

Estudo da dinâmica de condensados Bosônicos com duas componentes

AUTOR*

EMERSON LUIZ LAPOLLI

Orientador :

FREDERICO FIRMO DE SOUZA CRUZ

*Dissertação apresentada a Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Santa
Catarina, como parte dos requisitos para ob-
tenção do título de Mestre em Física*

UFSC - Florianópolis

17 Agosto de 2005

†Este trabalho contou com apoio financeiro do CNPq.

Estudo da dinâmica de condensados Bosônicos com duas componentes

Emerson Luiz Lapolli

Esta Dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de **Mestre em Física**, na área de concentração **Física Atômica e Molecular** e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina.

Prof. Dr. Marcelo H. R. Tragtemberg
Coordenador do Curso

Banca Examinadora

Prof. Dr. Frederico Firmo. S. Cruz
(FSC/UFSC - Orientador)

Prof. Dr. Emerson J. V. de Passos
(DFM - IF - USP)

Prof. PhD. Marcus Benghi Pinto
(FSC/UFSC)

Prof. Dr. Sérgio Eduardo Michelin
(FSC/UFSC - suplente)

Dedico a minha eterna
companheira Ramona
e a minha família.

Agradecimentos

Primeiramente agradeço as mulheres mais importantes da minha vida: minha companheira Ramona, minha Mãe Edi e irmã Danielli, pela confiança e estímulo que não me deixaram desanimar. Ao meu orientador Fred, pela sua infinita paciência e dedicação. Ao professor Michelin, carinhosamente chamado por seus pupilos de *paichelin*, por ter sanado, em alguns momentos, minhas dúvidas e também pelo apoio e incentivo. Aos alunos pupilos do prof. Michelin do grupo de atômica e molecular, pelos momentos de descontração. Ao *Marcoletti* por sua companhia na sala 74. A turma do LABIDEX pelos momentos de alegria além dos infinitas dúvidas, debates e discussões, onde se começava com uma “nano-dúvida” entre dois e esta era sanada, em uma última instância, numa “giga-discussão” entre muitos. Aos agora colegas Marcos Auto-apelidado de Mulder, Daniel Girardi (*Nanel*), Maicon Saul Farias (*caluoro*) e André o *Gabiru* para os colegas, e grandes merecedores de um... “soco-na-boca!!”. Também agradeço aos Alexandres, *China* e *Monstro*, respectivamente pelo suporte a softwares e dúvidas em inglês, além de suas amizades. Agora na reta final, tem o George, com quem divido sala e orientador, que me auxiliou nas correções gramaticais da versão final da dissertação. Agradeço ao chimarrão, Cuia e Bomba por terem sido minha única companhia em muitos momentos a frente do computador e abrindo as contas dos artigos. Não poderia de deixar de agradecer aos grandes concorrentes na disputa pelo domínio do universo: Deus e o Demôônio, pelas ajudas e empecilhos que me fizeram amadurecer cientificamente.

SUMÁRIO

<i>Resumo</i>	x
<i>Abstract</i>	xi
<i>Introdução</i>	9
Objetivos Específicos	11
Descrição do Trabalho	12
1. <i>Revisão</i>	13
1.1 Composição e Tipos de BECs	13
1.2 BEC com duas componentes	14
1.3 As Interações	14
1.4 Os Acoplamentos	15
2. <i>O modelo</i>	16
2.1 Dinâmica do condensado com duas componentes	18
2.2 Aproximações	19
2.2.1 Hamiltoniana de dois modos	19
3. <i>Formalismo de Quasi-Spin</i>	23
3.1 Hamiltoniana Atômica	23
3.2 Hamiltoniana de Feshbach	25
3.3 Diagonalização	26
3.4 Valores esperados de \hat{J}_z ($\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$)	28
3.5 Método de análise	28
3.6 Dubletos	29
3.7 Espectro de energia	30
4. <i>Estados Coerentes de SU(2)</i>	35
4.1 Construção do Estados Coerentes de SU(2)	35

4.2	Equações Canônicas de Movimento	39
4.3	Superfície de energia	40
4.3.1	Simetria da superfície de energia	42
5.	<i>Estudo do plano $E \times z$</i>	44
5.1	Pontos críticos	44
5.2	Acoplamento Átomo-Átomo	45
5.2.1	Caso Simétrico ($\Delta E_- = 0$)	45
5.2.2	Comportamento do plano $E \times z$	49
5.2.3	Caso Assimétrico ($\Delta E_- \neq 0$)	50
5.2.4	Acoplamento Átomo-Molécula	50
5.3	Quântico & Clássico	50
5.4	Conclusão	51
6.	<i>O Tunelamento e o Auto Armadilhamento</i>	58
6.1	Equação de estado	58
6.2	Método para a análise	60
6.3	Resultados	61
	<i>Conclusão</i>	66
6.4	Os resultados foram	67
6.5	Perspectivas	68
	<i>Bibliografia</i>	69

LISTA DE FIGURAS

0.1	Formação do BEC	10
3.1	Superposição das funções de onda de cada componente	30
3.2	Níveis de energia do acoplamento átomo-átomo. Em a não há presença de dubletos, sendo que em b e c (dentro da barreira fictícia) temos dubleto e $\lambda_a = \lambda_b$. Em d temos $\lambda_a \neq \lambda_b$ há uma faixa de seqüência de níveis de energias próximos. O espectro acima foi obtido numericamente através da equação 3.26. O poço que aparece é fictício , é só para mostrar a equivalência a um sistema simples.	32
3.3	Níveis de energia do acoplamento átomo-molécula. Em a e b temos o sistema fortemente acoplado; temos uma seqüência de níveis próximos em c com $\lambda_a = \lambda_b$ e em d com $\lambda_a \neq \lambda_b$. O espectro acima foi obtido numericamente através da equação 3.27	33
3.4	Níveis de energia do sistema atômico e molecular com o acoplamento desligado. Em a e b temos $\lambda_a = \lambda_b$; temos uma seqüência de níveis próximos em c e d com $\lambda_a \neq \lambda_b$. O espectro acima foi obtido numericamente através da equação 3.27	34
4.1	Definição da rotação $R_{\theta,\varphi}$ no espaço do momento angular	36
4.2	Esfera clássica	38
4.3	Superfície de energia atômica (fig. c) com $\lambda_a = \lambda_b = 3$ (caso simétrico $\Delta E_- = 0$), $\lambda = 1$ e $\alpha = 0.4$. As linhas paralelas no plano $E \times z$ (fig. b) e $E \times \varphi$ (fig. d) representam as trajetórias (curvas de níveis) do espaço de fase (fig. a) com mesma energia. Estas trajetórias são soluções das equações de movimento 4.27.	41

4.4	Superfície de energia molecular (fig. c) com $\lambda_a = 2, \lambda_b = 4\lambda_a$ (Apesar de considerar $\Delta E_- = 0$ esta estrutura possui uma assimetria natural) , $\lambda = 1$ e $\alpha = 0.4$. As linhas paralelas no plano $E \times z$ (fig. b) e $E \times \varphi$ (fig. d) representam as trajetórias (curvas de níveis) do espaço de fase (fig. a) com mesma energia. Estas trajetórias são soluções das equações de movimento 4.30.	42
4.5	Gráfico de fase do acoplamento átomo-átomo mostrando os tipos de trajetórias, modos e fases π e 0 . Em a : $\lambda_a = \lambda_b = 1.0, \lambda = -0.2, \alpha = -0.1$; b : $\lambda_a = 1.0, \lambda_b = -1.0, \lambda = 4.0, \alpha = 0.55$; c : $\lambda_a = \lambda_b = 1.0, \lambda = -0.08, \alpha = -0.17$; d : $\lambda_a = \lambda_b = 1.0, \lambda = -2.0, \alpha = 0.9$	43
5.1	Contorno do plano $E \times z$. Curvas superior e inferior em fases diferentes conforme sinal de α	46
5.2	Na região escura temos ocorrência de sela. Nos quadrantes $(+, +)$ e $(-, -)$, onde o sinal relativo entre α e λ é positivo, a sela sempre se localizará em $\varphi = 0$ e nos quadrantes $(+, -)$ e $(-, +)$ sempre estará em $\varphi = \pi$	47
5.3	Plano $E \times z$ com concavidade para cima	52
5.4	Esquema representando o comportamento do gráfico $E \times z$ no caso assimétrico atômico.	53
5.5	Esquema para caso representando o comportamento do gráfico $E \times z$ no caso assimétrico molecular.	54
5.6	Superposição entre gráficos do espectro $E_\nu, E_\nu \times \langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ e plano $E \times z$ (silhueta) para o sistema átomo-átomo	55
5.7	Superposição entre gráficos do espectro $E_\nu, E_\nu \times \langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ e plano $E \times z$ (silhueta) para o sistema átomo-molécula	56
5.8	Convergência da bifurcação para o ponto de sela e $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ tende a um contínuo com $J \rightarrow \infty$	57
6.1	Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 6$ e $\alpha = 0, 2$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica.	62
6.2	Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 20$ e $\alpha = 0, 2$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica	63

6.3	Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 6$ e $\alpha = 0,4$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica.	64
6.4	Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 20$ e $\alpha = 0,4$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica	65

Resumo

O chamado condensado Bose-Einstein (BEC) foi previsto pela primeira vez em 1925 por *Albert Einstein*, utilizando para um gás ideal de átomos com spin inteiro (bósons) as idéias de *Satyendra Nath Bose* para fótons, porém, o primeiro condensado só foi observado experimentalmente em 1995. Com isso, abriu-se uma vasta janela de possibilidades de fenômenos quânticos possíveis de serem estudados tanto teoricamente quanto experimentalmente.

Neste trabalho investigamos a dinâmica de um sistema constituído de átomos em dois estados distintos. Nos concentramos na análise dos fenômenos de *tunelamento* e *auto-armadilhamento* (MQST). Para isto utilizamos como ferramenta, os operadores da álgebra $SU(2)$. Paralelamente, estendemos esta investigação para o caso onde há uma componente é constituída de átomos e a outra constituída de moléculas. Na seqüência avaliamos as modificações dos efeitos de tunelamento e auto-armadilhamento após uma transformação de estados coerentes. Sendo que esta transformação nos permitir descrever a dinâmica do sistema através de equações clássicas de movimento.

Abstract

The so called Bose-Einstein Condensed (BEC), for entire spin particle (*bósons*), was predicted in 1925 by *Albert Einstein* based on ideas *Satyendra Nath Bose*. However, it was first observed experimentally only in 1995. Due to special proprieties bosons become a great laboratory for investigating quantum phenomena theoretically and experimentally. In this work we are mainly interested on systems with two distincts bosons.

We will concentrate the analysis on the effect of the coupling between the components investigating the *tunneling* and *macroscopic quantum self trapping* (MQST) phenomena. For this we will use as a tool, the operators of algebra $SU(2)$. We will also extend the analysis to a systems with atom and molecules.

Using spin coherent states we studied the semiclassical dynamics of the systems and we compare it to the quantum solution. We took special attention to the MQST regime and the dynamics relation between the difference of phase and population of both condensates.

INTRODUÇÃO

Uma das principais distinções entre partículas existentes no mundo quântico está contida na chamada **simetria de troca**, a qual separa as partículas em duas grandes famílias: **Bósons** e **Férmions**. Esta simetria, baseada na indistinguibilidade das partículas e no princípio de superposição, tem conseqüências estritamente fortes no comportamento de bósons e férmions. Os férmions, partículas de spin semi-inteiro ($n + \frac{1}{2}$ com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$), tais como: prótons, neutrons e elétrons, obedecem o princípio de exclusão de Pauli, o qual expressa as restrições impostas por esta simetria. Já para os bósons, esta simetria não impõe restrições quanto a ocupação dos níveis de energia pelo aumento da probabilidade de ocupação de um estado já ocupado, assim, vários bósons podem ocupar o mesmo nível de energia. Obviamente, esta simetria tem implicações também na estatística de um conjunto de bósons e ou férmions, na medida em que se realize com restrições ou não a probabilidade de ocupação de certos estados.

No que se refere a este trabalho, trataremos sistemas de bósons em temperaturas baixíssimas onde ocorre o fenômeno de condensação. A condensação de Bose-Einstein é a ocupação macroscópica, isto é, por um conjunto muito grande de bósons, do estado fundamental. Esta condensação forma um sistema “macroscópico” com propriedades quânticas e tem sido de grande interesse na medida em que diversos efeitos quânticos podem ser investigados em profundidade. A robustez do condensado permite, por exemplo, a análise de diversos fenômenos quânticos como a interferência em um sistema constituído por milhares de partículas sendo descritas por uma única função de onda, o que nos dá uma impressionante realização da dualidade onda-partícula.

A obtenção do condensado requer um aparato experimental muito complexo onde um gás rarefeito de bósons é resfriado em várias etapas. Os parâmetros que caracterizam a condensação em um sistema infinito (não armadilhado), são basicamente o comprimento de onda térmico ($\lambda_T = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}$), distância inter-atômica (d) e a interação que é caracterizada pelo comprimento de espalhamento (\mathbf{a}). E quando o sistema está armadilhado, ele é finito e teremos também ω que é a frequência da armadilha. A formação de um BEC, a partir de um gás de bósons, tem que obedecer certas condições, tais como: os

bósons tem que interagir fracamente ($d \gg \lambda_T$) e o gás deve se encontrar diluído, ou seja, em baixíssima densidade ($\rho \sim 10^{-13} \text{cm}^{-3}$). Estas duas condições permitem que a baixas temperaturas, os efeitos associados a simetrias de troca não sejam mascarados pelas interações.

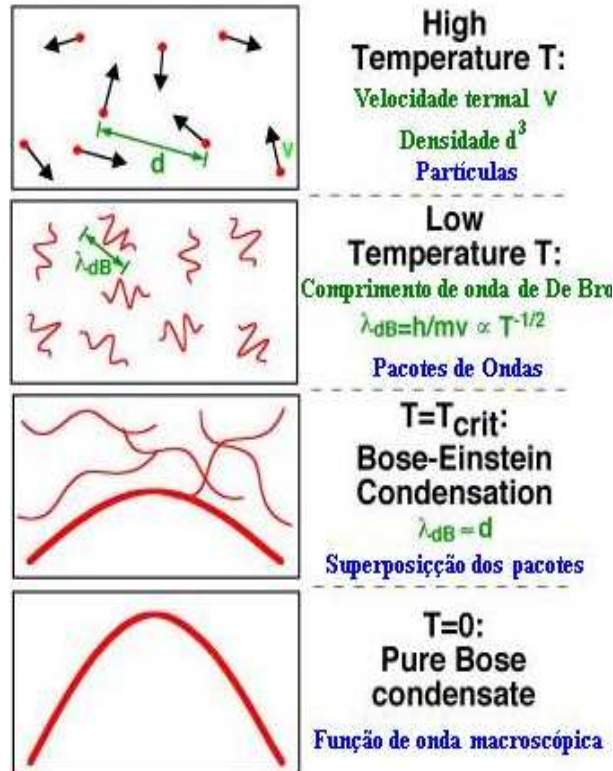


Fig. 0.1: Formação do BEC

No gás, os bósons estão muito afastados um do outro, mais especificamente, a distancia entre dois bósons é muito maior que o alcance de interação, que é definida pelo comprimento de espalhamento ($d \gg a$). Desta maneira, garantimos que a grande maioria das colisões que ocorrem são binárias (figura 0.1). Em altas temperaturas, os comprimentos de onda térmicos são muito pequenos se comparados com a distância inter-atômica e o comprimento de espalhamento, assim podem ser considerados como partículas (o sistema está no regime clássico). Mas quando a temperatura se torna muito baixa, os efeitos quânticos (comportamento ondulatório da matéria) se tornam relevantes. Neste caso os bósons possuem um comprimento de onda de **de Broglie**, λ_T . E ao alcançar a temperatura de condensação (T_c), onde $\lambda_T \sim d$, as funções de onda começam a se superpor.

O gás de Bósons ao se tornar condensado adquire espontâneamente uma maior organização ocasionada pela diminuição da temperatura, a isto chamamos de **quebra es-**

pontânea de simetria. Na fase condensada duas características são importantes: em primeiro lugar, “todos” os bósons ocupam o mesmo estado, isto é, são representados pela mesma função de onda e, em segundo, todos adquirem a mesma fase

O chamado condensado Bose-Einstein, foi previsto pela primeira vez em 1925 por *Albert Einstein*, utilizando num gás ideal de átomos as idéias de *Satyendra Nath Bose* para Fótons. Muitos anos de estudos teórico e experimental seguiram-se até que em 1995, no **JILA**[‡], observou-se o primeiro BEC, com a condensação de um gás de ⁸⁵Rb. Nesse mesmo ano seguiu-se mais duas novas observações, na **Universidade de RICE** com ⁷Li e a outra no **MIT**[§], com ²³Na. A grande importância do BEC está contida na capacidade de se criar, observar e manipular fenômenos quânticos em laboratório, que antes só se tinham resultados teóricos. Com o sucesso da observação de BEC em gases de metais Alcalinos, abriu-se uma vasta janela de possibilidades de fenômenos quânticos, possíveis de serem estudados tanto teoricamente quanto experimentalmente, assim, uma extraordinária expansão nas várias linhas de pesquisas se seguiu.

Atualmente estão ocorrendo estudos onde se vem buscando aplicações tecnológicas para este novo estado da matéria. Estudos envolvendo BEC podem contribuir para viabilização do computador quântico. Uma outra possibilidade que também vem sendo investigada é a viabilização de um laser de matéria, muitas vezes chamado de *Boser*, onde o feixe deste pode ser aplicado em física, química e nanotecnologia, além de outras aplicações que ainda poderão surgir. O BEC também contribui no desenvolvimento em áreas de pesquisa envolvendo superfluides, supercondutância, controle de velocidade e armazenamento de luz, entre muitas e muitas outras.

Neste trabalho, focalizaremos o estudo de condensados com duas componentes. Estes sistemas, constituídos por dois bósons distintos sujeitos a interconversão, dão origem a fenômenos, tais como: tunelamento e auto-armadilhamento quântico (os quais serão esclarecidos mais adiante), que são exclusivos desta classe de BEC.

Objetivos Específicos

Neste trabalho, investigamos a dinâmica de dois tipos de condensados com duas componentes acopladas: o átomo-átomo e o átomo-molécula, onde os consideramos como um sistema infinito (não armadilhado). Então, utilizando o formalismo de quasi-spin, construímos a hamiltoniana efetiva para o problema através de bases não ortogonais, tendo

[‡] Formalmente chamado de Joint Institute for Laboratory Astrophysics

[§] Massachusetts Institute of Technology

como ponto de partida estados coerentes de spin [1]. O intuito deste trabalho é fazer um estudo das propriedades destes condensados comparando com um tratamento puramente quântico, onde observaremos a existência e a relação entre tunelamento e MQST (abreviação em inglês de *Auto-Armadilhamento Macroscópico Quântico*), conforme os parâmetros que representam a interação e o acoplamento.

Descrição do Trabalho

No primeiro capítulo, uma breve revisão sobre o BEC (sua formação, composição, interações e acoplamentos) foi feita; no capítulo seguinte abordamos o modelo, os acoplamentos e as devidas aproximações. No capítulo 3, obtivemos a hamiltoniana na representação de Quasi-Spin (momento angular – álgebra $\mathbf{su}(2)$) empregando a parametrização de Schwinger na hamiltoniana de dois modos, obtida no capítulo 2. E com a diagonalização, utilizando um método numérico, obtivemos os autovetores e autovalores (Energias), e da mesma maneira, o espectro do sistema em questão, para observar a ocorrência de dubletos. Os dubletos são níveis de energia muito próximos e estão diretamente ligados com a probabilidade de tunelamento entre as componentes. No capítulo 4, através de uma transformação unitária utilizando estados coerentes, levamos a hamiltoniana de uma descrição quântica à uma descrição semi-clássica. Assim, com esta transformação, os operadores de quasi-spin tornam-se variáveis clássicas (c-numbers). Com a nova Hamiltoniana plotamos a superfície de energia $E(z, \varphi)$ em $3d$ onde $z \equiv j_z/j$. Um dos planos desta superfície é o espaço de fase z , e para fazer uma conexão entre o espectro de energia e o espaço de fase também estudamos o plano $E \times z$. Após uma exaustiva análise dos gráficos da energia, no capítulo 5, fizemos uma descrição do comportamento destes, com relação a variação dos parâmetros de interação e acoplamento e os relacionamos ao espectro de energia obtido no capítulo 3. Na seqüência iremos estudar a evolução temporal dos estados coerentes e observar os efeitos do tunelamento.

Capítulo 1

Revisão

1.1 Composição e Tipos de BECs

Os Condensados Bose-Einstein se caracterizam pela ocupação macroscópica do estado fundamental por partículas chamadas de **Bósons**, em temperaturas próximas do zero absoluto. As partículas aqui consideradas são átomos neutros (sem carga), que por sua vez são compostos de Férmions, (Prótons, Nêutrons e Elétrons). A configuração de spin eletrônica e nuclear pode ser tal, que conferem ao átomo um valor inteiro de spin hiperfino. O spin hiperfino (**F**) é gerado pela interação de mesmo nome que spin eletrônico total (**J**) com o spin nuclear (**I**).

Experimentalmente, átomos alcalinos (como ^{85}Rb , ^{23}Na , ^7Li , etc) são os mais utilizados para formar um gás de bósons, pois a estrutura interna (eletrônica e nuclear) lhes conferem spin hiperfino inteiro. Os átomos alcalinos no estado fundamental tem spin eletrônico total igual a $\mathbf{J} = \mathbf{s} = 1/2$ devido a um elétron ocupado o orbital “s” na camada mais externa, e os restantes ocupam camadas fechadas. Este ao acoplar com o spin nuclear, e dependendo da configuração do spin nuclear, pode conferir ao átomo spin hiperfino com valor inteiro. Pode-se obter bósons alcalinos isótopos, bastando para isto valores de spin nuclear diferentes. A partir de isótopos alcalinos podemos formar dois ou mais bósons distintos, bastando estarem em estados hiperfinos diferentes. Com isso podemos formar BEC a partir de um gás de bósons de um mesmo elemento em estados hiperfinos diferentes.

1.2 BEC com duas componentes

Atualmente muitos estudos vem sendo feitos em BEC's com mais de uma componente, devido ao fato deste tipo de sistema poder gerar uma gama de fenômenos que não ocorrem no condensado com uma só componente. Dentre estes fenômenos estão os que nos motivaram a produzir este trabalho: o efeito de auto-armadilhamento quântico macroscópico [2]-[4], as oscilações de Josephson [2, 3] e a dinâmica de tunelamento [2, 3, 9, 8] entre componentes.

Os condensados multicomponentes, são aqueles constituídos por dois tipos distintos de bósons, e podem ser: espécies químicas diferentes, isótopos, ou um mesmo átomo alcalino em estados hiperfinos distintos. O primeiro experimento com condensados multicomponentes realizado no **JILA** utilizou ^{87}Rb com uma parte dos bósons no estado $|F = 2, m_F = 2\rangle$ e a outra no $|F = 1, m_F = -1\rangle$.

Observe, como exemplo, que neste sistema além das interações intra e inter-componentes, há ainda uma interação que causa o que chamamos de um *spin flip* e com isso gera a transformação dos bósons de uma componente em bósons da outra, isto, é a interconversão. Um outro tipo de sistema com duas componentes que permite o acoplamento é o composto por átomos e moléculas. As moléculas são formadas pela combinação de dois átomos e a interconversão se dá pelo processo de associação e dissociação.

1.3 As Interações

Nos condensados de duas componentes apresentam interações de bósons de mesmo tipo e de diferentes tipos, e que são proporcionais ao comprimento de espalhamento \mathbf{a} .

Como dito anteriormente, as colisões binárias são as mais freqüentes no gás de bósons diluídos. Em temperaturas muito baixas os átomos têm energia translacional relativa muitíssimo baixa e a teoria de espalhamento nos diz que as colisões binárias são descritas puramente por *ondas-s*, e caracterizadas pelo comprimento de espalhamento \mathbf{a} . De um modo simples, este comprimento de espalhamento nos informa o alcance efetivo da interação dos átomos. Com a informação sobre o comprimento de espalhamento, podemos caracterizar algumas propriedades que o BEC possui. Quando $\mathbf{a} > 0$ a interação é repulsiva, para $\mathbf{a} < 0$ temos o caso atrativo, podendo haver neste último, o fenômeno do colapso do BEC. O comprimento de espalhamento \mathbf{a} pode ser obtido via espectroscopia, ou teoricamente via teoria de espalhamento, sabendo-se por antecipação do potencial de interação.

As interações entre as partículas de mesma componente e de diferentes componentes são descritas pelo pseudo-potencial de dois corpos do tipo esfera dura [11]-[13] com o raio dado pelo comprimento de espalhamento. Isto facilitará a descrição teórica da dinâmica do BEC através da equação de *Gross-Pitaevskii* [12, 13].

1.4 Os Acoplamentos

Aqui vamos estudar paralelamente dois *condensados com duas componentes*. O tipo átomo-átomo e o outro átomo-molécula. A constante de acoplamento em ambos os casos será representado por α . No acoplamento átomo-átomo [14]-[20] a inter conversão é realizada pela transição Raman induzida por feixes de laser. O acoplamento átomo-molécula pode, segundo a literatura corrente, surgir através da Ressonância de Feshbach [2, 8],[22]-[23] ou ser induzida por Fotoassociação Raman [4]-[7]. Uma característica interessante neste sistema com átomos e moléculas, é que podemos controlar a interação entre os átomos por meio de um campo magnético externo [22]. Embora sendo diferentes técnicas de se produzir condensados moleculares a partir de condensados atômicos, os dois últimos modelos podem ser matematicamente semelhantes. Em ambos os tipos de sistemas acima descritos, veremos se existe a possibilidade de observarmos **MQST**, que é caracterizado pela manutenção de uma ocupação macroscópica ou significativa, de uma das componentes em detrimento da outra, bem como oscilações coerentes inter componentes [4]-[7], além de tunelamento.

Capítulo 2

O modelo

O modelo que descreve a dinâmica dos condensados com duas componentes acopladas e interagentes é dado, em segunda quantização, pela seguinte densidade Hamiltoniana de muitos corpos

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_a + \hat{\mathcal{H}}_b + \hat{\mathcal{H}}_{int} + \hat{\mathcal{H}}_{acop} + \hat{\mathcal{H}}_{Perd} \quad (2.1)$$

Como estamos utilizando segunda quantização, cada termo da densidade hamiltoniana é composta de operadores destruição $\hat{\Psi}_c$ e criação $\hat{\Psi}_c^\dagger$ de partículas numa posição \mathbf{r} em um tempo t . Cada termo será descrito a seguir.

Os termos relacionados a cada componente são

$$\hat{\mathcal{H}}_c = \hat{\Psi}_c^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_c} + \epsilon_c + V(\mathbf{r}) + \frac{\lambda_c}{2} \hat{\Psi}_c^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

onde $c = a$ ou b . $V(\mathbf{r})$ é o potencial que descreve a armadilha. A interação entre bósons de mesma componente é dada por $\lambda_c = \frac{4\pi\hbar^2 a_c}{m_c}$, que leva em consideração a massa m_c das partículas das componentes em questão, e o comprimento de espalhamento \mathbf{a}_c . As constantes ϵ_a e ϵ_b , são parâmetros que permitem um controle externo de cada componente. Este controle (*detuning*) é devido a ação de um potencial externo extra, tais como, laser para o acoplamento átomo-átomo [14] e campo magnético para acoplamento átomo-molécula[8, 19, 22].

A interação entre duas componentes diferentes é representada por

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \lambda \hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_a(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_b(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

Quando as componentes estão superpostas, as partículas de diferentes componentes colidem e a interação entre elas nos é dada por $\lambda = \frac{4\pi\hbar^2 a_{ab}}{m}$, onde a_{ab} é o comprimento de

espalhamento entre as partículas que colidem e m é a massa reduzida.

Temos que $\hat{\mathcal{H}}_{acop}$ é o termo responsável pelo tipo de interconversão. No caso átomo-átomo este acoplamento é gerado por laser via transição Ramam, temos:

$$\hat{\mathcal{H}}_{acop}^{(A)} = \frac{\alpha}{2} [\hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r})e^{-i\Delta t} + \hat{\Psi}_b(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})e^{i\Delta t}]. \quad (2.4)$$

O valor de Δ , o qual consideramos zero, neste acoplamento representa a diferença entre as freqüência dos dois laser que estimulam o acoplamento [14]. O segundo é o acoplamento átomo-molécula, controlado externamente por um campo magnético, que regula a ressonância de Feshbach.

$$\hat{\mathcal{H}}_{acop}^{(FR)} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} [\hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}_b(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})] \quad (2.5)$$

Nos termos de acoplamento acima, temos a constante α que carrega a informação sobre o tipo de acoplamento. No acoplamento átomo-átomo, em α está a informação sobre a freqüência efetiva de *Rabi* [14]. No acoplamento átomo-molécula, α contém a informação sobre a matriz do espalhamento ressonante de Feshbach [21, 22].

Através do termo $\hat{\mathcal{H}}_{Perd}$ podemos levar em consideração as perdas que ocorrem no sistema, que em geral, são classificadas em dois tipos: dissipação e decoerência. Iremos tratar as perdas em uma outra oportunidade.

A Hamiltoniana do sistema é obtida integrando-se a equação 2.1 no volume

$$\hat{H} = \int \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}^{A,FR} &= \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_a} + \epsilon_a + V(\mathbf{r}) + \frac{\lambda_a}{2} \hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}_a(\mathbf{r}) \\ &+ \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_b} + \epsilon_b + V(\mathbf{r}) + \frac{\lambda_b}{2} \hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_b(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}_b(\mathbf{r}) \\ &+ \lambda \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r})\hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_b(\mathbf{r}) + \hat{H}_{acop}^{(FR)} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Acoplamento Átomo-Átomo

$$\hat{H}_{acop}^A = \frac{\alpha}{2} \int d^3\mathbf{r} [\hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r})e^{-i\Delta t} + \hat{\Psi}_b(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})e^{i\Delta t}] \quad (2.8)$$

Acoplamento Átomo-Molécula

$$\hat{H}_{acop}^{FR} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \int d^3\mathbf{r} [\hat{\Psi}_b^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}_b(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r})] \quad (2.9)$$

2.1 Dinâmica do condensado com duas componentes

Por meio das equações de Hamilton, temos que a dinâmica do sistema representada por meio da equação de movimento de Heisenberg

$$i\hbar\dot{\hat{\Psi}}(\mathbf{r}) = [\hat{H}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r})] \quad (2.10)$$

Para descrever o condensado com duas componentes, temos uma equação de movimento para cada componente.

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_a(\mathbf{r}) &= [\hat{H}(\mathbf{r})\hat{\Psi}_a(\mathbf{r})] \\ i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_b(\mathbf{r}) &= [\hat{H}(\mathbf{r})\hat{\Psi}_b(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (2.11)$$

Com a utilização das relações de comutação bosônicas para operadores de campo, $[\hat{\Psi}_c^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{c'}(\mathbf{x})] = \delta_{c,c'}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$, sendo que para nosso caso, tanto c quanto c' podem assumir os rótulos a ou b , gerando as seguintes equações não lineares acopladas:

$$\text{Atômica} \left\{ \begin{aligned} i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_a &= -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_a}\hat{\Psi}_a + \epsilon_a\hat{\Psi}_a + \lambda_a\hat{\Psi}_a^\dagger\hat{\Psi}_a\hat{\Psi}_a + \lambda\hat{\Psi}_b^\dagger\hat{\Psi}_b\hat{\Psi}_a + \alpha\hat{\Psi}_b, \\ i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_b &= -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_b}\hat{\Psi}_b + \epsilon_b\hat{\Psi}_b + \lambda_b\hat{\Psi}_b^\dagger\hat{\Psi}_b\hat{\Psi}_b + \lambda\hat{\Psi}_a^\dagger\hat{\Psi}_a\hat{\Psi}_b + \alpha\hat{\Psi}_a \end{aligned} \right. \quad (2.12)$$

e

$$\text{Molecular} \left\{ \begin{aligned} i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_a &= -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_a}\hat{\Psi}_a + \epsilon_a\hat{\Psi}_a + \lambda_a\hat{\Psi}_a^\dagger\hat{\Psi}_a\hat{\Psi}_a + \lambda\hat{\Psi}_b^\dagger\hat{\Psi}_b\hat{\Psi}_a + \sqrt{2}\alpha\hat{\Psi}_b\hat{\Psi}_a^\dagger \\ i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_b &= -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_b}\hat{\Psi}_b + \epsilon_b\hat{\Psi}_b + \lambda_b\hat{\Psi}_b^\dagger\hat{\Psi}_b\hat{\Psi}_b + \lambda\hat{\Psi}_a^\dagger\hat{\Psi}_a\hat{\Psi}_b + \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\hat{\Psi}_a\hat{\Psi}_a \end{aligned} \right. \quad (2.13)$$

O estado fundamental, bem como propriedades termodinâmicas, podem ser obtidas pelas equações acima, mas são extremamente difíceis de se resolver. Partiremos, então, para um tratamento aproximado.

2.2 Aproximações

O operador de campo $\hat{\Psi}_c$ pode ser expandido em termos de estados de partículas simples

$$\hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^c(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{k}} \quad (2.14)$$

$$\hat{\Psi}_c^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}^{c*}(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{k}'}^\dagger \quad (2.15)$$

Onde ψ_k (ψ_k^*) é uma função de partícula simples que nos fornece a distribuição das partículas destruídas (criadas) pelo operador \hat{c} (\hat{c}^\dagger) em um dado modo caracterizado pelo momento \mathbf{k} (\mathbf{k}') e definido por

$$\hat{c}_{\mathbf{k}} = \int \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (2.16)$$

Estes operadores bosônicos são definidas nos espaço de *Fock* através das seguintes relações abaixo:

$$\begin{aligned} \hat{a}_k |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b, \dots\rangle &= \sqrt{N_{\mathbf{k}}^a + 1} |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a - 1, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b, \dots\rangle \\ \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b, \dots\rangle &= \sqrt{N_{\mathbf{k}}^a} |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a + 1, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b, \dots\rangle \\ \hat{b}_{\mathbf{k}} |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b, \dots\rangle &= \sqrt{N_{\mathbf{k}}^b + 1} |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b - 1, \dots\rangle \\ \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b, \dots\rangle &= \sqrt{N_{\mathbf{k}}^b} |N_0^a, N_1^a, \dots, N_{\mathbf{k}}^a, \dots; N_0^b, N_1^b, \dots, N_{\mathbf{k}}^b + 1, \dots\rangle \end{aligned} \quad (2.17)$$

Os $N_{\mathbf{k}}$ são os números de partículas que ocupam um certo modo \mathbf{k} . Os operadores \hat{c} e \hat{c}^\dagger obedecem a relação de comutação bosônica

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}'}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \quad , \quad [\hat{b}_{\mathbf{k}'}, \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \quad , \quad [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger] = [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger] = 0 \quad (2.18)$$

A partir daqui podemos utilizar duas aproximações. Em uma obteremos uma Hamiltoniana de dois modos, composta de operadores de criação e destruição bosônicos, e na outra, obteremos equações de movimento acopladas semi-clássicas, que descrevem o BEC com duas componentes em temperatura zero.

2.2.1 Hamiltoniana de dois modos

Como o BEC é um sistema de partículas muito peculiar, onde a grande maioria das partículas ocupa o modo condensado $\mathbf{k} = 0$, vamos separar a soma na equação 2.14 em dois termos

$$\hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) = \psi_o^c(\mathbf{r}) \hat{c}_o + \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^c(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{k}} \quad (2.19)$$

O primeiro termo representa as partículas condensadas que comportam-se coerentemente em um único modo de $k = 0$. O segundo termo considera as partículas em outros modos não condensados (excitações). Como em um BEC a grande maioria da população de partículas está no modo condensado, podemos desconsiderar o segundo termo. Estas considerações nos levam a *aproximação de dois modos*, que é válida enquanto o sistema estiver diluído e as colisões entre dois corpos não produzam excitações que possam alterar o estado fundamental.

Como só consideramos o modo condensado ($\mathbf{k} = 0$) e independente do tempo, com isso $\psi_o^c(\mathbf{r}) \equiv \psi_c(\mathbf{r})$ e $\hat{c}_o \equiv \hat{c}$, temos:

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) &= \hat{c}\psi_c(\mathbf{r}) \\ \hat{\Psi}_c^\dagger(\mathbf{r}) &= \hat{c}^\dagger\psi_c^*(\mathbf{r}).\end{aligned}\tag{2.20}$$

E como a distribuição dos bósons nos estados excitados ($k \neq 0$) é praticamente zero, reescrevemos as bases relacionadas com o espaço de *Fock* da seguinte forma:

$$|N_0^a, 0, \dots, 0; N_0^b, 0, \dots, 0\rangle \equiv |N_a, N_b\rangle,\tag{2.21}$$

então, substituindo o operador campo 2.20 nas Hamiltonianas 2.7 temos

Atômico

$$\begin{aligned}\hat{H}^A &= \varepsilon_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \varepsilon_b \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{U_a}{2} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} + \frac{U_b}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{b} \\ &+ U \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{a} \hat{b} + \frac{\Omega}{2} [\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a}];\end{aligned}\tag{2.22}$$

Molecular

$$\begin{aligned}\hat{H}^{FR} &= \varepsilon_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \varepsilon_b \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{U_a}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2 + \frac{U_b}{2} (\hat{b}^\dagger \hat{b})^2 \\ &+ U \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{a} \hat{b} + \frac{\Omega}{\sqrt{2}} [\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a} \hat{a}].\end{aligned}$$

Nesta aproximação, os parâmetros de interação e de acoplamento são modificados pelas integrais de superposição.

$$\begin{aligned}\varepsilon_a &= \int \psi_a \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_a} + \varepsilon_a + V(\mathbf{r}) \right] \psi_a^* d^3 \mathbf{r} \\ \varepsilon_b &= \int \psi_b \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_b} + \varepsilon_b + V(\mathbf{r}) \right] \psi_b^* d^3 \mathbf{r}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_a &= \lambda_a \int |\psi_a|^4 d^3\mathbf{r} \\
U_b &= \lambda_b \int |\psi_b|^4 d^3\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2.23}$$

$$U = \lambda \int |\psi_a|^2 |\psi_b|^2 d^3\mathbf{r} . \tag{2.24}$$

No acoplamento atômico

$$\Omega = \alpha \int [\psi_a^* \psi_b + \psi_a \psi_b^*] d^3\mathbf{r}$$

e no molecular

$$\Omega = \alpha \int [\psi_b^* \psi_a \psi_a + \psi_b \psi_a^* \psi_a^*] d^3\mathbf{r} .$$

Em se considerando o BEC não armadilhado, $V(\mathbf{r}) = 0$ e homogêneo, podemos utilizar como solução para ψ uma função de onda plana em um cubo de aresta L , $\psi_k^c(\mathbf{r}) = \mathcal{N} \mathbf{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ e \mathcal{N} é a normalização. Então utilizando como normalização

$$\int |\psi_k^c|^2 d^3\mathbf{r} = 1 \tag{2.25}$$

obtemos o termo de normalização que fica $\mathcal{N} = 1/\sqrt{V}$ onde $V = L^3$ é o volume.

Temos que o termo cinético será $\int -\psi_k^c \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_c} \psi_k^c d^3\mathbf{r} = \int \frac{1}{V} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} d^3\mathbf{r} \equiv K$, então fazendo as devidas substituições nas integrais 2.23 e integrando de 0 a L , os termos de interação ficam:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_a &= \epsilon_a + K \\
\varepsilon_b &= \epsilon_b + K \\
U_a &= \frac{\lambda_a}{V} \\
U_b &= \frac{\lambda_b}{V} \\
U &= \frac{\lambda}{V}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

No Acoplamento atômico

$$\Omega = 2\alpha$$

e no Acoplamento molecular

$$\Omega = \frac{2\alpha}{\sqrt{V}} \tag{2.28}$$

Estando o BEC armadilhado ou não, a estrutura Hamiltoniana \hat{H} não se modifica, já que a solução para ψ ocasionará apenas alteração no termo cinético (ε_a , ε_b) e nos parâmetros

de interações (U_a , U_b e U) e acoplamento (Ω), devido as integrais de superposição. Esta Hamiltoniana em termos dos operadores criação e destruição, juntamente com sua base, pode ser mapeada para dentro do espaço de quasi-spin, que será tratado nos próximos capítulos para estudar a dinâmica dos sistemas considerados.

Capítulo 3

Formalismo de Quasi-Spin

Neste capítulo, vamos reescrever a Hamiltoniana 2.22 da página 20 em termos dos operadores de momento angular, utilizando as relações trabalhadas por Schwinger, que conectam a álgebra de oscilador com a álgebra de momento angular $\mathbf{SU}(2)$ [16]-[19]. Isto nos ajudará no tratamento da Hamiltoniana, pois esta terá outra forma que facilitará sua diagonalização e, com isso, a obtenção do espectro de energia. Mais adiante, a Hamiltoniana neste formalismo será transformada em uma Hamiltoniana quasi-clássica por intermédio de estados coerentes na base de momento angular.

3.1 Hamiltoniana Atômica

A conexão entre a álgebra de oscilador harmônico e a de momento angular nos é fornecida pelos operadores abaixo relacionadas

$$\begin{aligned}\hat{J}_+ &= b^\dagger a \\ \hat{J}_- &= a^\dagger b \\ \hat{J}_z &= \frac{1}{2}(b^\dagger b - a^\dagger a)\end{aligned}\tag{3.1}$$

Podemos ver pela relação acima que o operador \hat{J}_z está ligado com a diferença de população entre as componentes.

Pode-se demonstrar facilmente que

$$[\hat{J}_\pm, \hat{J}_\mp] = \pm 2\hat{J}_z \quad , \quad [\hat{J}_\pm, \hat{J}_z] = \mp \hat{J}_\pm \quad , \quad [\hat{J}_z, \hat{J}^2] = 0 \quad , \quad [\hat{J}_\pm, \hat{J}^2] = 0 \tag{3.2}$$

onde com $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, chegamos a

$$J^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \quad (3.3)$$

\hat{J}_+ , \hat{J}_- e \hat{J}_z são denominados de **operadores de quasi-spin** e satisfazem as regras de comutação 3.2, as quais são análogas as de spin. Estes três operadores formam uma **álgebra de Lie**, já que a comutação entre os elementos desse grupo de operadores gera novamente estes mesmos elementos. \hat{J}^2 é o operador associado com momento angular total \hat{J} , que comuta com todos os operadores que formam esta algebra de Lie e por isso é denominado **operador** ou **invariante de Casimir**. O operador \hat{J} está associado com \hat{N} o número total de partículas do sistema, que é uma quantidade conservada, enquanto \hat{J}_z está associado com a diferença de população entre as componentes. Os operadores \hat{J}_+ e \hat{J}_- são definidos de forma a satisfazer a relação de comutação 3.2 e são chamados respectivamente de operadores **levantamento** e **abaixamento**. Onde temos

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$$

. Agora fazendo uso da relação 3.1 obtemos

$$\hat{J}^2 = \hat{j}(\hat{j} + 1) \quad (3.4)$$

$$\hat{j} \equiv \frac{\hat{N}}{2} \quad (3.5)$$

onde fizemos

$$\hat{N} = (\hat{N}_a + \hat{N}_b) \quad (3.6)$$

$$\hat{N}_b = b^\dagger b \quad (3.7)$$

$$\hat{N}_a = a^\dagger a. \quad (3.8)$$

Com um pouco mais de algebrismo obtemos

$$a^\dagger a = (\hat{j} - \hat{J}_z), \quad (3.9)$$

$$b^\dagger b = \hat{j} + \hat{J}_z. \quad (3.10)$$

Agora fazendo as devidas substituição na Hamiltoniana atômica 2.22 da página 20, já considerando os sistemas como não armadilhado e homogêneo, temos

$$\hat{H} = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)\hat{j} + (\varepsilon_b - \varepsilon_a)\hat{J}_z + \frac{\lambda_a}{2V} (\hat{j} - \hat{J}_z)(\hat{j} - \hat{J}_z - 1)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\lambda_b}{2V} (\hat{j} + \hat{J}_z)(\hat{j} + \hat{J}_z - 1) + \frac{\lambda}{V} (\hat{j}^2 - \hat{J}_z^2) \\
& + \alpha(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Conforme a construção mostrada em [19], a base relacionada a esses operadores é

$$|j = N/2, m_j = N_b - N/2\rangle \tag{3.12}$$

3.2 Hamiltoniana de Feshbach

Da mesma forma que em [19], temos a seguinte base para o modelo que descreve o acoplamento átomo-molécula.

$$|j = N/4, m_j = N_b - N/4\rangle \tag{3.13}$$

Os novos operadores relacionados com a base acima são

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+ &= \frac{1}{\sqrt{2(a^\dagger a + 1)}} a a b^\dagger \\
\hat{J}_- &= a^\dagger a^\dagger b \frac{1}{\sqrt{2(a^\dagger a + 1)}} \\
\hat{J}_z &= \frac{1}{4}(2b^\dagger b - a^\dagger a) \\
\hat{J}^2 &= \hat{j}(\hat{j} - 1) \\
\hat{j} &= \frac{\hat{N}}{4} \\
\hat{N} &= a^\dagger a + 2b^\dagger b
\end{aligned} \tag{3.14}$$

então destes obtemos

$$\begin{aligned}
a^\dagger a &= 2(\hat{j} - \hat{J}_z) \\
b^\dagger b &= (\hat{j} + \hat{J}_z) \\
a^\dagger a^\dagger b &= \hat{J}_- \sqrt{4(\hat{j} - \hat{J}_z) + 2} \\
a a b^\dagger &= \sqrt{4(\hat{j} - \hat{J}_z) + 2} \hat{J}_+
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Fazendo as devidas substituições na Hamiltoniana do acoplamento átomo-molécula 2.22 da página 20, temos

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= (\varepsilon_b + 2\varepsilon_a)\hat{j} + (\varepsilon_b - 2\varepsilon_a)\hat{J}_z + \frac{\lambda_a}{V} 2(\hat{j} - \hat{J}_z)(\hat{j} - \hat{J}_z - 1/2) \\
 &+ \frac{\lambda_b}{2V} (\hat{j} + \hat{J}_z)(\hat{j} + \hat{J}_z - 1) + \frac{\lambda}{V} 2(\hat{j}^2 - \hat{J}_z^2) \\
 &+ \frac{\alpha}{V^{1/2}}(\hat{J}_- \sqrt{4(\hat{j} - \hat{J}_z) + 2} + \sqrt{4(\hat{j} - \hat{J}_z) + 2} \hat{J}_+)
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

3.3 Diagonalização

Tendo a Hamiltoniana em mãos, podemos agora encontrar os autovalores e os correspondentes autovetores. Para isso devemos previamente saber que

$$\begin{aligned}
 \hat{j}|j, m_j\rangle &= j|j, m_j\rangle \\
 \hat{J}_z|j, m_j\rangle &= m_j|j, m_j\rangle \\
 \hat{J}_\pm|j, m_j\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)}|j, m_j \pm 1\rangle
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

Daí utilizando a equação

$$\hat{H}|\psi_\nu\rangle = E_\nu|\psi_\nu\rangle \tag{3.18}$$

Onde faremos a expansão do estado $|\psi_\nu\rangle$ nos estados $|j, m_j\rangle$

$$|\psi_\nu\rangle = \sum_{m_j} C_{m_j}^\nu |j, m_j\rangle \tag{3.19}$$

Com autovetores $C_{m_j}^\nu = \langle j, m_j | \psi_\nu \rangle$. Mas para facilitar, omitiremos na base o j e utilizaremos somente $|m_j\rangle$, já que o operador relacionado com o elemento omitido comuta com \hat{J}_z e \hat{J}_\pm , fazendo com que os autovalores tenham uma dependência exclusiva em m_j . Então, utilizando a relação de fechamento $\sum_{m_j} |m_j\rangle\langle m_j| = \mathbb{I}$ na equação 3.18 e multiplicando-a em ambos os lados pela direita por $\langle m'_j|$ temos

$$\begin{aligned}
 \sum_{m_j} \langle m'_j | \hat{H} | m_j \rangle \langle m_j | \psi_\nu \rangle &= E_\nu \sum_{m_j} \langle m'_j | m_j \rangle \langle m_j | \psi_\nu \rangle \\
 \sum_{m_j} \langle m'_j | \hat{H} | m_j \rangle C_{m_j}^\nu &= E_\nu \sum_{m_j} \delta_{m'_j, m_j} C_{m_j}^\nu \\
 \sum_{m_j} \langle m'_j | \hat{H} | m_j \rangle C_{m_j}^\nu &= E_\nu C_{m'_j}^\nu
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

assim ficamos com a equação de autovalor e autovetor

$$[\mathbb{H} - E\mathbb{1}]\mathbb{C} = 0 \quad (3.21)$$

sendo \mathbb{H} a matriz Hamiltoniana que contém os elementos $\langle m'_j | \hat{H} | m_j \rangle$, \mathbb{C} é a que contém os elemento $C_{m_j}^\nu$, sabendo que $C_{m_j}^\nu = C_{m'_j}^\nu$, \mathbb{I} é a matriz identidade e E os autovalores. Sendo assim, agora temos condições de obter os elementos da matriz Hamiltoniana que são,

$$\begin{aligned} \langle m'_j | \hat{H} | m_j \rangle_A &= [(\varepsilon_b + \varepsilon_a)j + (\varepsilon_b - \varepsilon_a)m_j + \frac{\lambda_a}{2V} (j - m_j)(j - m_j - 1) \\ &\quad + \frac{\lambda_b}{2V} (j + m_j)(j + m_j - 1) + \frac{\lambda}{V} (j^2 - m_j^2)] \delta_{m'_j, m_j} \\ &\quad + \alpha [(\sqrt{j(j+1)} - m_j(m_j - 1))] \delta_{m'_j, m_j - 1} \\ &\quad + (\sqrt{j(j+1)} - m_j(m_j + 1))] \delta_{m'_j, m_j + 1} \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \langle m'_j | \hat{H} | m_j \rangle_{FR} &= [(2\varepsilon_a + \varepsilon_b)j + (\varepsilon_b - 2\varepsilon_a)m_j + \frac{2\lambda_a}{V} (j - m_j)(j - m_j - 1/2) \\ &\quad + \frac{\lambda_b}{2V} (j + m_j)(j + m_j - 1) + \frac{2\lambda}{V} (j^2 - m_j^2)] \delta_{m'_j, m_j} \\ &\quad + \frac{\alpha}{V^{1/2}} [(\sqrt{j(j+1)} - m_j(m_j - 1)) \sqrt{4(j - m_j) + 2}] \delta_{m'_j, m_j - 1} \\ &\quad + (\sqrt{4(j - m_j) - 2} \sqrt{j(j+1)} - m_j(m_j + 1))] \delta_{m'_j, m_j + 1} \end{aligned} \quad (3.23)$$

fazendo

$$\frac{1}{j} \langle j', m'_j | \hat{H} | j, m_j \rangle_A = E_{m'_j, m_j}^A \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{j} \langle j', m'_j | \hat{H} | j, m_j \rangle_{FR} = E_{m'_j, m_j}^{FR} \quad (3.25)$$

temos

$$\begin{aligned} E_{m'_j, m_j}^A &= \left[\varepsilon_+ + \varepsilon_- \frac{m_j}{j} + \frac{\lambda_a \rho}{4} \left(1 - \frac{m_j}{j}\right) \left(1 - \frac{m_j}{j} - \frac{1}{j}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\lambda_b \rho}{4} \left(1 + \frac{m_j}{j}\right) \left(1 + \frac{m_j}{j} - \frac{1}{j}\right) + \frac{\lambda \rho}{2} \left(1 - \frac{m_j^2}{j^2}\right) \right] \delta_{m'_j, m_j} \\ &\quad + \frac{2\alpha}{j} \left[\sqrt{j(j+1)} - m_j(m_j - 1) \delta_{m'_j, m_j - 1} + \sqrt{j(j+1)} - m_j(m_j + 1) \delta_{m'_j, m_j + 1} \right] \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$E_{m'_j, m_j}^{FR} = \left[\varepsilon_+ + \varepsilon_- \frac{m_j}{j} + \frac{\lambda_a \rho}{2} \left(1 - \frac{m_j}{j}\right) \left(1 - \frac{m_j}{j} - \frac{1}{j}\right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\lambda_b \rho}{8} \left(1 + \frac{m_j}{j}\right) \left(1 + \frac{m_j}{j} - \frac{1}{j}\right) + \frac{\lambda \rho}{2} \left(1 - \frac{m_j^2}{j^2}\right) \Big] \delta_{m'_j, m_j} \\
& + \frac{\alpha \sqrt{\rho}}{j^{3/2}} \left[\sqrt{j(j+1) - m_j(m_j - 1)} \sqrt{4(j - m_j) + 2} \delta_{m'_j, m_{j-1}} \right. \\
& \quad \left. + \sqrt{4(j - m_j) - 2} \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j + 1)} \delta_{m'_j, m_{j+1}} \right]
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Onde colocamos $\varepsilon_+ = \varepsilon_a + \varepsilon_b$ e $\varepsilon_- = \varepsilon_b - \varepsilon_a$ para o BEC atômico, e para BEC com moléculas temos $\varepsilon_+ = \varepsilon_b + 2\varepsilon_a$ e $\varepsilon_- = \varepsilon_b - 2\varepsilon_a$.

3.4 Valores esperados de \hat{J}_z ($\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$)

Nos gráficos colocamos os valores esperados $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ para cada auto-estado ν de energia. Os valores esperados do operador de \hat{J}_z nos fornecem a diferença de população relacionada a cada nível de energia ν dos $2j + 1$ existentes. Figuras 3.2; 3.3; 3.4;

$$\langle \hat{J}_z \rangle_\nu = \langle m'_j | \hat{J}_z | m_j \rangle = \sum_{m_j=-J}^J |C_{m_j}^\nu|^2 m_j \tag{3.28}$$

e com isso podemos plotá-los junto com os seus respectivos espectros de energia e observar a evolução de $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ conforme os níveis de $\nu = 1$ até $\nu = 2j + 1$. Observem que acompanhado a interpretação feita anteriormente no caso simétrico os auto-estados correspondem a valores de $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ de mesmo módulo, respeitando a simetria da hamiltoniana. Uma combinação linear dos auto-estados degenerados deveria gerar estados com $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu = 0$. Entretanto, esta combinação linear só ocorre com tunelamento.

Um fato muito interessante visto nos gráficos mencionados acima, é a bifurcação de $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$, caracterizando a existência de MQST ($\langle \hat{J}_z \rangle_\nu \neq 0$) que prevêm de um tratamento quântico puro.

3.5 Método de análise

A matriz densidade hamiltoniana é não diagonal devido ao termo que leva em conta o acoplamento, que mistura os estados. Agora com ajuda de um algoritmo em *FORTRAN* diagonalizaremos a Hamiltoniana e obteremos os autovalores (energias) e os autovetores. Após a diagonalização teremos então $\nu = 2j + 1$ possíveis níveis de energia. Com as energias em mãos podemos avaliá-las plotando-as em forma de níveis de energia. Nesta primeira análise estaremos interessados no surgimentos de dubletos, que podem indicar

tunelamento e também na diferença de população média $\langle \hat{J}_z \rangle$ que pode representar o auto armadilhamento quântico macroscópico (MQST).

Todos os gráfico, neste e nos capítulos seguintes serão avaliados se tomando $j = 20$ exceto quando indicado. Nós temos que: $\lambda_{a\rho}$, $\lambda_{b\rho}$, $\lambda\rho$, α no acoplamento atômico e $\alpha\sqrt{\rho}$ no acoplamento molecular, tem dimensão de energia. Para simplificar, podemos considerar $\rho = 1$ ou simplesmente embuti-lo dentro do parâmetro (Ex. $\lambda_{a\rho} \equiv \lambda_a$) e considerando estes como tendo dimensão de energia.

3.6 Dubletos

Dubletos são níveis de energia muito próximos surgidos de uma quebra de degenerescência, ou seja, devido ao desdobramento de um nível em dois. A presença de dubleto é muito comum em sistemas cujo potencial tem o formato de duplo poço. Eles ocorrem numa certa altura do poço cuja espessura da barreira possibilita o tunelamento. A presença de dubleto no espectro é uma forte indicação de que o sistema apresenta tunelamento.

Um sistema análogo ao tratado aqui é um BEC simples (uma componente) sob ação de um poço simples (potencial de armadilhamento), onde o formato do poço pode ser modificado para um formato de duplo poço, e, assim separar o BEC em dois. O tunelamento ocorre quando os bósons podem atravessar a barreira e mudar de poço.

Um modelo que descreve bem a essência de nosso sistema, é o chamado *modelo de dois níveis* bem descrito em [4, 3],[5]-[7]. Conforme o a ilustração 3.1a, quando a barreira está muito baixa, temos o BEC simples. Aqui há um transito livre entre os estados simétrico e anti-simétrico, os quais são uma superposição os estados individuais de cada poço.

$$\Phi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_a + \Phi_b) \quad \Phi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_a - \Phi_b) \quad (3.29)$$

onde S e A , significam *simétrico* e *anti-simétrico*, são os dois níveis do modelo. Onde Φ_S e Φ_A estão defasados de π .

Mas quando a barreira aumenta, a transição entre os estados diminui assim a distancias entre os níveis de energia, a probabilidade de transição está associada as distância entre os níveis (figura 3.1b). Quando os dubletos se formam (figura 3.1c) temos uma barreira pronunciada, mas ainda temos uma probabilidade de transição através da barreira. Quando a barreira é muito alta, transições são proibidas, com isso as energias são degeneradas, e os BEC's localizados em cada poço se comportam de forma independente como se fossem dois poços distintos. Este modelo pode nos guiar na interpretação do

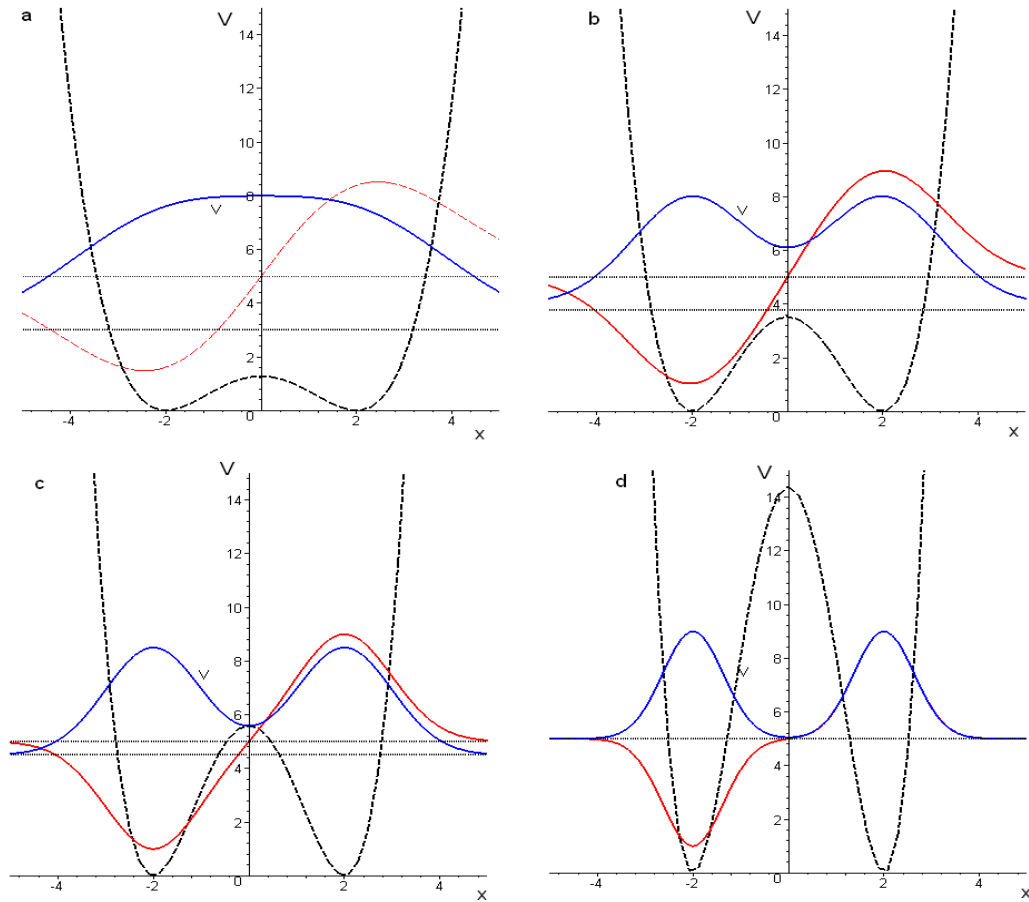


Fig. 3.1: Superposição das funções de onda de cada componente

caso do BEC com duas componentes. No BEC em estados hiperfinos diferentes há um acoplamento que pode transformar os bósons de uma componente em outra, por mudar seu spin hiperfino. Para que o spin mude é necessário que adquira uma quantidade de energia que seja suficiente para isso. Existe então uma barreira a ser rompida para que haja alteração de spin.

A mudança de spin nos condensados de duas componentes é equivalente a mudança de poço no BEC simples. O que temos aqui então é o que chamamos de *tunelamento de spin*.

3.7 Espectro de energia

Em nosso estudo foi encontrada a presença de dubletos caracterizando assim a presença de tunelamento. Todos os $2j + 1$ níveis de energia estarão presentes no espectro, só que alguns dos níveis estarão degenerados. Parte do espectro ficará degenerado quando temos

a presença do dubleto. Podemos classificar os espectros em 4 classes conforme a ocorrência de dubletos. Apenas para ajudar na classificação desenhamos, junto com os espectros e valores esperados $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ (diferença de população), potenciais **hipotéticos**.

Primeiro Tipo

Não há ocorrência de dubletos, os estados estão todos não degenerados. Isso ocorre quando $|2\alpha/\Lambda| \geq 1$ onde $\Lambda = \lambda_a + \lambda_b - 2\lambda$. Figuras 3.2a, 3.3a e b

Isso é análogo a termos um sistema num simples poço, como mostra o potencial hipotético nos gráficos 3.2a e 3.3a.

Segundo Tipo

Parte do espectro possui dubleto que separa a parte degenerada (dentro do duplo poço) da não degenerada. Isso ocorre quando $|2\alpha/\Lambda| < 1$. Figuras 3.2b e c.

Isso é análogo a termos um sistema num poço potencial duplo com largura de barreira variável, onde os níveis mais baixos estão em regiões onde a barreira é muito larga.

Terceiro Tipo

Os estados são degenerados aos pares. Para isso basta $\alpha = 0$. Figuras 3.4a e b

Isso é equivalente a dois sistemas idênticos separados por uma barreira muito alta e larga.

Quarto Tipo

Temos uma seqüência de dubletos. Num caso assimétrico isso ocorre quando $|2\alpha/\Lambda| \leq 1$ e $\lambda_a \neq \lambda_b$. Figuras 3.2d; 3.3c e d; 3.4c e d

Isso é equivalente a termos um sistema em uma armadilha na forma de duplo poço assimétrico. Os dubletos ocorrem na região próxima ao ponto mais alto da barreira.

Esta classe de espectro é muito comum no condensado molecular, pois possui um desequilíbrio natural.

Espectro de energia e diferença de população

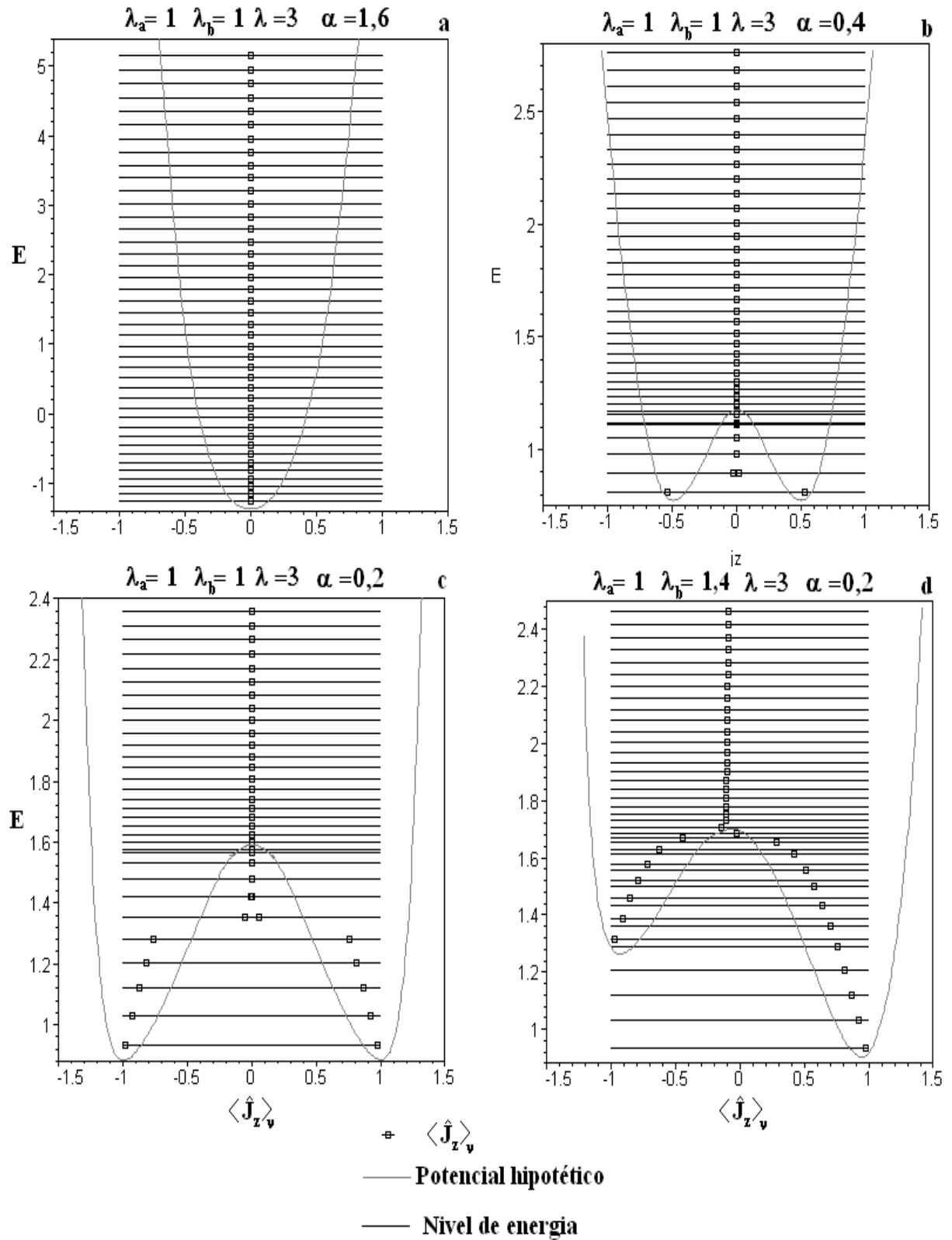


Fig. 3.2: Níveis de energia do acoplamento átomo-átomo. Em **a** não há presença de dubletos, sendo que em **b** e **c** (dentro da barreira fictícia) temos dubleto e $\lambda_a = \lambda_b$. Em **d** temos $\lambda_a \neq \lambda_b$ há uma faixa de sequência de níveis de energias próximos. O espectro acima foi obtido numericamente através da equação 3.26. O poço que aparece é **fictício**, é só para mostrar a equivalência a um sistema simples.

Espectro de energia e diferença de população

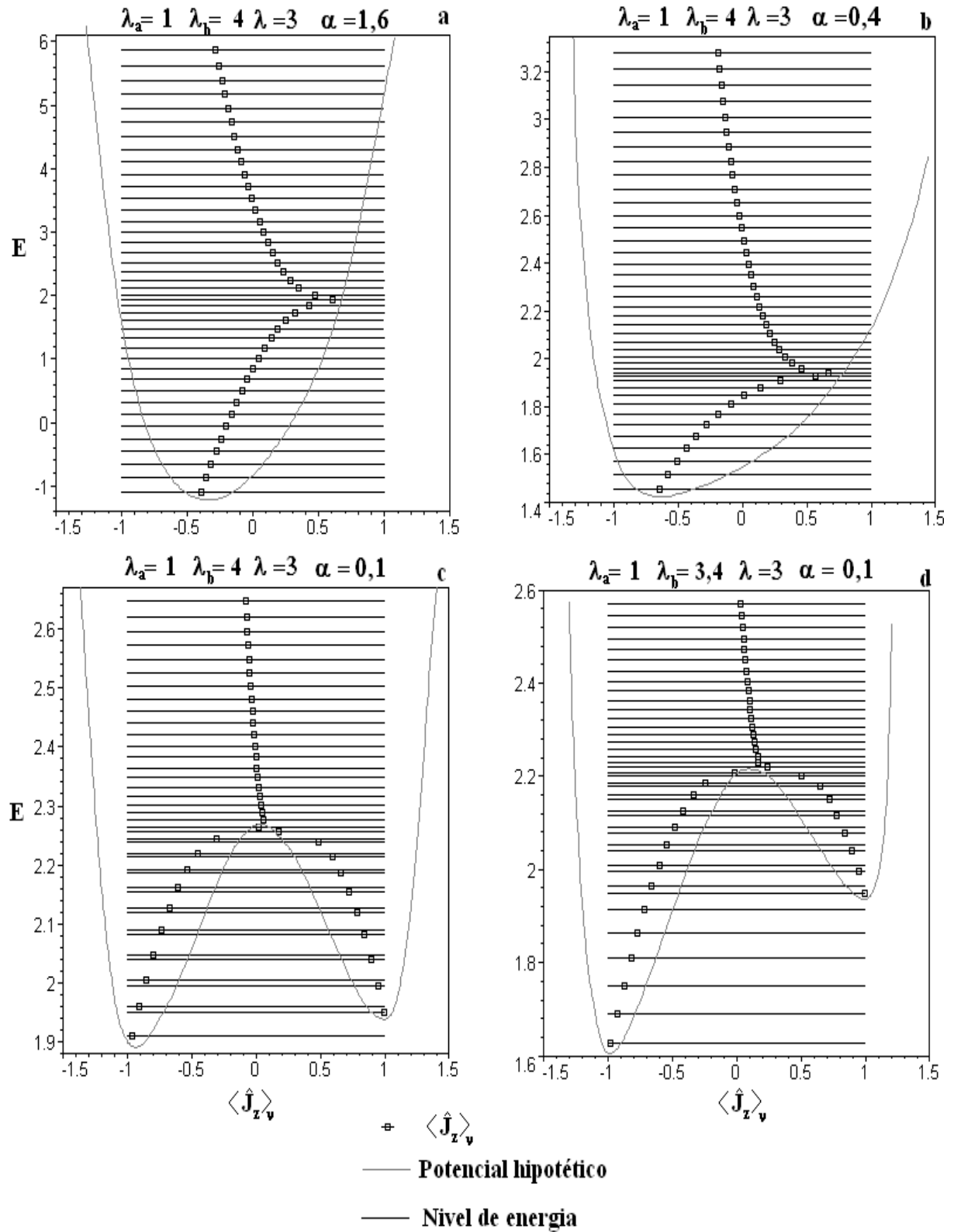


Fig. 3.3: Níveis de energia do acoplamento átomo-molécula. Em a e b temos o sistema fortemente acoplado; temos uma seqüência de níveis próximos em c com $\lambda_a = \lambda_b$ e em d com $\lambda_a \neq \lambda_b$. O espectro acima foi obtido numericamente através da equação 3.27

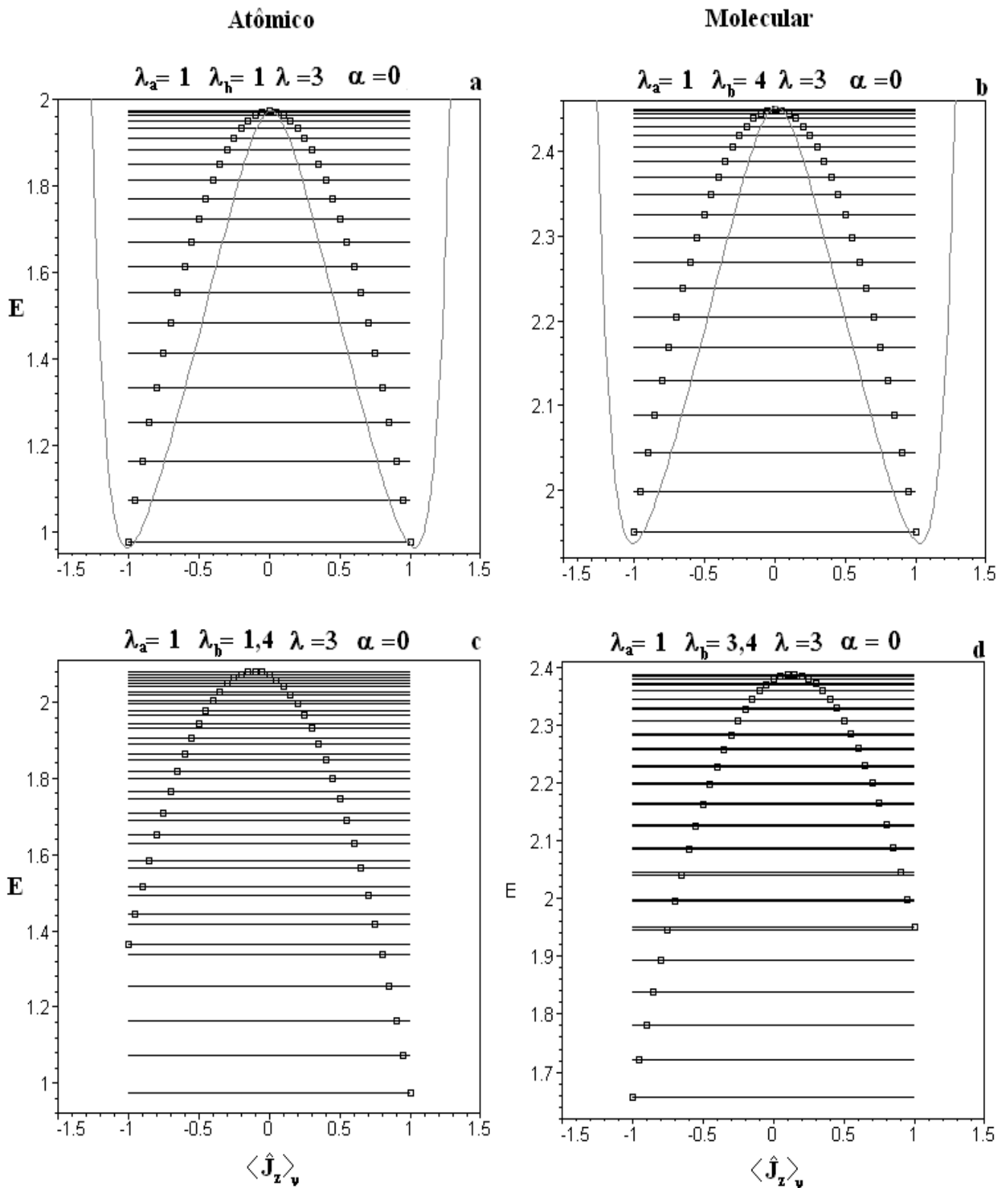


Fig. 3.4: Níveis de energia do sistema atômico e moléculas com o acoplamento desligado. Em **a** e **b** temos $\lambda_a = \lambda_b$; temos uma seqüência de níveis próximos em **c** e **d** com $\lambda_a \neq \lambda_b$. O espectro acima foi obtido numericamente através da equação 3.27

Capítulo 4

Estados Coerentes de $SU(2)$

Neste capítulo vamos introduzir os estados coerentes de $SU(2)$. Como mostraremos a seguir o formalismo de estados coerentes nos permitirá descrever a dinâmica do sistema através de equações clássicas de movimento. Com isso podemos obter analiticamente alguns resultados por estudar o espaço de fase gerado pela variáveis canônicas do sistema.

Na álgebra de oscilador harmônico os estados coerentes são definidos como um auto estado do operador de aniquilação, e são representados por um pacote de onda de mínima incerteza. Mas como estamos utilizando operadores quasi-spin da algebra $SU(2)$ utilizaremos os estados coerentes associados a esta algebra proposto por *Radcliffe* [26] e generalizado por *Perelomov* [27].

4.1 Construção do Estados Coerentes de $SU(2)$

O estado coerente $|\mu\rangle$ nesta álgebra, o qual coincide com o chamado *estado de Bloch*, é gerado a partir da rotação do estado fundamental $|0\rangle$ (fig. 4.1), em torno do vetor $\mathbf{n} = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0)$ [1] o qual se encontra no plano xy . A rotação é realizada pela ação do operador $U(\theta, \varphi)$, no estado $|0\rangle$ (fig. 4.1). O estado apropriado escolhido é auto vetor de \hat{J}_z que possui o menor auto valor $|j, -j\rangle \equiv |0\rangle$.

$$|\mu\rangle = |\theta, \varphi\rangle = \hat{U}(\theta, \varphi)|0\rangle = e^{-i\theta\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}}|0\rangle \quad (4.1)$$

$$\hat{U}(\xi) = e^{(\xi\hat{J}_+ - \xi^*\hat{J}_-)} \quad (4.2)$$

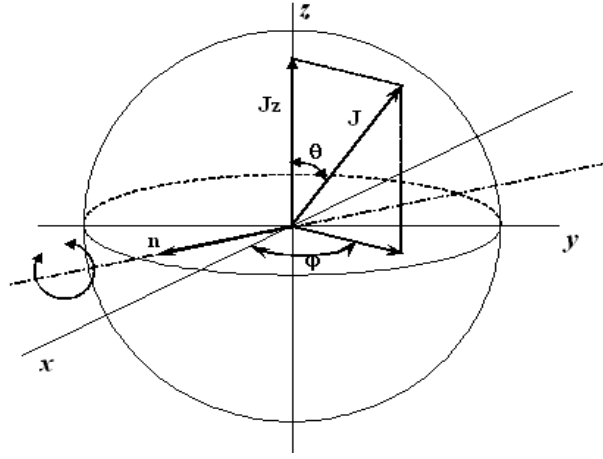


Fig. 4.1: Definição da rotação $R_{\theta, \varphi}$ no espaço do momento angular

sendo que

$$\xi = \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \quad (4.3)$$

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \quad (4.4)$$

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \quad (4.5)$$

O valor médio de qualquer operador pode ser obtido de

$$\langle \mu | \hat{A} | \mu \rangle = \langle 0 | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | 0 \rangle \quad (4.6)$$

$$= \langle 0 | e^{-(\xi \hat{J}_+ - \xi^* \hat{J}_-)} \hat{A} e^{(\xi \hat{J}_+ - \xi^* \hat{J}_-)} | 0 \rangle \quad (4.7)$$

Expandindo as exponenciais, podemos reescrever a equação 4.7 como:

$$\langle 0 | \hat{A} + [\hat{Y}, \hat{A}] + \frac{1}{2!} [\hat{Y}, [\hat{Y}, \hat{A}]] + \frac{1}{3!} [\hat{Y}, [\hat{Y}, [\hat{Y}, \hat{A}]]] + \frac{1}{4!} [\hat{Y}, [\hat{Y}, [\hat{Y}, [\hat{Y}, \hat{A}]]]] + \dots | 0 \rangle \quad (4.8)$$

. Onde $\hat{Y} \equiv (\xi \hat{J}_+ - \xi^* \hat{J}_-)$ e \hat{A} pode ser qualquer um dos operadores contidos na hamiltoniana.

Antes de procedermos a transformação vamos reescrever as hamiltonianas 3.11 e 3.16 da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{AT} &= [\varepsilon_+ - \frac{1}{2V} (\lambda_a + \lambda_b) + \frac{1}{2V} (\lambda_a + \lambda_b) \hat{j} + \frac{\lambda}{V} \hat{j}] \hat{j} \\ &+ [\varepsilon_- + \frac{1}{2V} (\lambda_a - \lambda_b) - \frac{1}{V} (\lambda_a + \lambda_b) \hat{j}] \hat{J}_z \\ &+ \frac{1}{2V} [\lambda_a - \lambda_b - 2\lambda] \hat{J}_z^2 + \alpha \hat{J}_x \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{FR} &= [\varepsilon_+ - \frac{1}{2V}(4\lambda_a + \lambda_b) + \frac{1}{2V}(4\lambda_a + \lambda_b) \hat{j} + \frac{\lambda}{V} \hat{j}] \hat{j} \\
&+ [\varepsilon_- + \frac{1}{2V}(4\lambda_a - \lambda_b) - 2(\lambda_a + \lambda_b) \hat{j}] \hat{J}_z \\
&+ \frac{1}{2V}[4\lambda_a + \lambda_b - 2\lambda] \hat{J}_z^2 \\
&+ \frac{\sqrt{2}\alpha}{V^{1/2}}(\hat{J}_- \sqrt{4(\hat{j} - \hat{J}_z) + 2} + \sqrt{4(\hat{j} - \hat{J}_z) + 2} \hat{J}_+)
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Aplicando a transformação de estados coerentes, temos que os operadores de quasi-spin geram os seguintes valores médios:

$$\begin{aligned}
\langle \mu | \hat{J}_z^2 | \mu \rangle &= j/2 + (1 - 1/2j)(j \cos \theta)^2 \\
\langle \mu | \hat{J}_z | \mu \rangle &= j \cos \theta \\
\langle \mu | \hat{J}_x | \mu \rangle &= j \sin \theta \cos \varphi \\
\langle \mu | \hat{J}_y | \mu \rangle &= j \sin \theta \sin \varphi
\end{aligned} \tag{4.11}$$

. Onde utilizamos as relações de comutação 3.2 e a relação 4.3. Então substituindo esses valores nas Hamiltonianas 4.9 e 4.10 e já ainda fazendo $j \cos \theta \equiv j_z$ obtemos

$$\begin{aligned}
\langle \mu | \hat{H} | \mu \rangle_A &= [\varepsilon_+ - \frac{1}{2V}(\lambda_a + \lambda_b) + \frac{1}{2V}(\lambda_a + \lambda_b) \hat{j} + \frac{\lambda}{V} j] j \\
&+ [\varepsilon_- + \frac{1}{2V}(\lambda_a - \lambda_b) - \frac{1}{V}(\lambda_a - \lambda_b) j] j_z \\
&+ \frac{1}{2V}[\lambda_a + \lambda_b - 2\lambda] [j/2 + (1 - 1/2j) j_z^2] + 2 \alpha j \sin \theta \cos \varphi
\end{aligned} \tag{4.12}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mu | \hat{H} | \mu \rangle_{FR} &= [\varepsilon_+ - \frac{1}{2V}(2\lambda_a + \lambda_b) + \frac{1}{2V}(4\lambda_a + \lambda_b + 4\lambda) j] j \\
&+ [\varepsilon_- - \frac{1}{V}(4\lambda_a - \lambda_b) + \frac{1}{2V}(2\lambda_a - \lambda_b) j] j_z \\
&+ \frac{1}{2V}[4\lambda_a + \lambda_b - 4\lambda] [j/2 + (1 - 1/2j) j_z^2] \\
&+ \frac{2\alpha}{(2V)^{1/2}}(\sqrt{4(j - j_z) + 2} + \sqrt{4(j - j_z) + 2}) j \sin \theta \cos \varphi
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Vemos aqui que existe um forte apelo geométrico quando tomamos o valor esperado dos operadores de momento angular na base de estados coerentes, onde este se comporta como um vetor clássico de tamanho j . Da relação trigonométrica do momento angular clássico vista na figura abaixo tiramos as seguintes relações

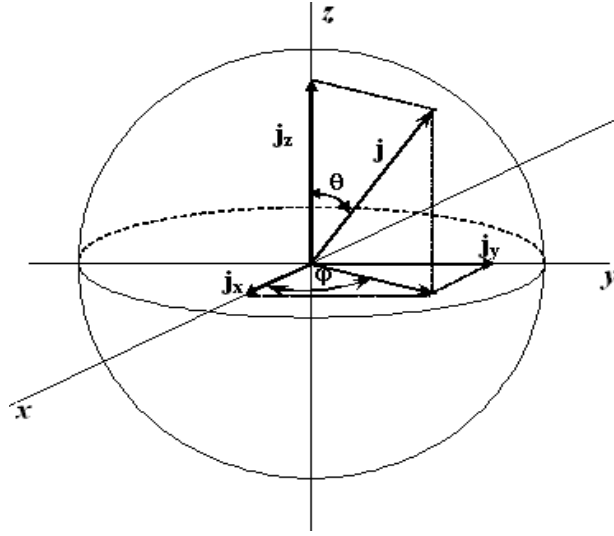


Fig. 4.2: Esfera clássica

$$j \sin \theta = \sqrt{j^2 - j_z^2} \quad (4.14)$$

a qual fazemos uso juntamente com

$$E_A \equiv \frac{1}{j} \langle \mu | \hat{H} | \mu \rangle_A \quad (4.15)$$

$$E_{FR} \equiv \frac{1}{j} \langle \mu | \hat{H} | \mu \rangle_{FR} \quad (4.16)$$

e assim, reduzir as hamiltonianas 4.12 e 4.12 acima, a um polinômio, onde fizemos $j_z/j \equiv z$ e obtemos

$$E_A = \Delta E_+ + \Delta E_- z + \frac{\Lambda}{2} z^2 + 2\alpha \sqrt{1 - z^2} \cos \varphi \quad (4.17)$$

$$E_{FR} = \Delta E_+ + \Delta E_- z + \frac{\Lambda}{2} z^2 + 2\alpha \sqrt{\rho} \sqrt{2(1 - z) + 1/j} \sqrt{1 - z^2} \cos \varphi. \quad (4.18)$$

Onde temos para E_A

$$\Delta E_+ = \varepsilon_+ + \frac{\rho}{4} (\lambda_a + \lambda_b + 2\lambda) (1 - 1/2j) \quad (4.19)$$

$$\Delta E_- = \varepsilon_- - \frac{\rho}{2} (\lambda_a - \lambda_b) (1 - 1/2j) \quad (4.20)$$

$$\Lambda = \frac{\rho}{4} (\lambda_a + \lambda_b - 2\lambda) (1 - 1/2j) \quad (4.21)$$

e para E_{FR}

$$\Delta E_+ = \varepsilon_+ + \frac{\rho}{8}[4\lambda_a + (\lambda_b + 4\lambda)(1 - 1/2j)] \quad (4.22)$$

$$\Delta E_- = \varepsilon_- - \frac{\rho}{4}[4\lambda_a(1 - 1/4j) - \lambda_b(1 - 1/2j)] \quad (4.23)$$

$$\Lambda = \frac{\rho}{8}[4\lambda_a + \lambda_b - 4\lambda](1 - 1/2j) \quad (4.24)$$

4.2 Equações Canônicas de Movimento

A transformação de estados coerentes leva a hamiltoniana a uma descrição semi-clássica, sendo que as variáveis z e φ nesta representação formam um par canonicamente conjugado. Sendo assim, podemos obter as equações de movimento utilizando as equações de Hamilton (mais detalhes ver em [29] capítulo 4).

$$\dot{z} = -\frac{\partial E_a}{\partial \varphi} \quad (4.25)$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial E_a}{\partial z} \quad (4.26)$$

z e φ estão ligadas respectivamente a diferença de população e de fase entre os condensados [4]-[3].

As trajetórias no espaço de fase são geradas pela solução das seguintes equações

Atômico

$$\dot{z} = 2\alpha \sqrt{1 - z^2} \sin \varphi \quad (4.27)$$

$$\dot{\varphi} = \Delta E_- + \Lambda z - \frac{2\alpha z}{\sqrt{1 - z^2}} \cos \varphi \quad (4.28)$$

Feshbach

$$\dot{z} = 2\alpha\sqrt{\rho}\sqrt{2(1+z)+1/j}\sqrt{1-z^2}\sin\varphi \quad (4.29)$$

$$\dot{\varphi} = \Delta E_- + \Lambda z + 2\alpha\sqrt{\rho}\left[2\frac{\sqrt{1-z^2}}{2\sqrt{2(1+z)+1/j}} - z\frac{\sqrt{2(1+z)+1/j}}{\sqrt{1-z^2}}\right]\cos\varphi \quad (4.30)$$

Utilizaremos métodos numéricos para obter as soluções das equações acima. As trajetórias poderão ser selecionadas a partir dos estados iniciais z_o, ϕ_o sendo a energia desta será fornecida por $E_o = E(z_o, \phi_o)$ que será sempre a mesma já que não temos nenhum tipo de

perda sendo considerada. Estas equações nos permitem interpretar o movimento como sendo análogo ao de um *pêndulo não rígido* [4, 5]. A não rigidez do pêndulo permite o surgimento de trajetórias que correspondem as de um pêndulo invertido (onde as oscilações são em torno de $\varphi = \pi$). Como a haste do pêndulo não é rígida, esta pode oscilar em torno de um valor médio de $z = 0$ ou $z \neq 0$. Quando $z \neq 0$ temos uma população média fixa em um dos condensados, isso caracterizará o auto-armadilhamento.

4.3 Superfície de energia

Agora temos uma dinâmica do tipo clássica onde z e φ formam um par canônico e as hamiltonianas a serem estudadas são: 4.17 e 4.18. Com estas podemos obter respectivamente as superfícies de energias 4.3c (atômica) e 4.4c (Molecular), cuja forma depende de $\lambda_a, \lambda_b, \lambda$ e α . As dimensões dessa superfície são Energia (E), diferença de população relativa (z) e diferença de fase (φ). As projeções ortogonais das superfícies nos planos: $z \times \varphi$, $E \times z$ são suficientes para a nossa análise. A superfície de energia sempre terá uma assimetria natural em relação ao eixo z , devido ao termo de acoplamento molecular.

Vemos que nas figuras 4.3a e 4.4a temos gráficos de linhas de contornos $z \times \varphi$ (curvas de níveis). Estas linhas correspondem a soluções das equações de movimento atômica ?? e molecular 4.30 ou seja linhas de equienergia. As figuras que acabamos de descrever são respectivamente o **espaço de fase** atômico (4.3) e molecular (fig. 4.4).

Olhando para o gráfico 4.5 as soluções das equações de movimento formam trajetórias fechadas e trajetórias abertas. As trajetórias abertas apresentam-se na forma de uma função periódica contínua, em φ que vai de $-\infty$ a ∞ e são conhecidas também como *running phase*. As trajetórias que apresentam diferença de população média \bar{z} diferente de zero, estão associadas ao auto armadilhamento, ou seja em média uma componente tem mais bósons que a outra.

Das trajetórias fechadas (figura 4.5) podemos distinguir dois tipos; as com diferença de população média \bar{z} diferente de zero e as com valor médio zero. Estas trajetórias podem se apresentar em uma fase média $\bar{\varphi}$ igual a π ou zero conforme o sinal de α . As com $\bar{z} \neq 0$ estarão localizadas na mesma fase do ponto de sela. Estas trajetórias são soluções correspondentes a oscilações do número de bósons de um condensado e outro. Na analogia com o pêndulo de inércia variável teríamos oscilações em torno de $\bar{\varphi} = 0$ ou $\bar{\varphi} = \pi$. Este último corresponderia ao pêndulo invertido oscilando em torno de um ponto meta-estável [4, 3],[5]-[7].

Já as trajetórias abertas sempre estarão relacionadas ao auto-armadilhamento ($\bar{z} \neq 0$),

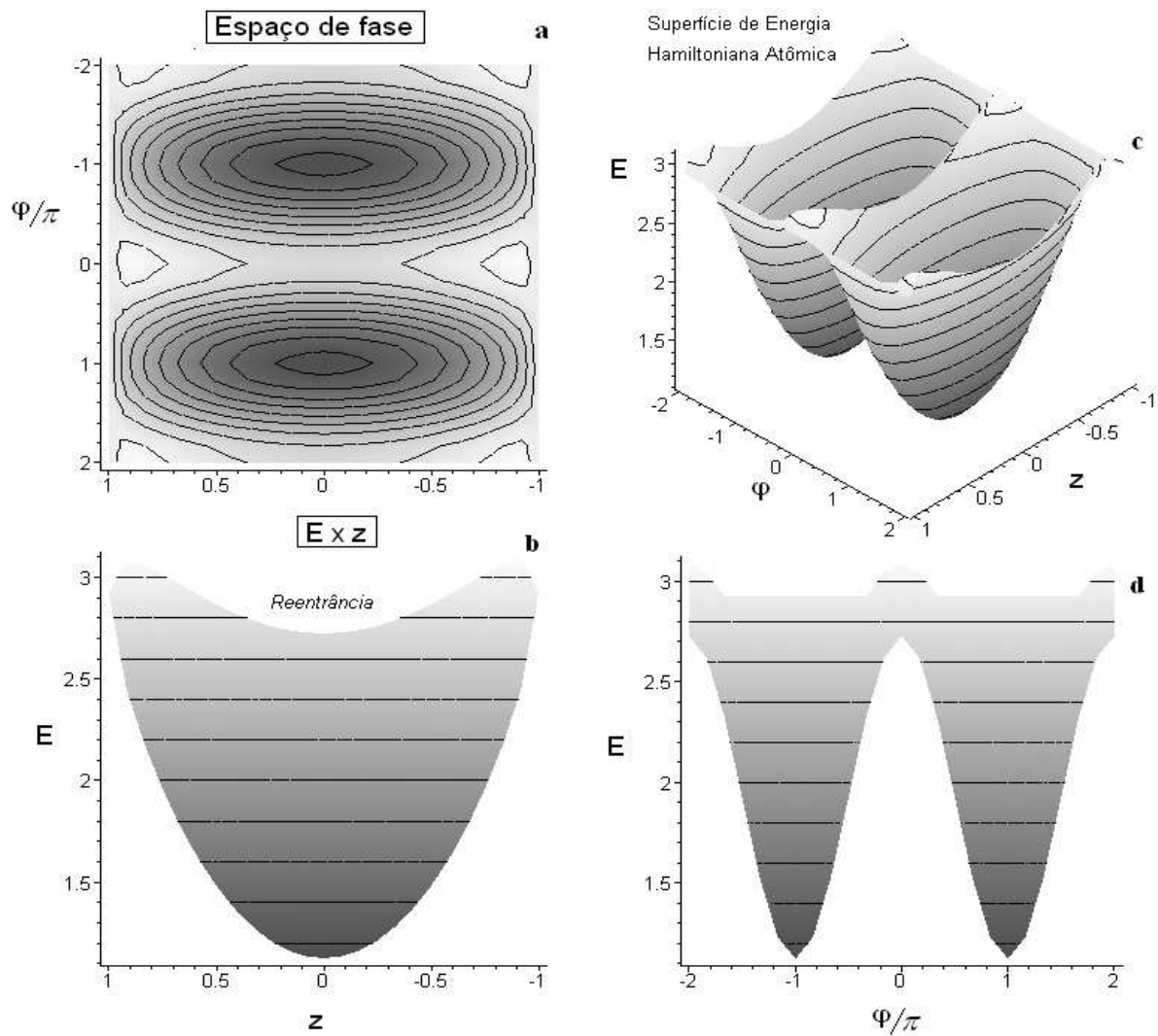


Fig. 4.3: Superfície de energia atômica (fig. c) com $\lambda_a = \lambda_b = 3$ (caso simétrico $\Delta E_- = 0$), $\lambda = 1$ e $\alpha = 0.4$. As linhas paralelas no plano $E \times z$ (fig. b) e $E \times \varphi$ (fig. d) representam as trajetórias (curvas de níveis) do espaço de fase (fig. a) com mesma energia. Estas trajetórias são soluções das equações de movimento 4.27.

em seu análogo mecânico [4, 3],[5]-[7] que corresponde a rotação contínua do mesmo.

Resumidamente, no gráfico de fase as trajetórias se agrupam em três classes como apresentadas na figura 4.5

- Trajetórias abertas sempre diretamente ligadas com o MQST ($\bar{z} \neq 0$)
- Trajetórias fechadas **com** auto-armadilhamento ($\bar{z} \neq 0$)
- Trajetórias fechadas **sem** auto-armadilhamento ($\bar{z} = 0$)

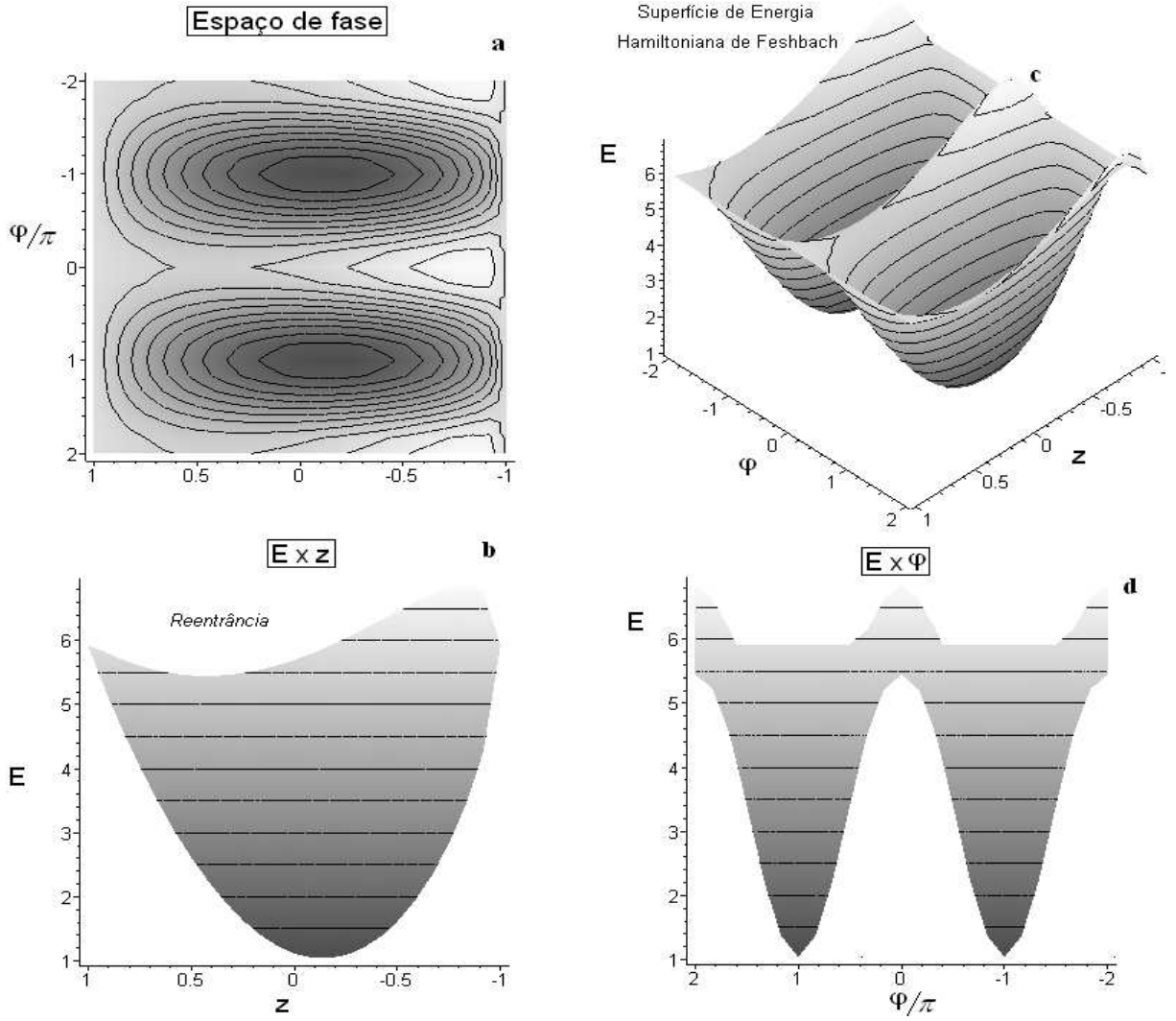


Fig. 4.4: Superfície de energia molecular (fig. c) com $\lambda_a = 2, \lambda_b = 4\lambda_a$ (Apesar de considerar $\Delta E_- = 0$ esta estrutura possui uma assimetria natural), $\lambda = 1$ e $\alpha = 0.4$. As linhas paralelas no plano $E \times z$ (fig. b) e $E \times \varphi$ (fig. d) representam as trajetórias (curvas de níveis) do espaço de fase (fig. a) com mesma energia. Estas trajetórias são soluções das equações de movimento 4.30.

4.3.1 Simetria da superfície de energia

Vemos nas figuras 4.3 e 4.4 que a superfície pode apresentar sela conforme os valores das interações e acoplamento. A ocorrência da sela será de vital importância para estudar os fenômenos que nos interessam.

A análise da estrutura se fixará mais em $\Delta E_- = 0$, ou seja, quando $\lambda_a = \lambda_b$ no caso atômico, e $\lambda_b = 2\lambda_a \frac{4j-1}{2j-1}$ no caso molecular, considerando também $\varepsilon_+ = \varepsilon_- = 0$. Isso quer dizer que para $|z| = 1$ temos o mesmo valor de energia sendo que para ambas

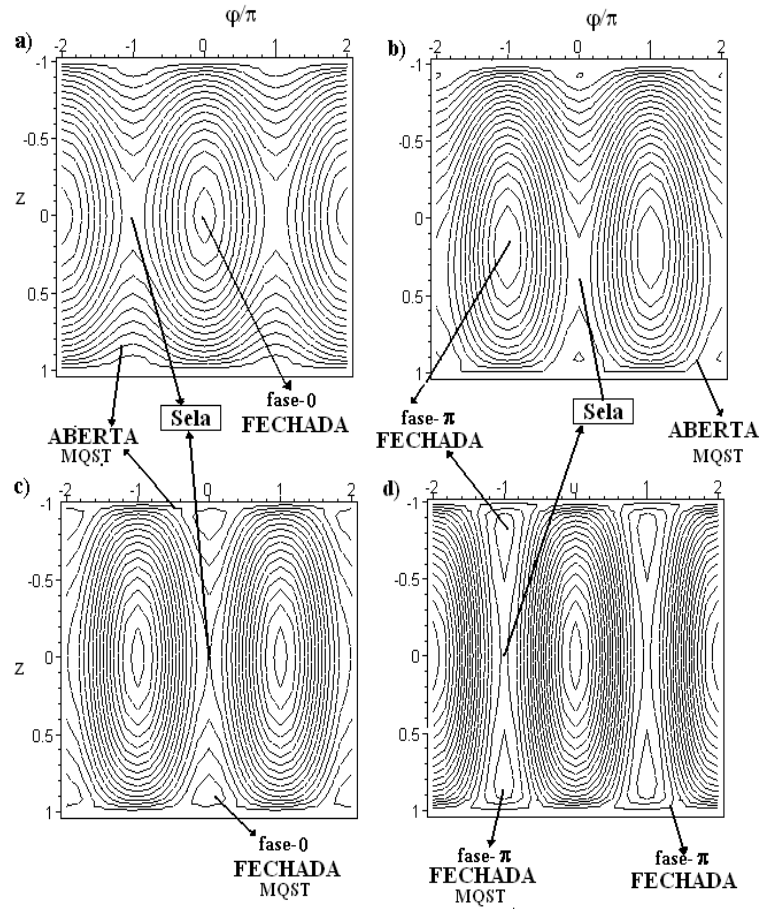


Fig. 4.5: Gráfico de fase do acoplamento átomo-átomo mostrando os tipos de trajetórias, modos e fases π e 0. Em **a**: $\lambda_a = \lambda_b = 1.0, \lambda = -0.2, \alpha = -0.1$; **b**: $\lambda_a = 1.0, \lambda_b = -1.0, \lambda = 4.0, \alpha = 0.55$; **c**: $\lambda_a = \lambda_b = 1.0, \lambda = -0.08, \alpha = -0.17$; **d**: $\lambda_a = \lambda_b = 1.0, \lambda = -2.0, \alpha = 0.9$

Hamiltonianas $E(z = 1) = E(z = -1)$. Sob esta condição, a superfície de energia para o caso atômico é simétrica, ou seja, no espaço de fase $\varphi \times z$ é simétrica em relação ao eixo z (fig. 4.3b) no plano $E \times z$ em relação ao eixo E (fig. 4.3a). Já o caso molecular mesmo com $\Delta E_- = 0$ apresenta uma assimetria natural 4.4a e b.

Capítulo 5

Estudo do plano $E \times z$

Neste capítulo vamos analisar as diferentes trajetórias no espaço de fase, investigando a dependência delas com os parâmetros da interação e acoplamento. Para tanto vamos introduzir a projeção do espaço de fase no plano $E \times z$. Como veremos, esta projeção permite de forma sintética analisar o surgimento dos diferentes tipos de trajetória, dependendo da energia e dos valores dos parâmetros acima citados. O estudo do plano $E \times z$ também permitirá fazer uma ligação direta do espectro de energia e dos valores de $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ com as propriedades do espaço de fase. Poderemos assim, comparar as análises semi-clássica e quântica investigando os fenômenos de tunelamento e auto-armadilhamento.

5.1 Pontos críticos

Os pontos críticos da superfície de energia, espaço de fase, estão onde as derivadas da energia $E(z, \varphi)$ em relação a suas variáveis são nulas. Através destas podemos calcular o máximo e o mínimo de energia e as populações nestas energias, além de outras relações importantes para o estudo do plano $E \times z$. Estes pontos são soluções estacionárias das equações de movimento (eq. 4.25 página 39) $\dot{z} = 0$ e $\dot{\varphi} = 0$. Assim, poderemos classificar em qual faixa de energia os tipos de trajetórias ocorrem conforme se altera o acoplamento α .

Para exemplificar a nossa análise vamos tratar o caso simétrico, ($\Delta E_- = 0$) no caso do acoplamento átomo-átomo, visto que este permite um tratamento analítico. No caso assimétrico ($\Delta E_- \neq 0$) o comportamento do sistema é o mesmo, só que os pontos críticos não podem ser obtidos analiticamente, pois a resolução do sistema gerado por $\dot{z} = 0$ e $\dot{\varphi} = 0$ nos fornece um polinômio de ordem 4 (com todos os termos), dificultando assim, a análise do sistema. Já para o acoplamento átomo-molécula a solução nos dá um polinômio

de ordem 5 o que nos obriga a fazer uma análise numérica. Mas, mesmo assim, o comportamento destes dois sistemas seguirá os moldes da análise feita com o caso átomo-átomo simétrico. A natureza dos pontos críticos será obtida através do estudo do *Hessiano*, que tem a seguinte forma

$$\text{Hessiano}(z_{crit}, \varphi_{crit}) = \left[\begin{array}{cc} \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial z \partial \varphi} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial z \partial \varphi} & \frac{\partial^2 E}{\partial \varphi^2} \end{array} \right] \Bigg|_{z_{crit}, \varphi_{crit}} \quad (5.1)$$

O determinante do Hessiano determina se os pontos críticos são ponto de sela ou de máximo ou mínimo. As condições são:

$$\text{Hess}(z_{crit}, \varphi_{crit}) = \det(\text{Hessiano}) > 0, \quad \text{máx. ou min.} \quad (5.2)$$

$$\text{Hess}(z_{crit}, \varphi_{crit}) = \det(\text{Hessiano}) < 0, \quad \text{sela} \quad (5.3)$$

$$(5.4)$$

5.2 Acoplamento Átomo-Átomo

5.2.1 Caso Simétrico ($\Delta E_- = 0$)

A partir de $\dot{\varphi} = 0$ e $\dot{z} = 0$?? e 4.30 com $\varepsilon_+ = \varepsilon_- = 0$, obtemos os seguintes pontos críticos

$$\varphi_{crit} \equiv \varphi_0 = 0$$

$$\varphi_{crit} \equiv \varphi_\pi = \pi$$

$$z_{crit} \equiv z_M^\pm = \pm \sqrt{1 - \left(\frac{2\alpha}{\Lambda}\right)^2} \quad (5.5)$$

$$z_{crit} \equiv z_{sel} = 0 \quad (5.6)$$

A natureza dos pontos críticos pode ser obtida pela análise do determinante do Hessiano,

$$\text{Hess}(0, 0) = -\Lambda^2 \left(\frac{2\alpha}{\Lambda}\right) \left(1 - \frac{2\alpha}{\Lambda}\right) \quad (5.7)$$

$$\text{Hess}(0, \pi) = \Lambda^2 \left(\frac{2\alpha}{\Lambda}\right) \left(1 + \frac{2\alpha}{\Lambda}\right) \quad (5.8)$$

$$Hess(z_M, 0) = \Lambda^2 \left(1 - \left(\frac{2\alpha}{\Lambda} \right)^2 \right) \quad (5.9)$$

$$Hess(z_M, \pi) = \Lambda^2 \left(1 + \left(\frac{2\alpha}{\Lambda} \right)^2 \right) \quad (5.10)$$

Da equação 5.5 obtemos a condição de formação de sela na superfície de energia, a qual é dada por:

$$|2\alpha/\Lambda| \leq 1$$

Isto pode ser visualizado no plano $E \times z$ pois quando esta condição é satisfeita a curva limite superior, $E(z, \pi)$ (vide curva superior na figura 5.1) apresenta uma reentrância, com um mínimo no ponto de sela $\{z = 0, \varphi = \pi\}$ e máximos nos pontos de máximo $\{z = \pm\sqrt{1 - (2\alpha/\Lambda)^2}, \varphi = \pi\}$.

- Para $-\Lambda/2 < \alpha < 0$ – temos o ponto de sela $\{z = 0, \varphi = \pi\}$; o máximo absoluto em $\{z = \pm\sqrt{1 - (2\alpha/\Lambda)^2}, \varphi = \pi\}$; e o mínimo em $\{z = 0, \varphi = 0\}$.
- Para $0 < \alpha < \Lambda/2$ – temos o ponto de sela $\{z = 0, \varphi = 0\}$; o máximo absoluto em $\{z = \pm\sqrt{1 - (2\alpha/\Lambda)^2}, \varphi = 0\}$; e o mínimo em $\{z = 0, \varphi = \pi\}$.

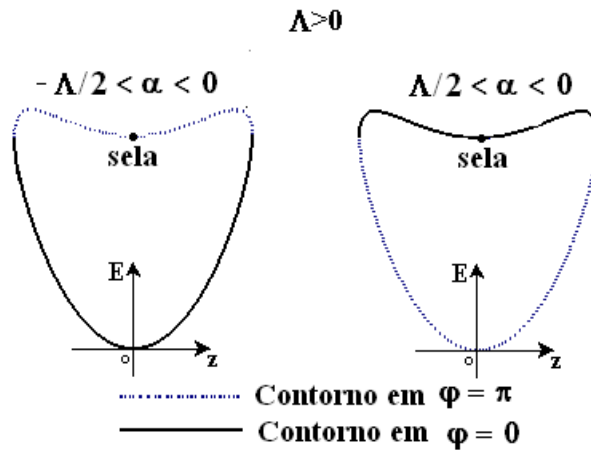


Fig. 5.1: Contorno do plano $E \times z$. Curvas superior e inferior em fases diferentes conforme sinal de α

Usando a condição de ponto crítico do Hessiano 5.3 e 5.2 temos sempre quatro pontos críticos quando $|2\alpha/\Lambda| \leq 1$. Nesta configuração dos pontos críticos permite analisar o sistema através da projeção do espaço de fase no plano $E \times z$. Este plano visualizado

abaixo (fig. 5.1) para $\Lambda > 0$ e $\alpha < 0$, é limitado na parte superior por uma curva tal que $\varphi = \pi$ contendo o ponto máximo e na parte inferior a curva com $\varphi = 0$ contendo o ponto de mínimo.

O posicionamento das energia de máximo, mínimo e de sela na superfície dependerá dos sinais relativos entre α e Λ . Vamos nos fixar em valores positivos de Λ e averiguar os pontos críticos para α com valores positivos e negativos.

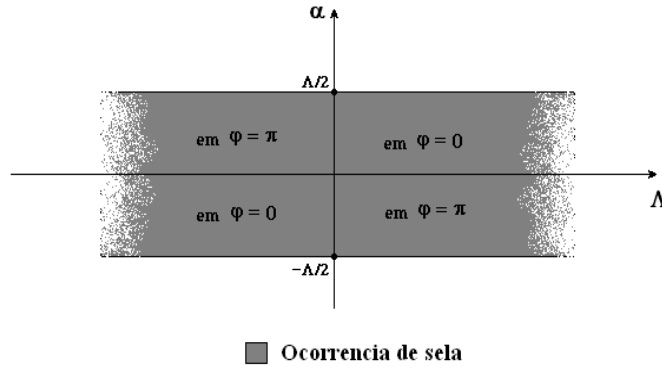


Fig. 5.2: Na região escura temos ocorrência de sela. Nos quadrantes $(+, +)$ e $(-, -)$, onde o sinal relativo entre α e λ é positivo, a sela sempre se localizará em $\varphi = 0$ e nos quadrantes $(+, -)$ e $(-, +)$ sempre estará em $\varphi = \pi$

Ao se mudar o sinal de Λ há uma inversão global da superfície, onde o máximo torna-se mínimo e o mínimo torna-se máximo. Como a posição da sela se modifica também com a mudança de sinal de Λ , para um melhor entendimento temos o diagrama 5.2 que nos indica a variação da posição da sela conforme os sinais dos parâmetros.

Reforçamos que a mudança do sinal de α apenas translada a sela e o mínimo de 0 para π . Isto é quando mudamos $\alpha < 0$ para $\alpha > 0$ a curva superior se encontra em $\varphi = 0$ e a inferior em π .

Continuando o estudo para $\Lambda > 0$, vamos analisar as energias nos pontos críticos. Em $z = 0$ temos duas possibilidades de energia,

$$E^+ = \Delta E_+ + 2\alpha \text{ energia do ponto de sela} \quad (5.11)$$

$$E^- = \Delta E_+ - 2\alpha \text{ energia do ponto de mínimo} \quad (5.12)$$

	$\Lambda > 0$	
$\alpha > 0$	$E_+ = E(0, 0)$	$E_- = E(0, \pi)$
$\alpha < 0$	$E_+ = E(0, \pi)$	$E_- = E(0, 0)$

Energia de ponto de sela e de mínimo, conforme sinal de α para $\Lambda > 0$

sendo que uma corresponde a energia no ponto de sela e a outra a energia mínima dependendo do sinal do parâmetro α .

A energia máxima será

$$E_M = E(z = z_M) = \Delta E_+ + \frac{\Lambda}{2} \left[1 - \left(\frac{2\alpha}{\Lambda} \right)^2 \right] \quad (5.13)$$

Uma outra energia interessante para a nossa análise é a energia correspondente a diferença máxima de população entre os condensados. Esta energia é tal que $z = \pm 1$ e independe de φ .

$$E_E = E(z = \pm 1) = \Delta E_+ + \frac{\Lambda}{2}$$

As trajetórias com energia superior a E^+ e inferiores a E_M são tais que a média da população é diferente de zero, caracterizando auto-armadilhamento (MQST). Estas trajetórias podem ser trajetórias abertas, (running phase), ou trajetórias fechadas. No caso de $\alpha < 0$ estas últimas são trajetórias em torno de $\varphi = \pi$ e correspondem a um pêndulo invertido. Dentro desta analogia, $\alpha > 0$, corresponderia a inverter a gravidade. pois o pêndulo se movimentaria no entorno de $\varphi = 0$ onde é um máximo de energia

A linha reta horizontal (fig. 5.3) correspondente a energia de máxima população, E_E , intersecciona as curvas limites do espaço de fase nos pontos extremos de valor de z . Esta energia servirá como referência para o estudo do comportamento do plano $E \times z$. Pois a partir de um certo valor do acoplamento, entre a energia do ponto de sela e a energia máxima, o espaço de fase apresentará trajetórias fechadas com auto-armadilhamento.

Extremos para $\left \frac{2\alpha}{\Lambda} \right \leq 1$	$\Lambda > 0$ e $\alpha < 0$
Ponto de máximo	$E_{max} = E_M$ enquanto $ \Lambda/16 < \alpha < 1 $ e se não, então $E_{max} = E_E$
Ponto de sela	$E_{sel} = E^+ = E(0, 0)$
Ponto de mínimo	$E_{min} = E^- = E(0, \pi)$

Lembrando que E_M e E_{sel} possuem sempre a mesma fase, e também que o sinal e a intensidade de Λ , ΔE_+ são dados por λ_a , λ_b e λ . Quando temos $\left| \frac{2\alpha}{\Lambda} \right| \geq 1$ não existe **MQST** e a superfície um máximo e um mínimo energia destes será dada respectivamente por E^+ e E^- .

5.2.2 Comportamento do plano $E \times z$

A análise que se seguirá abaixo, considera o caso quando a $\Lambda > 0$ (fig. 5.3 página 52). Aqui nós fixamos os parâmetros de auto-interação (λ_a, λ_b) e interação (λ) e variamos o parâmetro de acoplamento (α) de um valor negativo a um valor positivo, respeitando a condição $\left| \frac{2\alpha}{\Lambda} \right| \leq 1$ e com isso enquanto $\alpha \neq 0$ teremos um ponto de sela. Com isso poderemos delimitar os tipos de trajetórias utilizando quatro patamares de energia: E_M, E_E, E_+ e E_- . Foi feito um esquema ilustrativo (fig.5.3 página 52) do comportamento do plano $E \times z$ e assim auxiliar a compreensão. Este desenho ilustra o gráfico de $E(z, \varphi)$ visto da dimensão $\mathbf{E} \times \mathbf{z}$.

A linha reta horizontal (contínua) que se encontra no interior dos contornos que constituem o esquema da figura 5.3, correspondente a energia de máxima população, E_E . Esta sempre delimitará as curvas superiores e inferiores que estão em fases opostas. Estas curvas estarão em $\varphi = 0 \Rightarrow$ (linha contínua) e em $\varphi = \pi \Rightarrow$ (linha pontilhada). Uma outra linha reta horizontal (tracejado) que aparece é referente a energia de ponto de sela. Esta bisecciona o plano em trajetórias com auto-armadilhamento (acima – *cinza claro e escuro*) e sem (abaixo – *sem cor*)

Com $\Lambda > 0$, figura 5.3, e partindo de $\left| \frac{2\alpha}{\Lambda} \right| = 1$ com $\alpha < 0$, fig. 5.3**a** temos E_- como mínimo em $\varphi_{crit} = 0$ e $E_{M\acute{a}x} = E_+$ como máximo em $\varphi_{crit} = \pi$. Nesta situação a superfície somente apresenta trajetórias fechadas com $\bar{z} = 0$.

Enquanto $-\Lambda/2 \leq \alpha < -\Lambda/4$ temos que em $E_+ < E \leq E_{M\acute{a}x}$, fig. 5.3**b,c** ocorrem somente trajetórias fechadas com auto-armadilhamento (*cinza escuro*). Quando $\alpha = -\Lambda/4$ temos $E_E = E_+$ 5.3 fig. **c**. E em $E_- < E < E_+$ temos trajetórias fechadas com $\bar{z} = 0$ em $\bar{\varphi} = 0$ (*sem cor*).

Continuando, se temos $-\Lambda/4 < \alpha < -\Lambda/16$ temos a presença de trajetórias fechadas com auto-armadilhamento em $E_E < E < E_{M\acute{a}x}$, fig. 5.3**d** em $\bar{\varphi} = \pi$ (*cinza escuro*), trajetórias abertas (running phase) em $E_+ < E \leq E_E$ (*cinza claro*) e trajetórias fechadas com $\bar{z} = 0$ e $\bar{\varphi} = 0$ em $E_- < E < E_+$ *sem cor*. Em $|16\alpha/\Lambda| = 1$ podemos desconsiderar as trajetórias fechadas. Neste ponto $E_E \approx E_M$

Finalmente quando $\Lambda/16 \leq \alpha \leq 0$ temos em $E_+ \leq E \leq E_E$ 5.3**e,f** somente trajetórias abertas (*cinza claro*). E em $E_- \leq E \leq E_+$ apresenta trajetórias fechadas com $\bar{z} = 0$ e $\bar{\varphi} = 0$ em *sem cor*. Note que nesta faixa de valores de α , $E_{M\acute{a}x}$ não é mais um máximo.

Quando $\alpha = 0$, $E_- = E_+$ com isso a superfície $E \times z$ apresenta forma parabólica, e o sistema está desacoplado, isto é, não há interconversão. Continuando a aumentar α , para

valores positivos até que $\left| \frac{2\alpha}{\Lambda} \right| = 1$ novamente tudo se repetirá so que E_+ estará localizado em $\bar{\varphi} = \pi$ e E_- e E_M estarão localizado em $\bar{\varphi} = 0$ fig. 5.3g-k.

Note que ao se mudar o sinal de α de menos para mais, teremos o mínimo sendo transladado de $\varphi = 0$ para $\varphi = \pi$. Isto equivale ao pêndulo invertido, onde o sinal de α equivaleria ao sentido cuja *gravidade* aponta, neste caso para cima. O mínimo e a sela sempre estarão deslocados entre sí, de π .

5.2.3 Caso Assimétrico ($\Delta E_- \neq 0$)

Para o caso assimétrico temos que o comportamento se assemelha com o que foi descrito acima, só que não podemos obter os extremos analiticamente, e com isso também a possibilidade de conseguir uma relação analítica entre os parâmetros. Além disso, devido a $\lambda_a \neq \lambda_b$, temos patamares de energia diferenciados, sendo para este caso a componente **A** terá a menor energia, ou seja escolhemos $\lambda_a > \lambda_b$. Cada lado obedecerá o que foi descrito para o caso simétrico.

O esquema ilustrativo na figura 5.4 descreve o comportamento do gráfico $\mathbf{E} \times \mathbf{z}$ de acordo com o aumento do valor de α . Os números sobre as linhas especificam a seqüencia nas quais elas ocorrem quando α vai de um certo valor negativo até o mesmo valor positivo.

5.2.4 Acoplamento Átomo-Molécula

Para este acoplamento a equação que gera os extremos é um polinômio de ordem 5, assim, os extremos somente poderão ser calculados numericamente. Neste tipo de condensados de duas componentes, sempre teremos uma quantidade mínima de moléculas enquanto $\alpha \neq 0$. E o comportamento da superfície de energia se parece com o molde do que foi descrito no caso assimétrico figura 5.5.

5.3 Quântico & Clássico

Nos gráficos 5.6 e 5.7 os níveis de energia foram traçados com seus respectivos valores esperados de $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ e superpostos ao plano $E \times z$. Observa-se que em alguns casos (fig. 5.6 b e c), valores esperados de \hat{J}_z na proximidade da sela estão fora da projeção do espaço de fase clássico. Isto é estes casos correspondem a trajetórias classicamente proibidas. Isto pode ser interpretado como efeito do tunelamento. Para regiões acima e mais distantes

do ponto de sela e os valores esperados de \hat{J}_z são simétricos e correspondem a trajetórias clássicas com auto armadilhamento, neste caso pode-se ver no gráfico a bifurcação dos valores esperados $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$.

Para se ver com mais clareza a presença de efeitos quânticos, na figura 5.8 tratamos os mesmos gráficos para diferentes de J , e pode-se ver claramente que no limite $J \rightarrow \infty$ os pontos da região classicamente proibida convergem para a região permitida.

5.4 Conclusão

Estes resultados nos indicam que os efeitos quânticos tendem suavizar à passagem de um regime onde há MQST e onde a simetria é respeitada, fazendo que a quebra seja suavizada e não abrupta como ocorre no clássico. Para investigar em mais detalhes vamos no próximo capítulo comparar a variação de \bar{z} e $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ com o tempo.

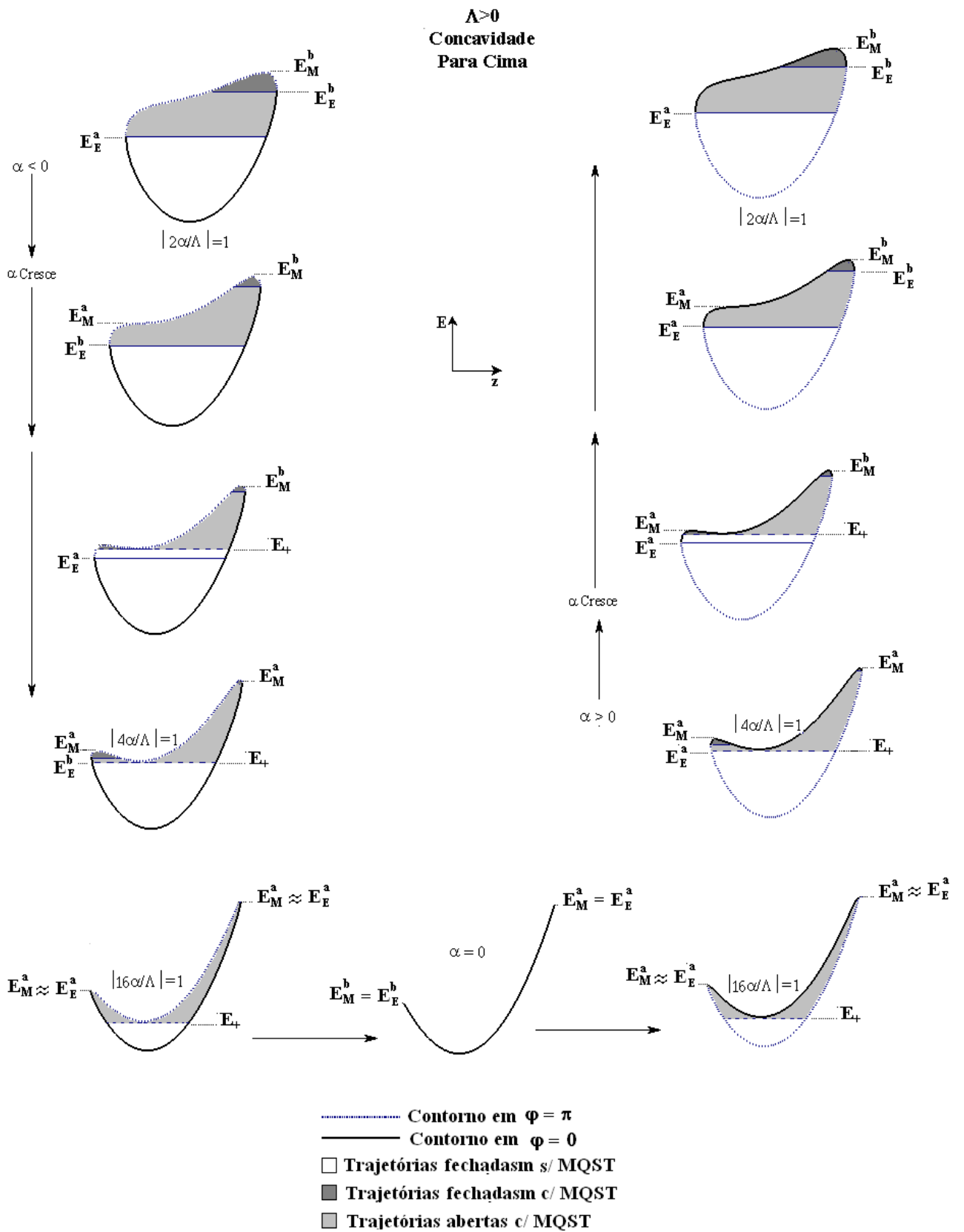


Fig. 5.4: Esquema representando o comportamento do gráfico $E \times z$ no caso assimétrico atômico.

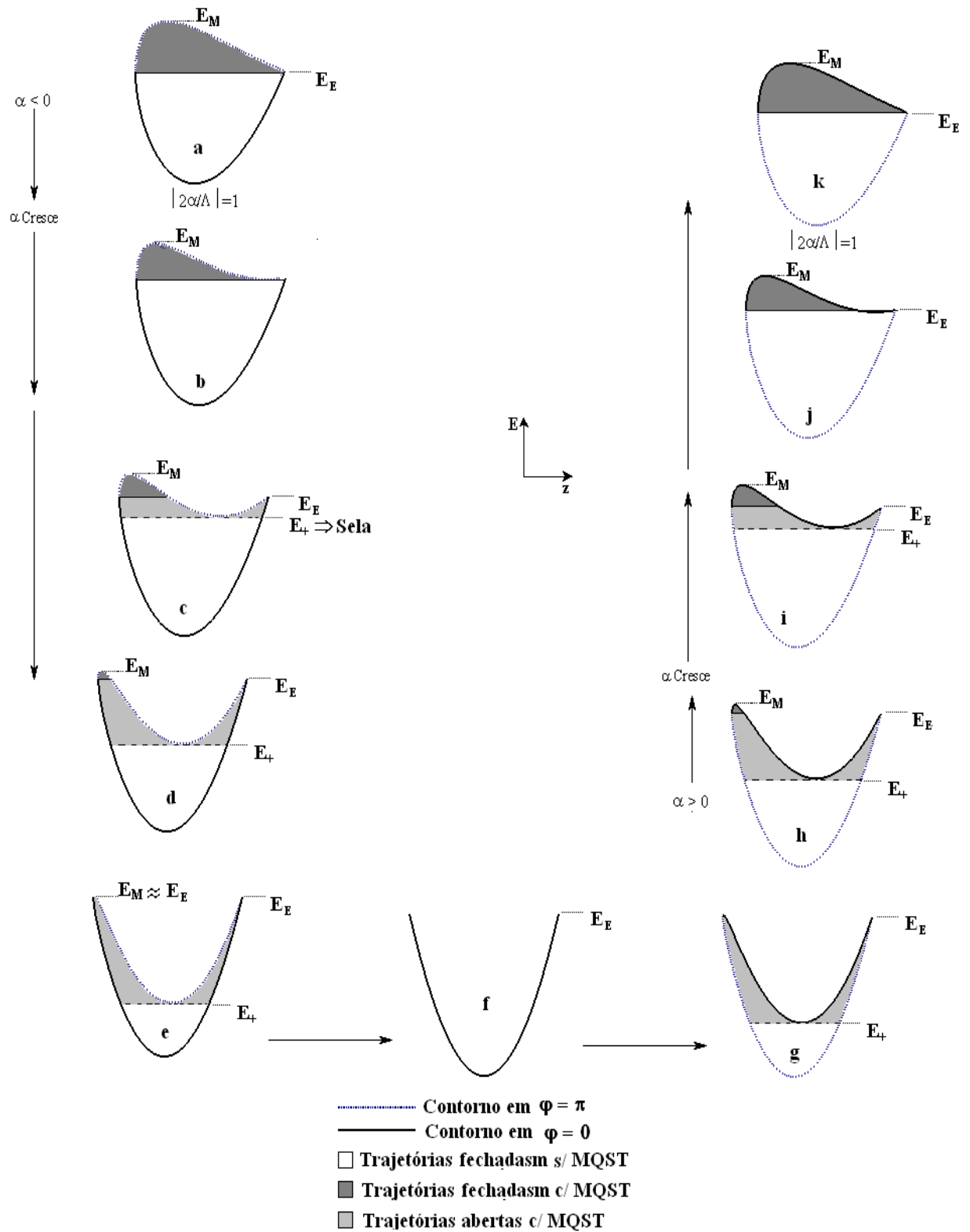


Fig. 5.5: Esquema para caso representando o comportamento do gráfico $E \times z$ no caso assimétrico molecular.

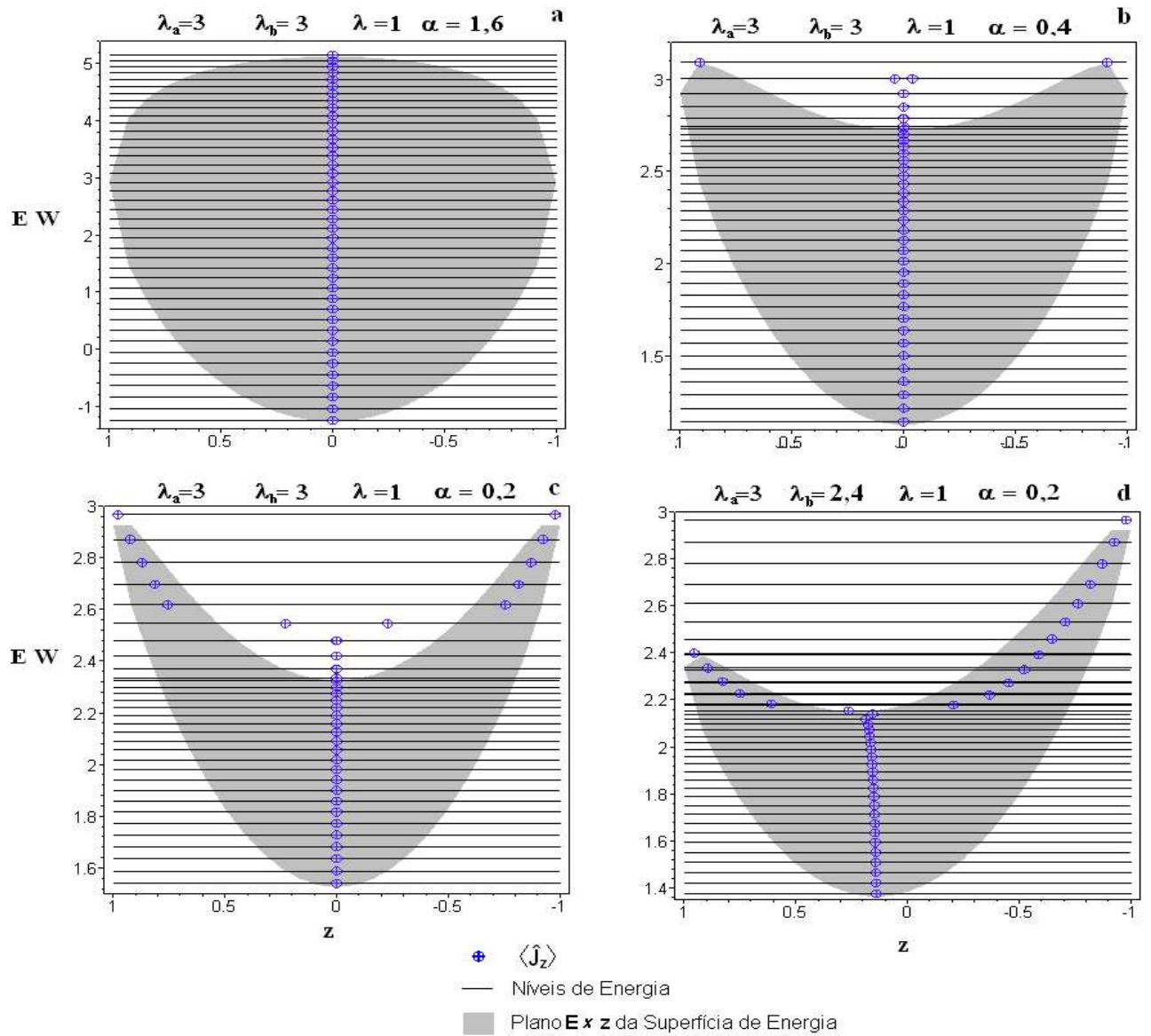


Fig. 5.6: Superposição entre gráficos do espectro E_ν , $E_\nu \times \langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ e plano $E \times z$ (silhueta) para o sistema átomo-átomo

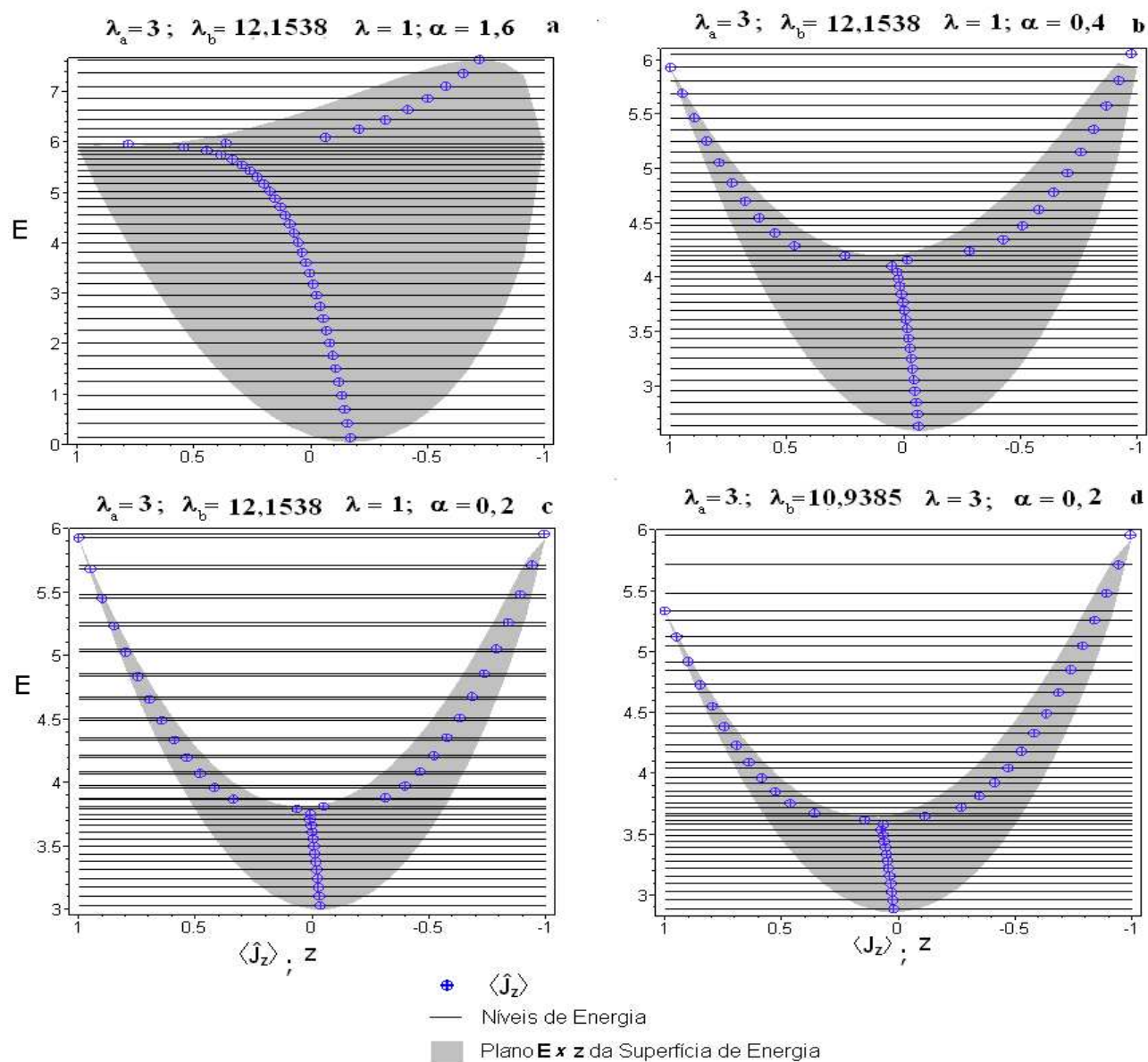


Fig. 5.7: Superposição entre gráficos do espectro E_ν , $E_\nu \times \langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ e plano $E \times z$ (silhueta) para o sistema átomo-molécula

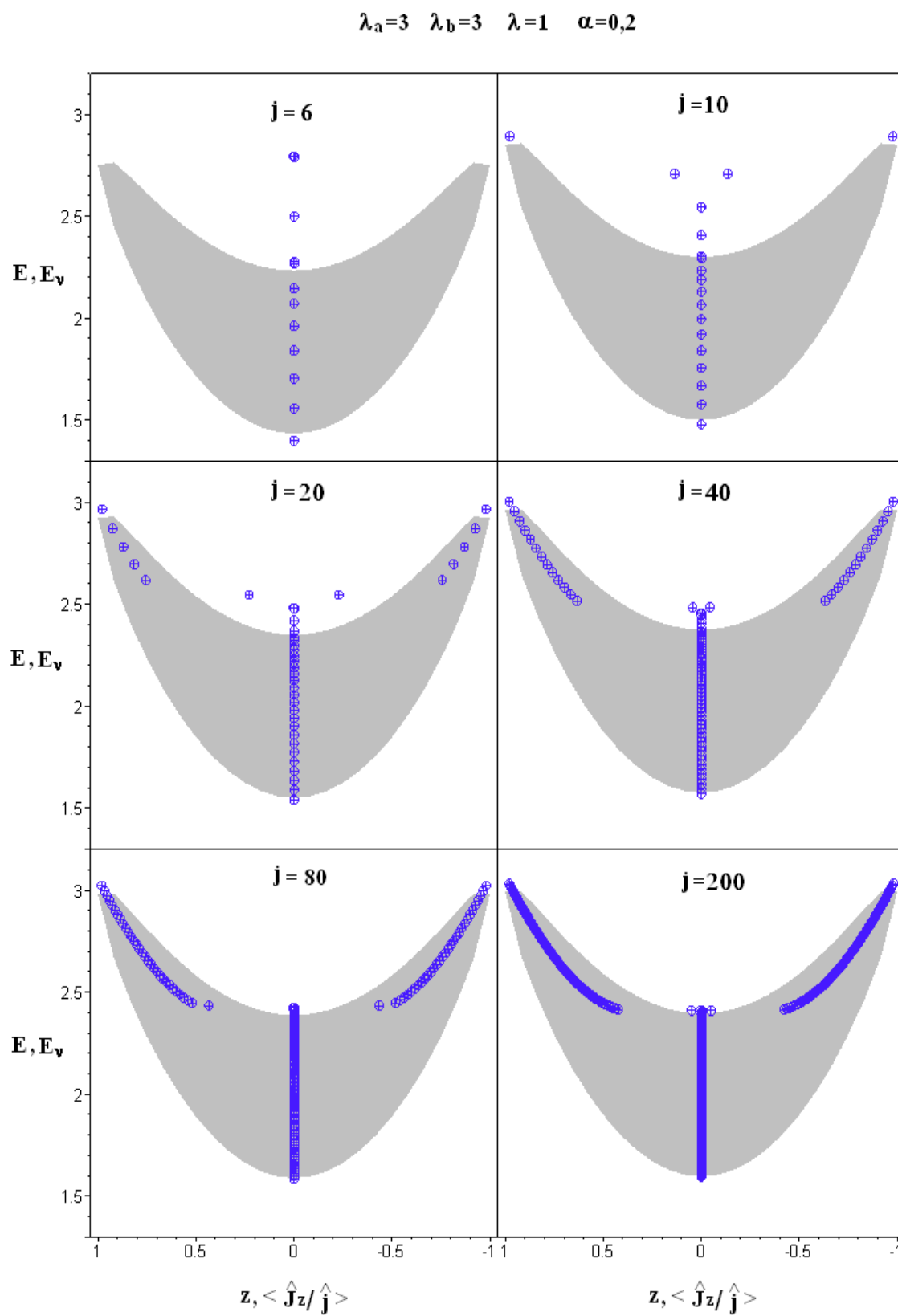


Fig. 5.8: Convergência da bifurcação para o ponto de sela e $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$ tende a um contínuo com $J \rightarrow \infty$

Capítulo 6

O Tunelamento e o Auto Armadilhamento

Neste capítulo, pretendemos investigar os efeitos do tunelamento sobre o auto armadilhamento. Para isso, teremos que comparar a evolução temporal clássica e quântica do operador \hat{J}_z na base de estados coerentes.

A motivação para este estudo, veio da análise dos resultados quânticos vide figuras 5.6 **a,b** e **c**. Nestes gráficos, observa-se que alguns auto estados com energia próxima ao ponto de sela tem valores esperados da diferença de população, $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu$, fora do contorno definido pelo espaço de fase clássico. Para estas energias os valores de z corresponderiam a trajetórias classicamente proibidas. Observa-se também que nestes caso, a existência de estados degenerados com valores de $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu \neq 0$ simétricos ou com $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu = 0$. Isto é um indicativo de que efeitos quânticos tendem a restaurar a simetria diminuindo a probabilidade de auto armadilhamento devido ao de tunelamento.

6.1 Equação de estado

No capítulo 3 obtivemos os auto-valores (E_ν) e auto-vetores (C_m^ν) associados às hamiltonianas do caso átomo-átomo e átomo-molécula numa base de estados de quasi-spin $|m\rangle \equiv |j, m\rangle$. A solução dependente do tempo é dada por

$$|\Psi_\nu(t)\rangle = e^{-i\hat{E}_\nu t} |\psi_\nu\rangle, \quad (6.1)$$

onde

$$|\psi_\nu\rangle = \sum_{\tilde{m}=-J}^J C_m^\nu |\tilde{m}\rangle \quad (6.2)$$

Para conseguirmos fazer a comparação com a evolução semi-clássica, vamos utilizar como condição inicial, os estados coerentes semi-clássicos $|\mu\rangle$, cuja evolução temporal é dada por

$$|\mu(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} |\mu\rangle$$

Na base $|m\rangle$ o estado coerente pode ser escrito como [31]

$$|\mu\rangle = \sum_{m=-J}^J a_m |m\rangle$$

onde

$$a_m = (1 + |\mu|^2)^{-J} \sum_{m=-J}^J \binom{2J}{J+m}^{1/2} \mu^{J+m} \quad (6.3)$$

e

$$\mu = e^{-i\varphi} t g \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (6.4)$$

sendo assim, obtemos

$$|\mu(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \sum_{m=-J}^J a_m |m\rangle \quad (6.5)$$

Então utilizando a relação de auto estados de $\hat{\mathcal{H}}$ (completeza)

$$\sum_{\nu=-J}^J |\psi_\nu\rangle \langle \psi_\nu| = \mathbb{1}$$

na equação 6.5, podemos escrever esta como:

$$|\mu(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \sum_{\nu} \sum_{m=-J}^J a_m C_m^\nu |\psi_\nu\rangle$$

já que $C_m^{\nu*} = \langle \psi_\nu | m \rangle$. Substituindo 6.2 em 6.5 obteremos a relação desejada, mas antes, atuamos com o operador evolução temporal sobre o estado. Com isso,

$$|\mu(t)\rangle = e^{-i\hat{E}_\nu t} \sum_{\tilde{m}, m, \nu} a_m C_m^{\nu*} C_m^\nu |\tilde{m}\rangle. \quad (6.6)$$

Podemos reescrever a equação 6.6 acima da seguinte forma

$$|\mu(t)\rangle = \sum_{\tilde{m}} D_{\tilde{m}}(\mu, t) |\tilde{m}\rangle, \quad (6.7)$$

onde

$$D_{\tilde{m}}(\mu, t) = \sum_{m,\nu} e^{-iE_{\nu}t} a_m(\mu) C_m^{\nu*} C_{\tilde{m}}^{\nu}. \quad (6.8)$$

6.2 Método para a análise

Para fazer esta análise, vamos nos restringir ao estudo da hamiltoniana simétrica ($\Delta E_- = 0$), visto que neste caso, a simetria com relação a diferença de população é claramente quebrada na análise clássica nos casos de auto-armadilhamento.

Para que os efeitos quânticos sejam relevantes, teremos que utilizar valores pequenos de população, sendo estes comparados com valores grandes. E para estes extremos de população, vamos também avaliar o efeito da força do acoplamento α sobre o auto armadilhamento.

Os estados iniciais, ou condições iniciais (z_o, φ_o) estarão associados a trajetórias no espaço de fase (superfície de energia), com energia $E(z_o, \varphi_o)$. Nos temos que para um certo conjunto de parâmetros das hamiltonianas, teremos uma certa estrutura do espaço de fase, na qual podemos escolher, dentre várias, as trajetórias que são de interesse fazendo uso das condições iniciais. Estes valores serão inseridos através da equação 6.3, onde temos a variável μ que liga os estados quânticos e semi-clássicos, através de θ e φ . Como na construção do estado coerente utilizamos o estado $|j, -j\rangle$, os estados iniciais são definidos da seguinte forma:

$$\theta = \arccos(-z_o) \quad (6.9)$$

$$\varphi = \varphi_o. \quad (6.10)$$

onde z_o e φ_o são os pontos iniciais de uma certa trajetória no do espaço de fase. Podemos a princípio escolher qualquer valor para φ_o , mas, no que segue, ficaremos restritos a valores 0 ou π , pois no entorno destes valores encontram-se as trajetórias mais significativas. As condições iniciais utilizadas, estão em seqüência decrescente de energia e vão se aproximando do ponto de sela, sendo que a ultima se encontra abaixo deste.

A grandeza relevante em nossa análise será a diferença de população entre os dois

condensados que é dada por

$$\langle \hat{J}_z \rangle_\mu(t) \equiv \langle \mu(t) | \hat{J}_z | \mu(t) \rangle = \sum_{\tilde{m}=J}^J D_{\tilde{m}}(\mu, t) | \tilde{m} \tilde{m} \rangle D_{\tilde{m}}(\mu, t) | \tilde{m} \rangle \quad (6.11)$$

no caso quântico e $z(t)$ que é a evolução temporal clássica, obtida pela resolução numérica das equações acopladas 4.27 e 4.28 na página 39.

6.3 Resultados

Notamos que, se a intensidade do acoplamento e a população são pequenas, a medida com que nos aproximamos do ponto de sela o tunelamento vai ganhando intensidade, (figuras 6.1 **a-d**) fazendo com que $\overline{z(t)}$ e $\overline{\langle \hat{J}_z \rangle(t)}$ vão se diferenciando. Este efeito é atenuado se aumentarmos a população (figuras 6.2 **a-d**).

Aumentando a intensidade do acoplamento mas mantendo a população ainda pequena, temos o efeito da restauração da simetria, ou seja, $\overline{z(t)} \neq 0$ enquanto $\overline{\langle \hat{J}_z \rangle(t)} = 0$. O efeito de tunelamento faz com que o sistema tente recuperar sua simetria, destruindo o auto armadilhamento (figuras 6.3 **a-d**). Mas este efeito também é atenuado pelo aumento da população (figuras 6.4 **a-d**).

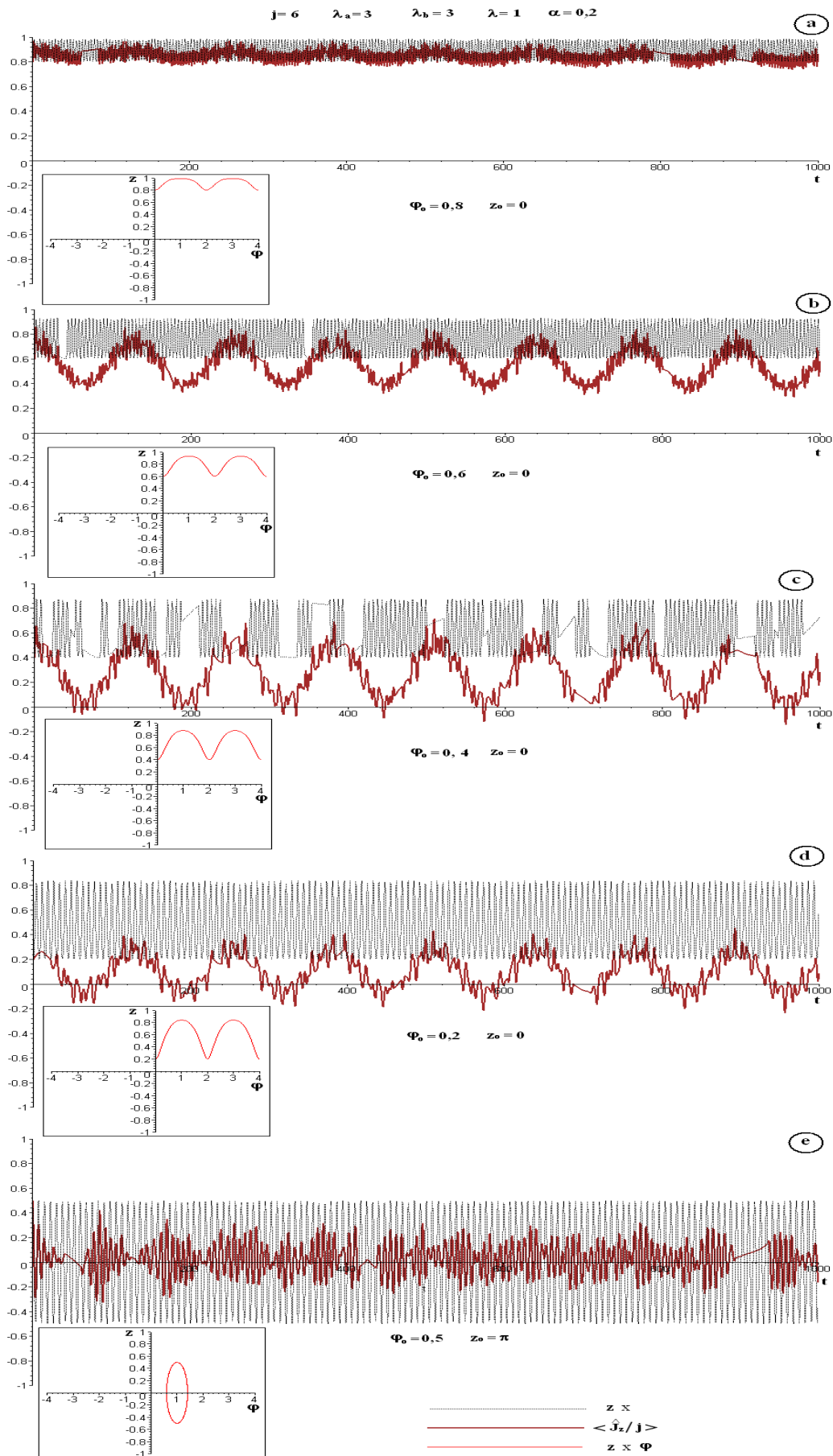


Fig. 6.1: Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 6$ e $\alpha = 0,2$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica.

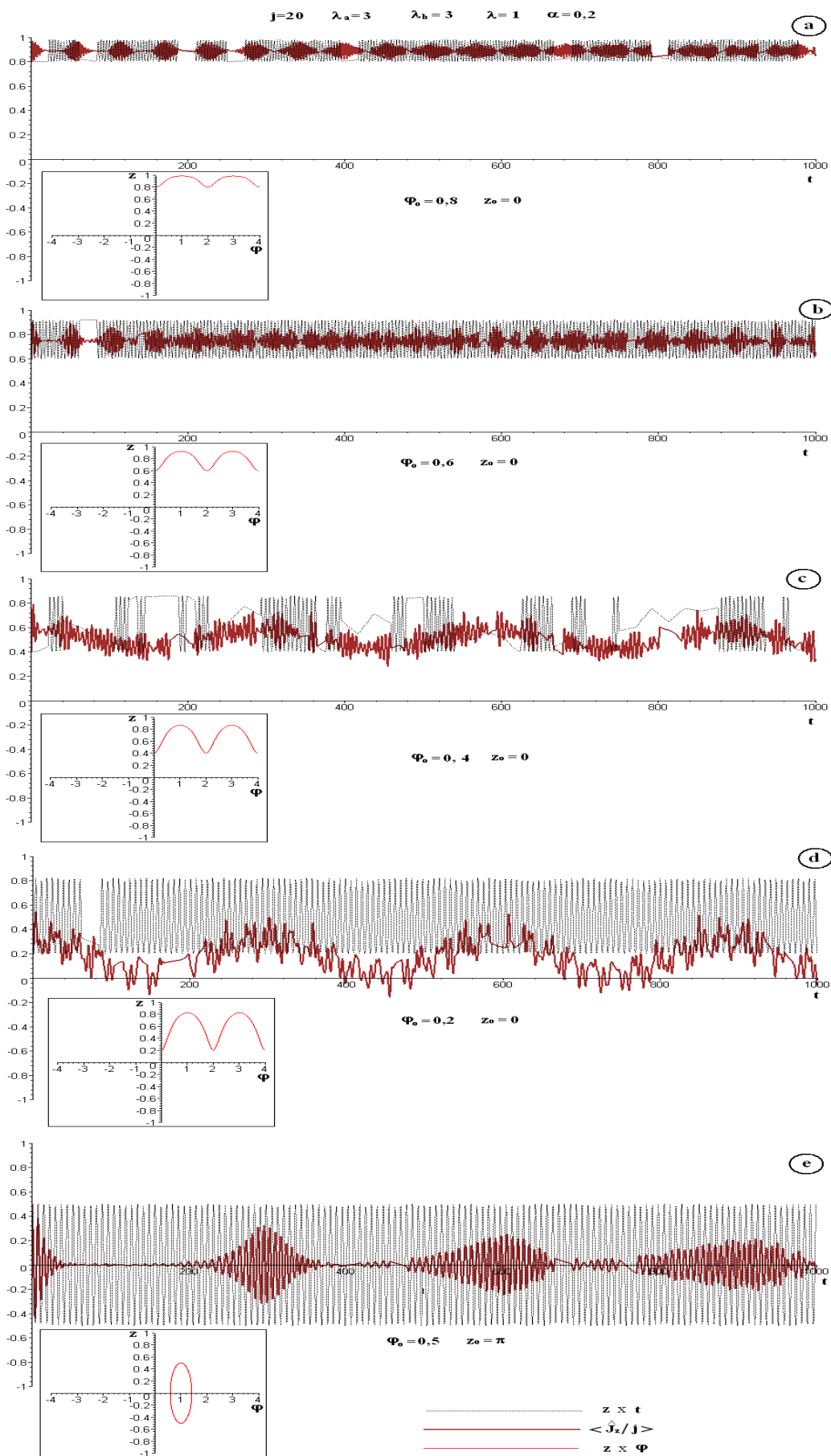


Fig. 6.2: Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 20$ e $\alpha = 0,2$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica

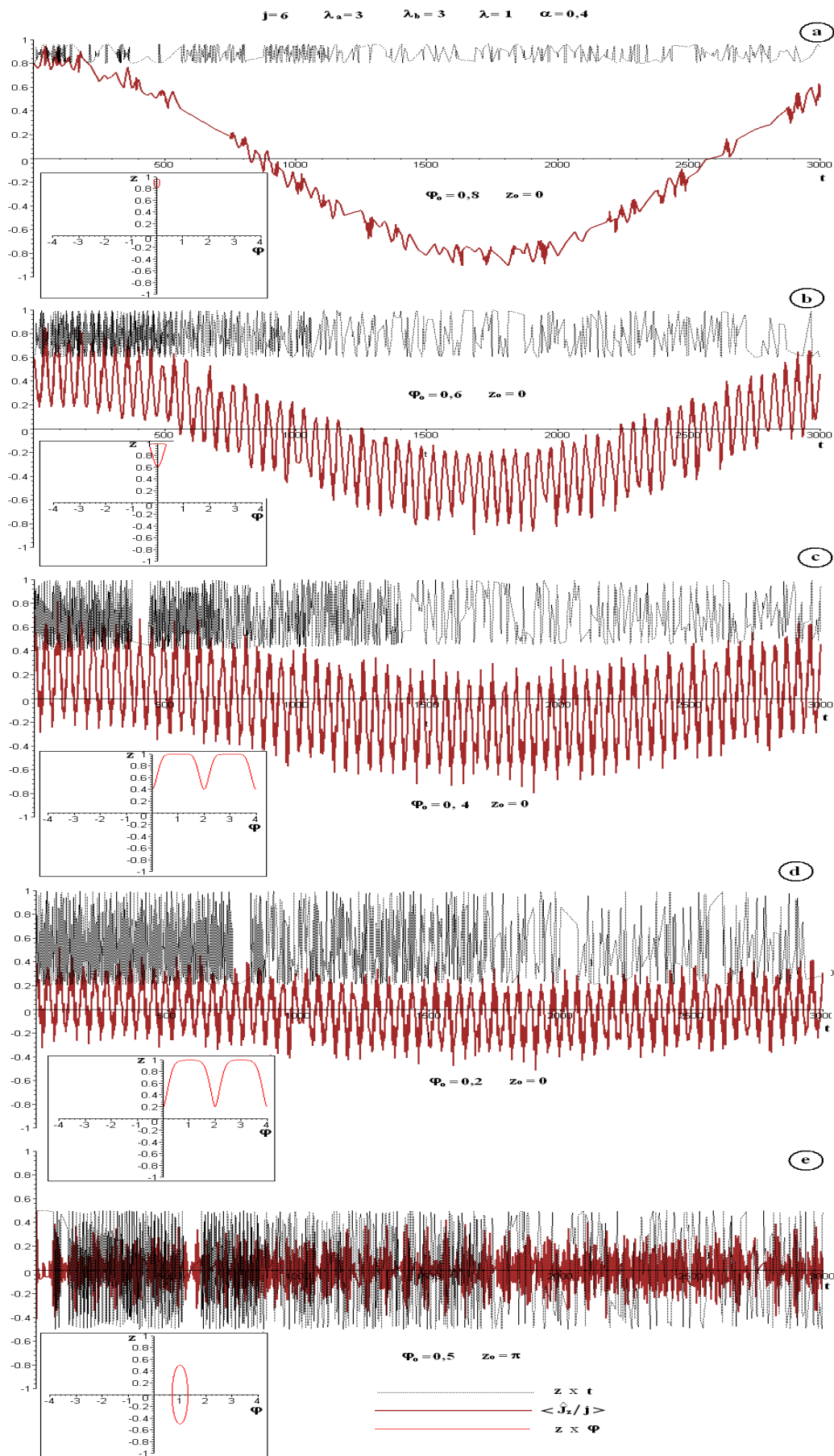


Fig. 6.3: Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 6$ e $\alpha = 0,4$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica.

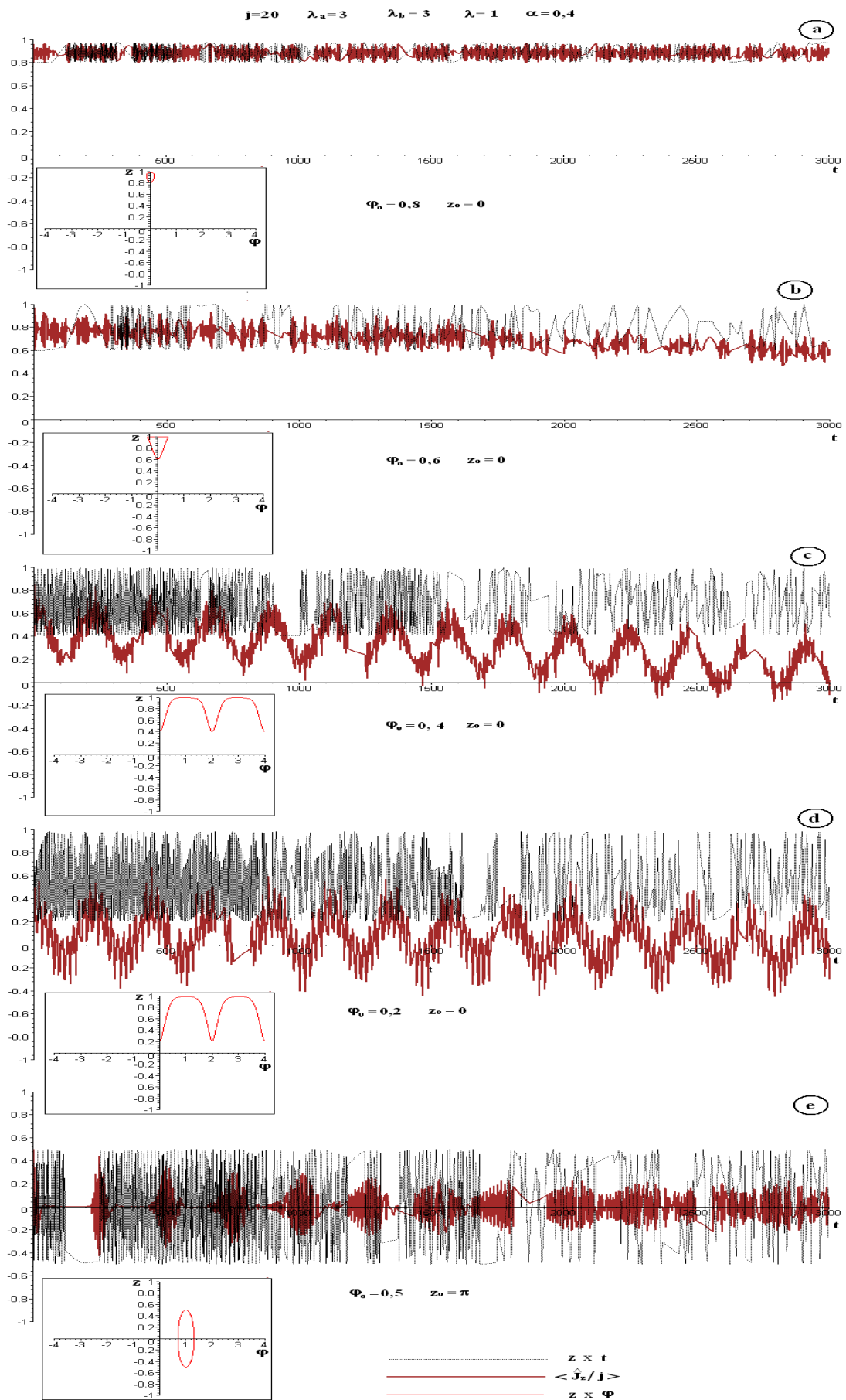


Fig. 6.4: Evolução temporal dos estados coerentes de quasi-spin com $j = 20$ e $\alpha = 0,4$. Nos gráficos menores está representado o espaço de fase $z \times \varphi$ correspondente a evolução clássica

CONCLUSÃO

Neste trabalho, estudamos paralelamente duas hamiltonianas, ambas com duas componentes. Destas, uma o gás de bósons é formado por átomos em dois níveis hiperfinos diferentes (sistema atômico) e a outra, possui moléculas, além de átomos, sua composição (sistema molecular). Neste tipo de sistema há dois fenômenos que nos interessa: *Tunelamento* e *auto armadilhamento quântico* os quais são relativos à interconversão entre as componentes.

Para vislumbrar estes fenômenos, utilizamos o modelo de dois níveis descrito em termos dos geradores da álgebra $SU(2)$. Para detectar o tunelamento obtemos o espectro e averiguamos se havia a presença de dubletos. O auto armadilhamento, foi detectado através dos valores médios do operador relacionado a diferença de população ($\langle \hat{J}_z \rangle \neq 0$). Estes sistemas em consideração apresentam quebra de simetria caracterizado pela ocorrência auto-armadilhamento.

Agora através da transformação de estados coerentes da álgebra $SU(2)$, obtemos uma hamiltoniana numa descrição semi-clássica. E com auxílio do princípio variacional, obtemos as equações de movimento dos relativo a esta nova hamiltoniana e notamos que a diferença de população (\mathbf{z}) e a diferença de fase (φ) formam um par canonicamente conjugado.

Nesta descrição o sistema apresenta trajetórias de equienergia cuja média da diferença de população pode ser diferente de zero ($\bar{z} \neq 0$). O que caracteriza quebra de simetria nesta descrição.

O intuito desta transformação é estudar os limites de ocorrência de auto-armadilhamento e tunelamento com relação os parâmetros de interação e acoplamento. Também procuramos as faixas de energia para os quais estes dois fenômenos ocorrem, além de uma relação entre o auto-armadilhamento e tunelamento. Para isto fizemos um estudo detalhado do comportamento do plano $E \times z$ a superfície de energia. A superfície de energia nos dá todas as possíveis trajetórias da dinâmica clássica. Com isso, comparamos o espectro de energia e os valores médios da diferença de população com o plano $E \times z$, com o intuito

de visualizar a modificação do tunelamento e o auto-armadilhamento pela transformação de estados coerentes.

Feito isso, partimos para a evolução temporal onde comparamos a dinâmica quântica com a clássica. Na dinâmica quântica, obtemos uma equação de estado coerentes que leva em consideração os efeitos quânticos. A evolução temporal do sistema semi-clássico, é dado pela solução das equações de movimento geradas pelas equações de hamilton. Nesta parte, nos interessava os efeitos do tunelamento sob a população auto-armadilhado em certos níveis de energia selecionados através do estado coerente de partida (z_o, φ_o) . O tunelamento ocasiona a restauração na simetria da diferença na diferença de população, trazendo para mais próximo de zero nas regiões de forte tunelamento ($\langle \hat{J}z \rangle \neq \bar{z}$).

6.4 Os resultados foram

O sistema atômico simétrico $\lambda_a = \lambda_b$ apresenta forte presença de tunelamento, devido a presença de dubletos e estados onde $\langle \hat{J}_z \rangle_\nu = 0$ está em uma região de trajetórias classicamente proibidas.

O sistema apresenta quebra de simetria na diferença de população caracterizado pelo auto-armadilhamento, sendo que esta tende a ser restaurada quando o sistema apresenta tunelamento.

Este também apresenta auto-armadilhamento sendo que efeitos quânticos suavizam a passagem do regime SEM para COM auto-armadilhamento. No semi-clássico a passagem é abrupta. O Ponto de sela e a bifurcação da média da diferença de população ocorrem em patamares diferentes de energia, sendo que a bifurcação ocorre na região classicamente proibida.

O tunelamento pode manter ou não simetria do sistema conforme o a intensidade do acoplamento e o numero de partículas.

No caso atômico com $\lambda_a \neq \lambda_b$ e Molecular a passagem do regime sem para com MQST coincidem com o caso semi-clássico, ou seja, a bifurcação da média da diferença de população e o ponto de sela ocorre no mesmo patamar de energia. Com isso estes sistemas não apresenta tunelamento. Nesta situação temos sempre ($\langle \hat{J}z \rangle = \bar{z}$).

A evolução temporal do estado coerente fica melhor descrita levando-se em consideração os efeitos quânticos (dinâmica quântica). Este também apresenta o fenômeno de colapso-ressurgimento.

6.5 Perspectivas

Tentar obter alguns dos pontos críticos analíticos para superfície atômica assimétrica e molecular com a ajuda do *Hessiano*;

Observar os efeitos da aproximação de **RW** (*Rotate Waving*) sobre as sistemas Hamiltonianas em questão tanto quânticamente quanto classicamente.

Estudar a corrente $I = \dot{z}$, $\hat{I} = i[\hat{J}, \hat{H}]$, inclusive na aproximação de **RW**

Estudar os efeitos de perdas por **decoerência** ou **dissipação**, tais como: *atrito* (viscosidade), *colisões de três corpos* e *bombeamento contínuo*.

Avaliar os efeitos da temperatura sob nosso sistema utilizando a estatística de Boltzmann;

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] H. Kuratsuji and T. Suzuki, J. Math Phys, **21(3)** (1980)
- [2] Bambi Hu and Le-man Kuang, cond-mat/0005002 29 Apr 2000
- [3] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovannazi and S.R Shenoy, Phys. Rev. Lett. A **79**, 4950 (1997)
- [4] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni and S.R Shenoy, Phys. Rev. A **59**, 620 (1999)
- [5] S. R. Shenoy, Pramana Vol. 58, n° 2 (Feb 2002)
- [6] Elena A. Ostrovskaya, Yuri Kivshar, Mietek Lisak, Bjorn Hall, Frederica Cattani and Dan Anderson, Phys. Rev. A **61**, 031601-1 (2000)
- [7] I. Marino, S. Raghavan, S. Fantoni, A. Smerzi, Phys. Rev. A **60**, 487 (1999)
- [8] E. Timmermans, P. Tommasini, R.Coté, M. Hussein , A Kerman, cond-mat/9805323 25 May 1998
- [9] K. Kasamatsu, Y. Yukinori, and M. Tsubota, cond-mat/0103374 v2 11 Jan 2002
- [10] Le-Ma Kuang and Zhong-Wen, cond-mat/0003490 v1 30 Mar 2000
- [11] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1963).
- [12] Takeya Tsorumi, Hirofumi Morise , and Miki Wadati, cond-mat/9912470 v1 29 Dec 1999
- [13] F. Dalfovo, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Rev. Mod. Phys **71** 463 (1999)
- [14] J.I. Cirac, M. Lewenstien, K. Molmer, and P. Zoller, Phys. Rev. A **57**, 1208 (1998)
- [15] Th. Bush, J.I. Cirac, V. M. Pérez-Garcia, and P. Zoller, Phys. Rev. A **56**, 2978 (1997)

- [16] M. J. Steel and M. J. Collett, cond-mat/9710124 14 Oct 1997
- [17] J. F. Corney, G. J. Milburn, Phys. Rev. A **58** 2399 (1998)
- [18] G. J. Milburn and J. Corney, E. M. Wright, D. F. Walls, Phys. Rev A **55**, 4318, (1997)
- [19] A. N. Salgueiro, M. C. Nemes, M. C. Sampaio, And A. F. R. de Toledo Piza, Physica A **290**, 4 (1995)
- [20] D. Gordon, and C.M. Savage, Phys Rev. A **59** 4623 (1999)
- [21] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, and A. Alexlsson, Phys. Rev A **51**, 4852 (1995)
- [22] E. Timmermans, P. Tommasini, M. Hussein ,A Kerman, Phys. Rep. 315 (1999) 199-230
- [23] J. M. Vogels, C. C. Tsai, R. S. Freeland, S. J. J. M. F. Kokkelmans, V. J. Verhaar and D. J. Heizen, Phys. Rev A **56**, R1062 (1997)
- [24] P. D Drummond, K. V. Kreruntsya, and H. He, Phys. Rev. Lett. **81** 3055 (1998)
- [25] J. Javanainam, and M. Mackie Phys. Rev A **59** R3186 (1999)
- [26] J. M. Radcliffe; J. of Phys **A4** 313 (1971)
- [27] A. M. Parelomov; Comm. Math. Phys. **26** 222 (1972)
- [28] D. Galetti And A. F. R. de Toledo Piza, Physica A **214**, 207 (2001)
- [29] Frederico Firmo de Souza Cruz, Tese: Teorias Microscópicas para Movimentos Coletivos de Grande Amplitude., Doutorado, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1986
- [30] D. Galetti, Seminar Talk: *Coherent Rotational states*, III Escola de Verão Jorge Andre Swieca,Itaipava-RJ-Breasil (1997)
- [31] C. C. Gerry, Optical Express **76** N°2 Vol.8 Jan ANO 2001
- [32] H.T.C. Stoof, J.M. Koelman, and B.J. Verhaar Phys. Rev. B **38**, 4688 (1988)
- [33] E. Tiesinga, A.J. Moerdijk, and H.T.C. Stoof Phys. Rev A **46**, R1167 (1992)
- [34] Nicholas Robins, Craig Savage, and Elena Ostrovskaya, cond-mat;0004127 v2 15 jun 2000