{8.4.85}$$

Então, reescrevemos (8.4.84) como:

^{8.13}De agora em diante recuperamos a “notação dos físicos” para a definição de álgebra de Lie.

$$\begin{aligned}
e^{i\phi} e^{-i\phi} \Gamma^1(g') \Gamma^1(g) \Gamma^1(g'^{-1}) &= \Gamma^1(g') \Gamma^1(g) \Gamma^1(g'^{-1}) \\
&= D_g = \Gamma^1(g_0).
\end{aligned} \tag{8.4.86}$$

Portanto, todo elemento de $SU(3)$ pode ser diagonalizado por um outro elemento do grupo, resultando em um elemento do grupo com representação diagonal. Como a matriz $\Gamma^1(g_0)$ é diagonal, ela deve ser dada por uma exponencial do tipo (8.4.83) apenas dos elementos diagonais da álgebra $su(3)$. Usando a notação para a representação padrão da álgebra encontrada em (8.1.75), obtemos:

$$\Gamma^1(g_0) = e^{i \sum_{j=1}^2 \tau_0^j \gamma^1(Q_j)}. \tag{8.4.87}$$

Por definição, as regras de multiplicação entre os elementos de $SU(3)$ são preservadas nas representações de $SU(3)$, inclusive nas totalmente simétricas definidas anteriormente. Portanto, podemos reescrever (8.4.86) como:

$$\Gamma^N(g') \Gamma^N(g) \Gamma^N(g'^{-1}) = \Gamma^N(g_0). \tag{8.4.88}$$

O elemento de $su(3)$ que parametriza um elemento de $SU(3)$ também independe da representação. Logo, reescrevemos (8.4.87):

$$\Gamma^N(g_0) = e^{i \sum_{j=1}^2 \tau_0^j \gamma^N(Q_j)} \equiv e^{i\gamma^N(A_0)}. \tag{8.4.89}$$

Como os elementos Q_j comutam entre si, sempre podemos encontrar uma base em que todos eles são diagonais no espaço em que age a representação γ^N . Logo, podemos manter o caráter de (8.4.88) como uma relação de diagonalização da representação de um elemento do grupo.

Abrindo em (8.4.88) as parametrizações exponenciais de g e g_0 , obtemos:

$$\begin{aligned}
\Gamma^N(g') \exp[i \sum_{j=1}^8 \tau^j \gamma^N(A_j)] \Gamma^N(g'^{-1}) &= \exp[i\Gamma^N(g') \sum_{j=1}^8 \tau^j \gamma^N(A_j) \Gamma^N(g'^{-1})] \\
&= \exp[i\Gamma^N(g') \gamma^N(A) \Gamma^N(g'^{-1})] \\
&= \exp[i\gamma^N(A_0)].
\end{aligned} \tag{8.4.90}$$

Então, vemos que sempre existe uma transformação no grupo, independentemente da representação utilizada, que associa um elemento A da álgebra a outro elemento A_0 , que é combinação linear apenas dos geradores Q_1 e Q_2 da subálgebra comutativa máxima. Para $g' \in SU(3)$ e $A_0 = \sum_{j=1}^2 \tau_0^j Q_j$, temos:

$$g' A g'^{-1} = A_0. \tag{8.4.91}$$

Segundo a definição de classe de um grupo, os elementos g e g_0 de $SU(3)$ pertencem à mesma classe se:

$$g = g' g_0 g'^{-1}, \text{ para algum } g' \in SU(3). \tag{8.4.92}$$

Aqui g_0 é um representante escolhido de uma classe de $SU(3)$. Então, toda classe possui um elemento que pode ser colocado na forma diagonal em uma determinada representação, pois vimos que

sempre existe uma transformação do grupo que diagonaliza outro elemento do grupo. Se tomarmos este elemento com representação diagonal como o representante g_0 da classe, temos que os outros elementos desta classe são dados por:

$$\begin{aligned}
 g'g_0g'^{-1} &= g' \exp[i \sum_{j=1}^2 \tau_0^j Q_j] g'^{-1} \\
 &= \exp[ig' \sum_{j=1}^2 \tau_0^j Q_j g'^{-1}] \\
 &= \exp[ig' A_0 g'^{-1}] = g.
 \end{aligned} \tag{8.4.93}$$

Portanto, uma classe de $SU(3)$ pode ser considerada como a órbita, sob a ação adjunta do grupo, de um elemento de representação diagonal de $su(3)$ exponenciado. Então, podemos representar uma classe por elementos do tipo:

$$A_0 = \tau_0^1 Q_1 + \tau_0^2 Q_2. \tag{8.4.94}$$

Agora, escrevendo a definição alternativa de grupo de estabilidade, encontrada em (8.4.40'), para $SU(3)$, temos:

$$H = \{h \mid h A_0 h^{-1} = A_0, h \in SU(3)\}. \tag{8.4.95}$$

Como as órbitas em $su(3)$ sob a ação do grupo representam as classes de $SU(3)$, podemos obter todas as órbitas da representação adjunta de $su(3)$ estudando os grupos de estabilidade dos elementos (8.4.94).

Se $\tau_0^1 \neq 0$ em (8.4.94), temos que os únicos elementos de $SU(3)$ que comutam com a ação de A_0 são gerados pelo mapa exponencial dos elementos Q_1 e Q_2 , que são os únicos elementos da base de $su(3)$ que comutam com Q_1 .

Se $\tau_0^1 = 0$ e $\tau_0^2 \neq 0$, temos que o grupo de estabilidade é gerado pelos elementos Q_1 , Q_2 , P_2 e J_z da base de $su(3)$, pois estes comutam com Q_2 .

Se $\tau_0^1 = 0$ e $\tau_0^2 = 0$, o grupo de estabilidade é trivialmente todo $SU(3)$.

Logo, segundo a tabela 8.4.1, podemos dividir em três tipos as classes de $SU(3)$ e, portanto, as órbitas em $su(3)$ sob a ação do grupo.

Tabela 8.4.1: Tipos de órbitas em $su(3)$.

Tipo	Grupo de estabilidade gerado por:	H isomorfo a:
<i>I</i>	Q_1 e Q_2	$U(1) \otimes U(1)$
<i>II</i>	Q_1 , Q_2 , P_2 e J_z	$U(2)$
<i>III</i>	Q_1 , Q_2 , P_1 , P_2 , P_3 , J_x , J_y e J_z	$SU(3)$

O tipo *III* é trivial e não tem implicações físicas. Os tipos *I* e *II* são aqueles que encontramos para os grupos de estabilidade de estados físicos. Então, a estrutura simplética obtida diretamente da álgebra coincide com a obtida do PVDT, se encontramos no estado de referência uma órbita do tipo *I* ou *II*.

Lembrando que as representações de Q_1 e Q_2 podem ser diagonalizadas simultaneamente, temos que todos os vetores da base que diagonaliza Q_1 e Q_2 têm no mínimo estes dois geradores na álgebra de seu grupo de estabilidade. Logo, em geral, os estados da base que não são aniquilados por nenhum dos outros geradores têm órbita do tipo *I*. Como os outros geradores do grupo não podem ser simultaneamente diagonalizados, eles devem aniquilar o estado de referência para pertencer à álgebra de seu grupo de estabilidade.

Comparando os resultados desta seção com a definição dos estados de máximo peso $|\vec{v}_M\rangle$ na seção 4.1, vemos que as órbitas do tipo *II* aparecem nestes estados, pois eles são aniquilados por alguns operadores de levantamento, quando lidamos com as representações totalmente simétricas. Fica evidente que o estado coerente mais próximo ao clássico é o estado coerente generalizado de maior simetria dentro do grupo $SU(3)$, pois o estado de máximo peso é dotado do maior subgrupo de estabilidade não trivial, gerado por todos os elementos de $su(3)$ que aniquilam, ou têm como auto-estado, $|\vec{v}_M\rangle$.

8.5 Pseudopotencial

Em um condensado de Bose-Einstein (CBE), formado por bósons neutros e no mesmo estado de energia interna^{8.14}, a distância média entre as partículas é bastante superior ao comprimento típico em que suas interações são relevantes. Por exemplo, as interações mais importantes entre átomos alcalinos neutros são as do tipo dipolo-dipolo elétrico induzido, ou van der Waals, com o comportamento típico $-Cr^{-6}$; ou seja, fortes apenas em curtas distâncias relativas à densidade do condensado, caracterizando um gás diluto.

Dizer que um gás é diluto não significa que as interações sejam fracas, mas indica que elas são fortes apenas quando os átomos estão próximos, considerando também que as colisões relevantes, devido a sua frequência, são somente aquelas que envolvem partículas aos pares.

A função de onda do condensado varia lentamente no espaço, devido aos longos comprimentos de onda das partículas pouco energéticas, exceto em regiões onde as partículas estão próximas, quando encontramos efeitos de curto comprimento de onda.

O conceito de potencial efetivo ou pseudopotencial é uma maneira de considerarmos os efeitos de curto alcance, mas sem a necessidade de um cálculo mais detalhado das interações de pequeno comprimento de onda. Neste caso, dizemos que os graus de liberdade de curto comprimento de onda foram “traçados”.

Como em gases dilutos apenas as colisões de partículas aos pares são significativamente frequentes, podemos considerar aqui somente a teoria de espalhamento elástico entre dois bósons de massa m . Inicialmente tomamos estas partículas como distinguíveis e consideramos ao final a influência da indistinguibilidade nos cálculos.

Considere a colisão, como usual, no sistema de coordenadas relativas e do centro de massa das duas partículas. A função de onda do sistema pode ser vista como o produto das funções de onda do movimento relativo e do centro de massa. Como as interações independem das coordenadas do centro de massa, a porção deste na função de onda é uma onda plana, que descreve a translação do centro de massa do sistema. Já a porção na coordenada relativa $\vec{r}$ pode ser escrita como a soma usual de uma onda incidente e uma espalhada, em uma forma não normalizada:

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + \psi_{sc}(\vec{r}); \quad (8.5.1)$$

^{8.14}No caso de partículas compostas.

onde escolhemos, sem perda de generalidade, a direção de incidência da colisão ao longo do eixo z . Para uma interação esfericamente simétrica, como no caso de van der Waals, a função espalhada em $|\vec{r}| = r \gg 1$ é uma onda esférica modulada pela amplitude de espalhamento $f(\theta)$, dependente apenas do ângulo de espalhamento relativo à direção z :

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (8.5.2)$$

A energia do sistema, em relação ao centro de massa, é dada por:

$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} = \frac{\hbar^2 k^2}{m}; \quad (8.5.3)$$

onde definimos o momento linear relativo das partículas $\hbar \vec{k}$ e a massa reduzida do sistema $m_r = \frac{m}{2}$.

Para um sistema de baixíssima energia como um CBE, no qual $k \rightarrow 0$, apenas o termo de espalhamento com momento angular relativo nulo, conhecido como onda s , é significativa. Neste limite, $f(\theta)$ se aproxima de uma constante:

$$\psi(\vec{r}) = 1 - \frac{a}{r}, \quad \text{para } r \rightarrow \infty \text{ e } k \rightarrow 0; \quad (8.5.4)$$

onde a é chamado de comprimento de espalhamento de onda s , representando o intercepto desta função de onda assintótica no eixo r .

Agora, consideremos o espalhamento na representação de momento:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{k}') &= \int d^3r e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} (e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \psi_{sc}(\vec{r})) \\ &= V \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} + \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}'); \end{aligned} \quad (8.5.5)$$

onde $\tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}')$ é a função de onda espalhada na representação de momentos. Em (8.5.5), também consideramos condições periódicas de contorno em um volume V .

O Hamiltoniano do sistema em coordenadas relativas é dado por:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_r} + U(\vec{r}). \quad (8.5.6)$$

Aqui $\vec{p}$ é o operador de momento linear relativo e $U(\vec{r})$ é o potencial de interação entre as partículas. O estado $|\psi\rangle$, representado em (8.5.2) ou (8.5.5), satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo para o Hamiltoniano (8.5.6), com o autovalor fornecido em (8.5.3):

$$E_r |\psi\rangle = H |\psi\rangle. \quad (8.5.7)$$

Colocando esta equação na representação de momento e substituindo $m_r = \frac{m}{2}$, obtemos:

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2 k^2}{m} \langle \vec{k}' | \psi \rangle &= \langle \vec{k}' | \left[\frac{\vec{p}^2}{m} + U(\vec{r}) \right] \sum_{\vec{k}''} |\vec{k}''\rangle \langle \vec{k}'' | \psi \rangle \\
\frac{\hbar^2 k^2}{m} \left(V \delta_{\vec{k}', \vec{k}} + \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}') \right) &= \sum_{\vec{k}''} \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{m} \delta_{\vec{k}', \vec{k}''} + \langle \vec{k}' | U(\vec{r}) | \vec{k}'' \rangle \right] \left[V \delta_{\vec{k}'', \vec{k}} + \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}'') \right] \\
\frac{\hbar^2 k^2}{m} \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}') &= \frac{\hbar^2 k'^2}{m} \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}') + V \langle \vec{k}' | U(\vec{r}) | \vec{k} \rangle + \sum_{\vec{k}''} \langle \vec{k}' | U(\vec{r}) | \vec{k}'' \rangle \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}'') \\
\left[\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} \right] \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}') &= V \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}') + \sum_{\vec{k}''} \tilde{U}(\vec{k}'' - \vec{k}') \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}'').
\end{aligned} \tag{8.5.8}$$

Na equação acima introduzimos a transformada de Fourier de $U(\vec{r})$:

$$\langle \vec{k}' | U(\vec{r}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3 r e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} U(\vec{r}) \equiv \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}'). \tag{8.5.9}$$

Então, retornando a (8.5.8), temos que a função de onda espalhada é dada por:

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}') &= \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} + i\delta \right)^{-1} \left(V \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}') + \sum_{\vec{k}''} \tilde{U}(\vec{k}'' - \vec{k}') \tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}'') \right) \\
&\equiv \left[\frac{\hbar^2}{m} (k^2 - k'^2) + i\delta \right]^{-1} T(\vec{k}, \vec{k}'; \frac{\hbar^2 k^2}{m}).
\end{aligned} \tag{8.5.10}$$

Na última equação, como usual, introduzimos a quantidade imaginária positiva $i\delta$ para garantir que a solução contenha apenas a onda espalhada emergente. Também definimos a matriz de transição T , que vemos facilmente em (8.5.10) satisfazer a chamada equação de Lippmann-Schwinger:

$$T(\vec{k}, \vec{k}'; \frac{\hbar^2 k^2}{m}) = V \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}') + \sum_{\vec{k}''} \tilde{U}(\vec{k}'' - \vec{k}') \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} + i\delta \right)^{-1} T(\vec{k}, \vec{k}''; \frac{\hbar^2 k^2}{m}). \tag{8.5.11}$$

Conforme (8.5.10), vemos que a onda espalhada no limite $r \rightarrow \infty$ e $k \rightarrow 0$, considerando longas distâncias após a colisão e baixa energia incidente, é dada por:

$$\tilde{\psi}_{sc}(\vec{k}') = -\frac{m}{\hbar^2 k'^2} T(0, \vec{k}'; 0). \tag{8.5.12}$$

Fazendo a transformada inversa de Fourier, encontramos a função de onda espalhada na representação de coordenadas relativas:

$$\begin{aligned}
\psi_{sc}(\vec{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \left(-\frac{m}{\hbar^2 k'^2} \right) T(0, \vec{k}'; 0) \\
&= \frac{1}{V} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \left(-\frac{m}{\hbar^2 k'^2} \right) T(0, \vec{k}'; 0) \\
&\cong -\frac{m}{\hbar^2} T(0, 0; 0) \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{k'^2} \\
&= -\frac{m}{4\pi \hbar^2} \frac{T(0, 0; 0)}{r}.
\end{aligned} \tag{8.5.13}$$

Na segunda passagem de (8.5.13) fizemos $V \rightarrow \infty$, mudando os valores da soma em $\vec{k}'$ de discretos para contínuos. Então, surge o fator $\frac{V}{(2\pi)^3}$, que é a densidade de estados no espaço de momentos k' . Na terceira passagem aproximamos o argumento $\vec{k}'$ de T por zero, pois os valores significativos de k' na transformada são da ordem de $\frac{1}{r}$, com $r \gg 1$. Na quarta passagem calculamos por resíduos a integral:

$$\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{k'^2} = \frac{1}{4\pi r}. \quad (8.5.14)$$

Então, comparando (8.5.4) e (8.5.13), obtemos:

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} T(0, 0; 0). \quad (8.5.15)$$

Tomando a primeira aproximação de Born em (8.5.11), que consiste em aproximar o lado esquerdo da equação apenas pelo primeiro termo da direita, procedimento que possui validade quando o potencial não altera muito significativamente a onda incidente, temos:

$$T(\vec{k}, \vec{k}'; E_r) \approx V\tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (8.5.16)$$

Fazendo $\vec{k} = \vec{k}' = 0$ e substituindo em (8.5.15), obtemos:

$$a \cong \frac{m}{4\pi\hbar^2} V\tilde{U}(0). \quad (8.5.17)$$

Então, utilizando a transformada de Fourier (8.5.9):

$$\begin{aligned} a &\cong \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r U(\vec{r}) \\ &= \int d^3r \delta(\vec{r}) a. \end{aligned} \quad (8.5.17')$$

Ou seja, podemos aproximar o potencial de interação entre as partículas, em coordenadas relativas e baixíssimas energias, independentemente de seus detalhes de curto alcance por:

$$U(\vec{r}) \approx \frac{4\pi\hbar^2}{m} \delta(\vec{r}) a. \quad (8.5.18)$$

Se as partículas têm posições $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$ no sistema de coordenadas do laboratório, obtemos:

$$U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \approx \frac{4\pi\hbar^2}{m} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) a. \quad (8.5.18')$$

Note que a deve ser positivo para interações repulsivas e negativo para atrativas. Em geral, para o caso positivo, um CBE é estável para maior número de partículas, comparado ao caso de interações atrativas, quando o sistema geralmente é instável.

Mostramos agora que o potencial (8.5.18') não se altera para partículas idênticas. Começamos notando que a função de onda (8.5.2) deve ser simetrizada sob permutação de partículas no caso de bósons; ou seja, deve ser invariante pela transformação de coordenadas relativas $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, ou $r \rightarrow r$ e $\theta \rightarrow \pi - \theta$, logo:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{e^{ikz} + e^{-ikz}}{2} + \frac{f(\theta) + f(\pi - \theta)}{2} \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (8.5.2')$$

No entanto, com $f(\theta) \rightarrow -a$ quando $k \rightarrow 0$, obtemos novamente (8.5.4), com o mesmo comprimento de espalhamento, o que é óbvio se lembrarmos que a onda s é esfericamente simétrica; ou seja, invariante

sob a transformação $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, satisfazendo o postulado da simetrização. Em outras palavras, a equação (8.5.4) já é simétrica sob troca de partículas e conveniente na obtenção de (8.5.18'), também para o caso de um CBE.

- [ACGT72] F. T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore, and H. Thomas. Atomic coherent states in quantum optics. *Physical Review A*, 6:2211–2237, 1972.
- [AEM⁺95] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Weiman, and E. A. Cornell. Observations of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269:198–201, 1995.
- [AFLN92] M. A. M. Aguiar, K. Furuya, C. H. Lewenkopf, and M. C. Nemes. Chaos in a spin-boson system: Classical analysis. *Annals of Physics*, 216:291–312, 1992.
- [AFNP99] R. M. Angelo, K. Furuya, M. C. Nemes, and G. Q. Pellegrino. Rapid decoherence in integrable systems: A border effect. *Phys. Rev. E*, 60(5):5407–5411, 1999.
- [AFNP01] R. M. Angelo, K. Furuya, M. C. Nemes, and G. Q. Pellegrino. Recohence in the entanglement dynamics and classical orbits in the N-atom Jaynes-Cummings model. *Phys. Rev. A*, 64:043801, 2001.
- [AGF⁺05] M. Albiez, R. Gati, J Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, and M. K. Oberthaler. Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction. *Phys. Rev. Lett.*, 95:010402, 2005.
- [BFP] P. Buonsante, R. Franzosi, and V. Penna. Dynamics of twin-condensate configurations in an open chain of three Bose-Einstein condensates. *arXiv:cond-mat/0312604v2*.
- [BFP03] P. Buonsante, R. Franzosi, and V. Penna. Dynamical instability in a trimeric chain of interacting Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 90:050404, 2003.
- [BKO⁺04] H. Barnum, E. Knill, G. Ortiz, R. Somma, and L. Viola. A subsystem-independent generalization of entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, 92(10):107902, 2004.
- [BKOV03] H. Barnum, E. Knill, G. Ortiz, and L. Viola. Generalizations of entanglement based on coherent states and convex sets. *Phys. Rev. A*, 68:032308, 2003.
- [BP86] S. M. Barnett and D. T. Pegg. Phase in quantum optics. *J. Phys. A*, 19:3849–3862, 1986.

- [BSTH95] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 75(9):1687–1690, 1995.
- [Bur96] K. Burnett. Bose-Einstein condensation with evaporatively cooled atoms. *Contemporary Physics*, 37:1–14, 1996.
- [dA95] A. M. O. de Almeida. *Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização*. Editora Unicamp, Campinas, 1995.
- [Dao04] M. Daoud. Analytic representations based on $su(3)$ coherent states and Robertson intelligent states. *J. Math. Phys.*, 45(9):3435–3443, 2004.
- [dC06] B. R. da Cunha. Teoria de detecção homódina atômica em condensados de Bose-Einstein. Tese de mestrado, Unicamp, 2006.
- [dCdO] B. R. da Cunha and M. C. de Oliveira. Collision-dependent atom tunneling rate in Bose-Einstein condensates. *arXiv:cond-mat/0507506v2[cond-mat.other]*.
- [Del77] R. Delbourgo. Minimal uncertainty states for the rotation and allied groups. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 10(11):1837–1846, 1977.
- [DF77] R. Delbourgo and J. R. Fox. Maximum weight vectors possess minimal uncertainty. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 10(12):L233, 1977.
- [DMA⁺95] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75(22):3969–3973, 1995.
- [FNP98] K. Furuya, M. C. Nemes, and G. Q. Pellegrino. Quantum dynamical manifestation of chaotic behavior in the process of entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, 80(25):5524–5527, 1998.
- [FP01] R. Franzosi and V. Penna. Self-trapping mechanisms in the dynamics of three coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 65:013601, 2001.
- [FP03] R. Franzosi and V. Penna. Chaotic behavior, collective modes, and self-trapping in the dynamics of three coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. E*, 67:046227, 2003.
- [FW71] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-particle Systems*. McGraw-Hill, Boston, Massachusetts, 1971.
- [Gas66] S. Gasiorowicz. *Elementary Particle Physics*. John Wiley, New York, 1966.
- [Gil74] R. Gilmore. *Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applications*. John Wiley & Sons, New York, 1974.
- [Gla63] R. J. Glauber. Coherent and incoherent states of the radiation field. *Phys. Rev.*, 131:2766–2788, 1963.
- [Gol69] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1969.

- [Hal03] B. C. Hall. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: an Elementary Introduction*. Springer-Verlag, New York, 2003.
- [Ham62] M. Hammermesh. *Group Theory and its Application to Physical Problems*. Addison-Wesley, Reading, Massachussetts, 1962.
- [Hin05] A. P. Hines. *Entanglement, Dynamical Bifurcations and Quantum Phase Transitions*. Tese de doutorado, University of Queensland, 2005.
- [Hua28] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, New York, 1928.
- [Kly] A. A. Klyachko. Coherent states, entanglement and geometric invariant theory. *arXiv:quant-ph/0206012v1*.
- [KT02] M. E. Kellman and V. Tyng. Bifurcation effects in coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 66:013602, 2002.
- [Leg01] A. J. Leggett. Bose-Einstein condensation in alkali gases: Some fundamental concepts. *Rev. of Mod. Phys.*, 73:307–356, 2001.
- [LF88] W. Ludwig and C. Falter. *Symmetries in Physics: Group Theory Applied to Physical Problems*. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [LFYL07] B. Liu, L.-B. Fu, S.-P. Yang, and J. Liu. Josephson oscillation and transition to self-trapping for Bose-Einstein condensates in a triple-well trap. *Phys. Rev. A*, 75:033601, 2007.
- [Lip02] H. J. Lipkin. *Lie Groups for Pedestrians*. Dover, 2002.
- [MBJ66] M. Moshinsky, T. A. Brody, and G. Jacob. *Many-body Problems and Other Selected Topics in Theoretical Physics*. Gordon and Breach, New York, 1966.
- [MCWW97] G. J. Milburn, J. Corney, E. M. Wright, and D. F. Walls. Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential. *Phys. Rev. A*, 55:4318–4324, 1997.
- [Mey01] P. Meystre. *Atom Optics*. Speinger-Verlag, New York, 2001.
- [MJ06] S. Mossmann and C. Jung. Semiclassical approach to Bose-Einstein condensates in a triple well potential. *Phys. Rev. A*, 74:033601, 2006.
- [MS00] M. Mathur and D. Sen. Coherent states for SU(3). *arXiv:quant-ph/0012099v1*, 2000.
- [NHMM00] K. Nemoto, C. A. Holmes, G. J. Milburn, and W. J. Munro. Quantum dynamics of three coupled atomic Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 63:013604, 2000.
- [NO98] J. W. Negele and H. Orland. *Quantum Many-particle Systems*. Reading, Massachussetts, 1998.
- [PB97] D. T. Pegg and S. M. Barnett. Quantum optical phase. *J. Mod. Phys.*, 44(2):225–264, 1997.

- [Per86] A. M. Perelomov. *Generalized Coherent States and their Applications*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [PS02] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge Univ., Cambridge, 2002.
- [PW98] A. S. Parkins and D. F. Walls. The physics of trapped dilute-gas Bose-Einstein condensates. *Phys. Rep.*, 303:1–80, 1998.
- [Rei02] J. Reichel. Microchip traps and Bose-Einstein condensation. *App. Phys. B: Lasers and Optics*, 74(6):469–487, 2002.
- [RSV89] K. Raghunathan, M. Seetharaman, and S. S. Vasan. A disentanglement relation for SU(3) coherent states. *J. Phys. A. Math. Gen.*, 22:L1089, 1989.
- [Sak94] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1994.
- [SAZ07] J. A. Stickney, D. Z. Anderson, and A. A. Zozulya. Transistorlike behavior of a Bose-Einstein condensate in a triple-well potential. *Phys. Rev. A*, 75:013608, 2007.
- [Sch65] J. Schwinger. *Quantum Theory of Angular Momentum*. Academic Press, New York, 1965.
- [Sch68] L. I. Schiff. *Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York, 1968.
- [SGCS97] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar. Continuous quantum phase transitions. *Rev. of Mod. Phys.*, 69(1):315–333, 1997.
- [SK81] M. Saraceno and P. Kramer. *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics, Lecture Notes in Physics 140*. Springer-Verlag, New York, 1981.
- [SOB⁺04] R. Somma, G. Ortiz, H. Barnum, E. Knill, and L. Viola. Nature and measure of entanglement in quantum phase transitions. *arXiv:quant-ph/0403035v2*, 2004.
- [Swa63] J. J. Swart. The octet model and its Clebsch-Gordan coefficients. *Rev. of Mod. Phys.*, 35:916–939, 1963.
- [WSL04] L.-A. Wu, M. S. Sarandy, and D. A. Lidar. Quantum phase transitions and bipartite entanglement. *Phys. Rev Lett.*, 93:250404, 2004.
- [Yaf82] L. G. Yaffe. Large N limits as classical mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 54(2):407–435, 1982.
- [ZFG90] W.-M. Zhang, D. H. Feng, and R. Gilmore. Coherent states: Theory and some applications. *Rev. Mod. Phys.*, 62(4):867, 1990.
- [ZFY90] W.-M. Zhang, D. H. Feng, and J.-M. Yuan. Integrability and nonintegrability of quantum systems. II. Dynamics in quantum phase space. *Phys. Rev. A*, 42(12):7125–7150, 1990.
- [ZFYW89] W.-M. Zhang, D. H. Feng, J.-M. Yuan, and S.-J. Wang. Integrability and nonintegrability of quantum systems: quantum integrability and dynamical symmetry. *Phys. Rev. A*, 40(1):438–447, 1989.
- [ZP96] W. H. Zurek and J. P. Paz. Why we don’t need quantum planetary dynamics? *quant-ph/9612037*, 1996.