

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

ANSATZ DE BETHE E PRINCÍPIO VARIACIONAL APLICADOS A  
SISTEMAS DE POUCAS PARTÍCULAS INTERAGENTES EM UM  
POTENCIAL HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL

Diefferson Rubeni da Rosa de Lima

Porto Alegre  
Novembro de 2014

**ANSATZ DE BETHE E PRINCÍPIO VARIACIONAL APLICADOS A  
SISTEMAS DE POUCAS PARTÍCULAS INTERAGENTES EM UM  
POTENCIAL HARMÔNICO UNIDIMENSIONAL<sup>1</sup>**

**Diefferson Rubeni da Rosa de Lima**

Tese realizada sob a orientação da Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>.  
Angela Foerster e apresentada ao Instituto de  
Física da UFRGS em preenchimento parcial dos  
requisitos para a obtenção do título de Doutor em  
Física.

**Porto Alegre  
Novembro de 2014**

---

<sup>1</sup>Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

# Resumo

Neste trabalho nós desenvolvemos uma abordagem baseada no método do ansatz de Bethe e no princípio variacional para encontrar a energia do estado fundamental para sistemas unidimensionais formados por um número pequeno de partículas interagentes. Particularmente, nós investigamos sistemas de duas e três partículas interagentes aprisionados em uma armadilha harmônica unidimensional. Nossos resultados apresentam uma boa concordância com as soluções analíticas e numéricas existentes na literatura. Também determinamos a densidade de probabilidade e a função de correlação de pares do sistema. Nossa abordagem é bastante genérica e permite o estudo de sistemas de poucas partículas mais complexos, alguns de interesse experimental, que não apresentam solução analítica.

# Abstract

In this work we develop an approach based on the Bethe ansatz method and the variational principle to find the ground state energy for a one-dimensional few-body system. We investigate a system of two and three interacting particles confined in a one-dimensional harmonic trap. Our results show a good agreement with existing analytical and numerical results. We also determine the probability density and the pair correlation function of the system. Our approach is very general and enables the study of more complex few-body systems, some of them of experimental interest, where no exact analytical solution is available.



# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>7</b>
1.1	O ansatz de Bethe . . . . .	7
1.2	Átomos ultrafrios . . . . .	8
1.3	Sistemas de poucos átomos . . . . .	10
1.4	Motivação . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Ansatz por regiões</b>	<b>13</b>
2.1	Introdução . . . . .	13
2.2	Sistema de duas partículas interagentes em um potencial harmônico . . . . .	14
2.3	Ansatz por regiões . . . . .	16
2.4	Resultados . . . . .	19
2.4.1	Interação repulsiva ( $c > 0$ ) . . . . .	19
2.4.2	Interação atrativa ( $c < 0$ ) . . . . .	21
2.4.3	Comparação . . . . .	23
2.5	Sistema de três partículas interagentes . . . . .	25
2.6	Considerações sobre o ansatz por regiões . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Ansatz geométrico</b>	<b>31</b>
3.1	Introdução . . . . .	31
3.2	Sistema de $N$ partículas interagentes em um potencial harmônico . . . . .	32
3.3	Ansatz geométrico . . . . .	35
3.4	Abordagem variacional . . . . .	37
3.5	Resultados para $N = 2$ e $N = 3$ bósons . . . . .	37
3.6	Conclusões . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Conclusões</b>	<b>45</b>
<b>A</b>	<b>Ansatz de Bethe</b>	<b>47</b>
A.1	Introdução . . . . .	47

<i>SUMÁRIO</i>	6
A.2 Modelo de Lieb-Liniger . . . . .	48
A.3 Problema de 2 partículas . . . . .	48
A.4 Problema de $N$ partículas . . . . .	49
<b>B Construção do termo central do ansatz por regiões</b>	<b>56</b>
<b>C Normalização da função de onda e valor esperado do Hamiltoniano pelo ansatz por regiões</b>	<b>58</b>
C.1 Caso repulsivo ( $c > 0$ ) . . . . .	58
C.1.1 Normalização da função de onda . . . . .	59
C.1.2 Valor esperado do Hamiltoniano . . . . .	60
C.2 Caso atrativo ( $c < 0$ ) . . . . .	64
C.2.1 Normalização da função de onda . . . . .	65
C.2.2 Valor esperado do Hamiltoniano . . . . .	66
<b>D Tabelas numéricas para o ansatz por regiões</b>	<b>73</b>
D.1 Caso repulsivo . . . . .	74
D.2 Caso atrativo . . . . .	75
<b>E Programação</b>	<b>76</b>
<b>F Trabalhos Publicados</b>	<b>91</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 O ansatz de Bethe

Hans Bethe, em 1931, apresentou uma solução para o modelo de Heisenberg, uma cadeia unidimensional de comprimento  $L$  formada por partículas com spin  $\frac{1}{2}$  fixas em suas posições [1]. As partículas do sistema interagem entre si através de interações de curto alcance, somente com seus primeiros vizinhos. As condições de contorno do sistema utilizadas foram periódicas. A partir deste trabalho desenvolveu-se o conceito do ansatz de Bethe para a construção dos autovalores e autovetores de um Hamiltoniano exatamente solúvel. Por este método, uma forma genérica para um autovetor dependente de diversos parâmetros livres é assumida. Restrições são então determinadas sobre os parâmetros para assegurar que o vetor seja de fato um autovetor do Hamiltoniano. As equações de restrição são conhecidas como as equações do ansatz de Bethe para o modelo e os modelos que podem ser resolvidos pelo método do ansatz de Bethe são conhecidos como modelos exatamente solúveis. Apesar de terem sido propostas inicialmente para temperatura zero, as equações do ansatz de Bethe podem ser generalizadas para situações com temperatura, no formalismo conhecido como ansatz de Bethe termodinâmico. Grandes contribuições na área foram dadas por Yang [2], Gaudin [3], Sutherland [4], Baxter [5], Faddeev [6], Takahashi [7], Zamolodchikov [8], entre outros.

Um grande número de modelos quânticos unidimensionais têm sido resolvidos pelo método do ansatz de Bethe desde o trabalho pioneiro de Bethe na solução do magneto de Heisenberg. Durante os últimos 80 anos o método do ansatz de Bethe tem sido aprimorado e aplicado a diversos problemas físicos, tais como os gases com interação delta (férmions [2] e bósons [9]), o modelo de Hubbard unidimensional [10] e modelos de vértices bidimensionais [5], entre outros. Recentemente, grandes avanços nas tecnologias de controle e produção de gases quânticos ultrafrios têm permitido a obtenção experimental de bósons e férmions interagentes

em sistemas unidimensionais, tornando possível a verificação das previsões feitas pelo método do ansatz de Bethe para estes sistemas ultrafrios.

## 1.2 Átomos ultrafrios

A obtenção de gases quânticos ultrafrios através de diferentes métodos, como o resfriamento evaporativo, oferece a oportunidade de explorar as propriedades básicas dos sistemas quânticos. Estes gases são formados principalmente por metais alcalinos e, mais recentemente, por outros átomos bem como por moléculas diatômicas e poliatômicas [11]. Eles podem ser fermiônicos ou bosônicos, podendo apresentar estruturas hiperfinas. Estes sistemas são muito diluídos e frios, com temperaturas típicas na ordem de nanokelvin e com densidades na ordem de  $10^{11}$  átomos por centímetro cúbico [12]. Além disso, em geral sua interação com os campos eletromagnéticos é bem conhecida, havendo grande controle experimental sobre a interação entre os átomos.

Desde a realização experimental dos condensados de Bose-Einstein (CBE) em gases atômicos diluídos [13, 14, 15, 16] em 1995, avanços impressionantes na área da matéria ultrafria têm ocorrido. Entre eles, podemos citar a criação do primeiro gás de Fermi degenerado, em 1999 [17], utilizando átomos de  $^{40}\text{K}$  e subseqüentemente do condensado molecular ultrafrio a partir de um gás de férmions degenerado [18], cujas propriedades superfluídas após a condensação de pares foram observadas em [19]. Posteriormente, devido ao grande desenvolvimento das técnicas envolvendo o confinamento óptico e magnético de átomos ultrafrios, tornou-se possível aprisionar átomos resfriados em tubos unidimensionais, abrindo novas possibilidades para detectar fases exóticas [20]. Estes sistemas incluem átomos bosônicos de  $^{85}\text{Rb}$  [21] e átomos fermiônicos de  $^{40}\text{K}$  [22] e  $^6\text{Li}$  [23], entre outros.

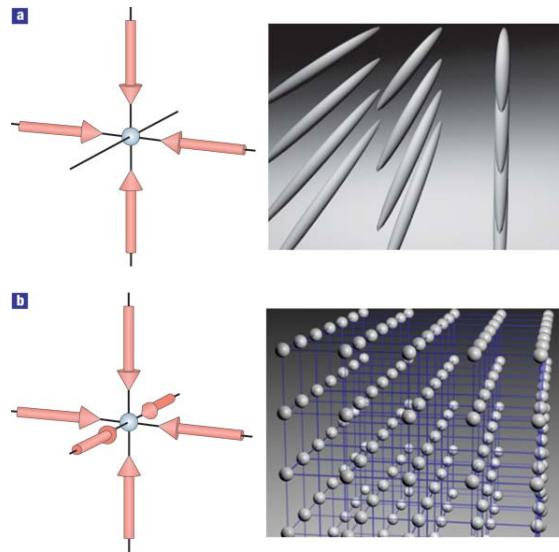


Figura 1.1: (a) Numa rede óptica bidimensional, os átomos são confinados em um potencial que pode ser descrito como uma armadilha unidimensional. (b) No caso tridimensional, a rede óptica pode ser aproximada por um conjunto cúbico tridimensional com osciladores harmônicos em cada ponto da rede. Figura extraída de [24].

Em experimentos envolvendo átomos ultrafrios, os potenciais de confinamento (armadilhas magnéticas, armadilhas ópticas, etc) podem ser bem descritos por potenciais harmônicos [25]. Se as frequências de confinamento forem iguais em todas as direções (isto é, a armadilha é esférica) a amostra de gás no interior da armadilha assume uma forma tridimensional. Se, por outro lado, a frequência da armadilha é maior em duas direções, a forma da nuvem de gás se torna alongada e, no limite em que a frequência em uma direção se torna muito maior do que na outra, o sistema se transforma efetivamente em um sistema unidimensional (veja a Figura 1.1). O comportamento dos gases quânticos ultrafrios na transição entre os regimes tridimensional e unidimensional é muito interessante e tem sido estudado através do método de Monte Carlo [25]. No contexto dos átomos ultrafrios, o uso da ressonância Feshbach permite que se varie a força de interação entre as partículas de maneira extremamente controlada e se ajuste o comprimento de espalhamento para praticamente qualquer valor arbitrário. Duas realizações paradigmáticas no controle destes parâmetros foram a observação de uma transição de fase quântica para o estado de Mott a partir de um estado superfluido para um gás de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  [26], bem como o “crossover” entre uma fase superfluida Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) e um condensado de Bose-Einstein (BEC), obtida ao resfriar-se um gás fermiônico de  $^{40}\text{K}$  até um estado quântico degenerado [27].

Por outro lado, é importante salientar que é no regime unidimensional que propriedades quânticas interessantes, como os trions [28] ou outras fases exóticas tipo a fase de Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) [29] foram observadas [30]. Experiências inovadoras re-

centes envolvendo átomos bosônicos e fermiônicos confinados em uma dimensão proporcionaram uma melhor compreensão de diversos efeitos significativos quânticos, devido a efeitos de correlação em sistemas de muitos corpos. Além disso, é interessante observar que vários resultados experimentais em uma dimensão observados até o momento estão em excelente concordância com os resultados obtidos usando métodos matemáticos e a análise de modelos exatamente solúveis. Podemos citar pelo menos quatro exemplos de modelos exatamente solúveis utilizados para explicar os resultados de laboratório, listados abaixo:

- gás de bósons do tipo Lieb-Liniger [31]
- gás Super-Tonks-Girardeau [32]
- gás de Fermi de spin  $1/2$  [33]
- gás de bósons com spin [34]

Em cada um destes casos, os resultados matemáticos obtidos foram cruciais para a compreensão dos fenômenos físicos. Nestes experimentos, o número de átomos utilizados foi suficientemente grande (entre  $10^6$  e  $10^{12}$  átomos), de forma que foi possível utilizar o ansatz de Bethe termodinâmico acoplado a outras técnicas, como a aproximação de densidade local [35] para explicar propriedades físicas dos sistemas. Por outro lado, foi realizado recentemente um experimento notável envolvendo poucos (entre 2 e 10) átomos ultrafrios de  $^6\text{Li}$  em uma dimensão pelo grupo do professor S. Jochim em Heidelberg, de grande interesse físico [36, 37]. Neste caso, devido ao pequeno número de átomos, o ansatz de Bethe termodinâmico não pode ser aplicado, havendo então a necessidade de explorar outros métodos, objetivo principal deste trabalho.

### 1.3 Sistemas de poucos átomos

Uma nova classe de experimentos envolvendo gases quânticos ultrafrios particularmente interessante é representada pelos sistemas quânticos com poucos átomos. Sistemas de poucos átomos ou moléculas estão entre as estruturas mais simples que constituem os blocos básicos de construção da matéria. Apesar dessa simplicidade, seu estudo apresenta grandes desafios [38]. Uma das razões é o fato de que não se pode fazer uso de métodos estatísticos usuais, e ainda existem graus de liberdade suficientes no sistema para tornar o problema complexo. Por exemplo, no caso de sistemas interagentes construídos com potenciais harmônicos, não existe solução analítica para a equação de Schroedinger mesmo para o caso de apenas três partículas.

Recentemente, muita atenção tem sido dada ao estudo de sistemas de poucas partículas confinadas em um potencial harmônico. Neste contexto, foi realizado um experimento notável em um sistema de dois férmions de  $^6\text{Li}$  ultrafrios no estado fundamental, confinados por um

potencial criado por uma armadilha óptica e um campo magnético. As duas partículas interagem essencialmente por um potencial de contato. Especialmente, os férmions estão confinados em um potencial do tipo charuto; entretanto, como a frequência axial da armadilha é muito maior do que a frequência transversal, foi possível considerá-lo como um modelo unidimensional. Este sistema pode ser bem descrito pelo Hamiltoniano [36, 39, 40]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_2 - x_1) + \frac{1}{2}m\omega^2 (x_1^2 + x_2^2)$$

onde  $m$  é a massa das partículas,  $\omega$  é a frequência angular do oscilador e  $c$  representa a intensidade da força da interação entre partículas, que pode ser repulsiva ( $c > 0$ ) ou atrativa ( $c < 0$ ).

Nesta experiência, a energia do estado fundamental do sistema foi medida e comparada com o resultado analítico existente [39], que não pode ser generalizado para um número maior de átomos. Portanto, uma solução teórica para três ou mais átomos seria necessária e relevante. Vale mencionar aqui que o Hamiltoniano usado para descrever este sistema é basicamente equivalente ao Hamiltoniano utilizado para discutir a existência de fases exóticas num experimento de impacto realizado pelo grupo do professor R. Hulet [33]. Neste caso trabalha-se com um número maior de átomos, e o ansatz de Bethe termodinâmico acoplado à aproximação de densidade local foram utilizados para discutir os diagramas de fase e os perfis de densidade de átomos de  ${}^6\text{Li}$  em tubos unidimensionais [33].

## 1.4 Motivação

Embora o ansatz de Bethe tenha sido originalmente desenvolvido como solução para um sistema de muitos corpos, ele é totalmente aplicável para sistemas de poucos corpos. Visualizando a possibilidade de novas experiências com poucos átomos ultrafrios em uma dimensão [41], neste trabalho nós vamos propor uma abordagem variacional baseada na utilização da solução exata através do ansatz de Bethe para um sistema de partículas com interação do tipo delta. Embora na presença de um potencial harmônico estes sistemas não sejam exatamente solúveis, nós vamos supor que em uma certa região o espalhamento entre os átomos aprisionados é predominantemente não difrativo [42], de forma que a solução do modelo integrável fornece uma descrição suficientemente adequada. Assim, nós vamos propor uma função de onda variacional que exhibe um comportamento da solução analítica do sistema integrável, na região onde a interação de contato é dominante e, na região onde o termo do oscilador harmônico predomina, é descrita por uma função gaussiana decrescente. Esta é uma possibilidade ainda inexplorada na literatura. Em particular, nós iremos estudar sistemas de duas e três partículas interagindo através de um potencial de contato e confinadas por um potencial

harmônico, tanto no regime atrativo quanto no repulsivo.

No capítulo 2 nós vamos introduzir nossa abordagem, que consiste em combinar o princípio variacional com o ansatz de Bethe, para a obtenção da energia do estado fundamental de um sistema composto por duas partículas (bósons ou férmions). Embora este sistema apresente uma solução exata [39], vamos adotar esta abordagem aproximativa como referência para que, posteriormente, possamos generalizar nossos resultados para um número maior de partículas. A solução exata já foi explorada em um ansatz analítico para a função de onda num sistema de poucos bósons baseado em algumas hipóteses e respeitando os limites analíticos nos regimes de repulsão nula e repulsão infinita [43]. Entretanto, este ansatz é extremamente complexo do ponto de vista operacional e só vale para o caso repulsivo. O nosso ansatz, por outro lado, é baseado no conhecimento completo da solução exata para sistemas de gases de bósons e férmions interagindo através de um potencial de contato [2, 3, 7] e é válido para ambos os regimes atrativo e repulsivo. Ao final do capítulo nós vamos discutir alguns pontos importantes sobre nossa abordagem e comentar sobre as possíveis limitações e dificuldades do método de construção da nossa função tentativa.

Posteriormente, no capítulo 3, vamos melhorar o ansatz apresentado no capítulo 2 para tratar um sistema composto por três bósons interagentes sem spin confinados por um potencial harmônico. Utilizando este ansatz aprimorado como uma função de onda tentativa no método variacional, obtemos a energia do estado fundamental para sistemas de dois e três bósons interagentes confinados por um potencial harmônico. Novamente, é importante destacar que o nosso ansatz é válido para ambos os regimes atrativo e repulsivo. Com algumas modificações, nossa proposta pode ser adaptada a diferentes cenários, como por exemplo: diferentes geometrias do potencial de confinamento, sistemas de bósons com spin e sistemas fermiônicos, além de sistemas mistos, compostos por bósons e férmions.

No capítulo 4 apresentaremos as conclusões e perspectivas do trabalho. Os resultados obtidos nos capítulos 2 e 3 são originais e constituem a contribuição do autor para a área.



# Capítulo 2

## Ansatz por regiões

### 2.1 Introdução

Com o objetivo de estudar sistemas com poucas partículas interagindo através de um potencial de contato e confinados em um potencial harmônico, nesta seção nós vamos construir “o ansatz por regiões”, que será utilizado como uma função de onda tentativa na aplicação do princípio variacional. Motivados pelo experimento recente feito pelo grupo do professor Selim Jochim [36], envolvendo apenas dois férmions “distintos” em uma armadilha harmônica, nós começaremos considerando um sistema composto por dois férmions interagentes com spins desemparelhados em um potencial harmônico unidimensional. Faremos uma breve discussão a respeito das principais propriedades que o ansatz deve apresentar e então utilizaremos o princípio variacional para aproximar a energia do estado fundamental do sistema, comparando nossa aproximação com resultados analíticos existentes [39]. Depois, de maneira análoga, nós discutiremos a construção do ansatz para um sistema de três partículas interagentes em uma armadilha harmônica unidimensional. Escolhemos um sistema de bósons por sua simplicidade; nosso ansatz, entretanto, pode ser aplicado também para sistemas de três férmions. Como veremos, as limitações do ansatz por regiões já ficarão evidentes ao considerarmos o sistema de três bósons. Estas limitações irão nos obrigar a buscar outra perspectiva para a construção de uma função de onda tentativa, culminando no desenvolvimento do ansatz geométrico.

## 2.2 Sistema de duas partículas interagentes em um potencial harmônico

Vamos considerar um sistema formado por dois átomos fermiônicos interagentes com massa  $m$  confinados em uma armadilha harmônica axialmente simétrica com frequência  $\omega$ . Tal sistema pode ser descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_A(x_1, x_2) + V_I(x_1 - x_2), \quad (2.1)$$

onde  $x_1$  e  $x_2$  denotam a posição dos dois férmions e  $V_A(x_1, x_2)$  representa o potencial de aprisionamento,

$$V_A(x_1, x_2) = \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2. \quad (2.2)$$

Para energias suficientemente baixas, o potencial de interação  $V_I$  pode ser escrito como uma interação de contato do tipo delta de Dirac [39], isto é,

$$V_I(x_1 - x_2) = 2c\delta(x_2 - x_1), \quad (2.3)$$

onde  $c$  representa a intensidade da interação. O potencial de interação pode ser repulsivo ou atrativo, respectivamente para  $c > 0$  ou  $c < 0$ .

Apesar de sua simplicidade, o potencial harmônico  $V_A(x_1, x_2)$  faz com que o Hamiltoniano completo (2.1) não seja exatamente solúvel pelo ansatz de Bethe. Entretanto, se nós considerarmos apenas o Hamiltoniano de interação,

$$H_I = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) \quad (2.4)$$

este sistema é exatamente solúvel através do ansatz de Bethe, cuja solução é discutida no *Apêndice A*. O ansatz de Bethe é uma ferramenta fundamental para a solução exata de modelo de gases interagentes em  $1D$ , tendo sido aplicado por Lieb e Liniger para o caso de bósons [9] e por Yang e Gaudin para o caso de férmions [2, 3].

O Hamiltoniano completo (2.1) pode ser resolvido exatamente, por métodos distintos do ansatz de Bethe, quando consideramos o potencial de confinamento (2.2) e o potencial de interação (2.3) [39], embora não exista solução analítica para este sistema quando  $N > 2$ . Assim, propriedades físicas de interesse, como o estado fundamental de energia, só podem ser obtidas através de aproximações ou cálculos numéricos quando o sistema possui três ou mais partículas. Para isso nós vamos desenvolver um ansatz que, combinado com o princípio

variacional, nos fornecerá uma aproximação para os autovalores de energia do Hamiltoniano. Neste desenvolvimento o ansatz de Bethe será parte central do nosso ansatz, como veremos a seguir.

Vamos utilizar a abordagem variacional para obter o estado fundamental de energia do sistema de dois bósons interagentes. A solução exata deste Hamiltoniano será utilizada como um marco para avaliar os resultados da abordagem. Se obtivermos bons resultados neste caso estaremos autorizados a aplicar nossa abordagem variacional para o caso de três bósons interagentes.

Por conveniência e uma vez que tanto o potencial harmônico quanto o termo cinético do Hamiltoniano são quadráticos, é possível separar o movimento relativo entre as partículas do movimento do centro de massa do sistema. Isto pode ser feito facilmente definindo as coordenadas de centro de massa  $R$  e movimento relativo  $x$ , dadas por

$$R = \frac{x_1 + x_2}{2}, \quad (2.5)$$

$$x = x_2 - x_1. \quad (2.6)$$

As transformações inversas são dadas por

$$x_1 = R - \frac{x}{2},$$

$$x_2 = R + \frac{x}{2}.$$

Neste sistema de coordenadas nós podemos separar o Hamiltoniano do sistema em suas contribuições de centro de massa  $H_{CM}$  e movimento relativo  $H_{rel}$

$$H_{CM} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 R^2, \quad (2.7)$$

$$H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2. \quad (2.8)$$

Nas equações acima,  $\mu = \frac{m}{2}$  é a massa reduzida e  $M = 2m$  é a massa total. Podemos observar que as autofunções e autovalores de  $H_{CM}$  são dados pela solução do oscilador harmônico, conhecida na literatura [44]. É importante salientar que para três ou mais partículas também é possível separar a contribuição do centro de massa do restante do Hamiltoniano através da utilização de coordenadas de Jacobi [45].

Para o Hamiltoniano do sistema relativo  $H_{rel}$ , que contém o termo de interação do tipo

$\delta$ , nós vamos aplicar o método variacional. O método consiste em encontrar uma 'função tentativa' dependente de um ou mais parâmetros, chamados 'parâmetros variacionais' e encontrar os valores críticos para estes parâmetros que tornam o valor esperado de energia do estado fundamental o menor possível. A função de onda obtida a partir destes parâmetros críticos torna-se uma aproximação para a função de onda do estado fundamental. Por que faz sentido que a melhor aproximação para a função de onda é aquela com a menor energia? Este resultado é proveniente do Teorema Variacional, que estabelece que a energia  $E$  de qualquer função tentativa sempre será maior ou igual à energia do estado fundamental  $E_0$ ,

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (2.9)$$

Isto demonstra a estratégia do método variacional: uma vez que a energia de qualquer função tentativa é sempre superior à energia do estado fundamental, então qualquer variação na função tentativa que diminui sua energia será uma aproximação melhor à resposta exata, da mesma forma que a função de onda será mais próxima da função de onda real do sistema [44].

Em nossa abordagem construiremos a função tentativa, denotada por  $\Psi(x, \{\alpha, L\})$ , utilizando o conceito do ansatz de Bethe [1, 2, 3]. O parâmetro  $\alpha$  controla o decaimento exponencial da função de onda além dos limites da armadilha e  $L$  indica o limite onde o decaimento começa. No interior da armadilha, onde a interação de contato é relevante, a função tentativa toma a forma do ansatz de Bethe para um sistema de férmions interagentes. Como é usual no método variacional, podemos aproximar o estado fundamental do sistema encontrando os valores críticos para estes parâmetros  $\alpha$  e  $L$  que fornecem o menor valor para a energia. Desta forma, nós construiremos uma função de onda que nos fornece um quadro realístico dos processos físicos envolvidos.

## 2.3 Ansatz por regiões

Nesta seção vamos apresentar a função de onda tentativa para o Hamiltoniano do sistema relativo  $H_{rel}$ . Como mostrado na Figura 2.1 existem três regiões relevantes para o comportamento da função de onda tentativa do nosso sistema, limitadas através do parâmetro  $L$ .

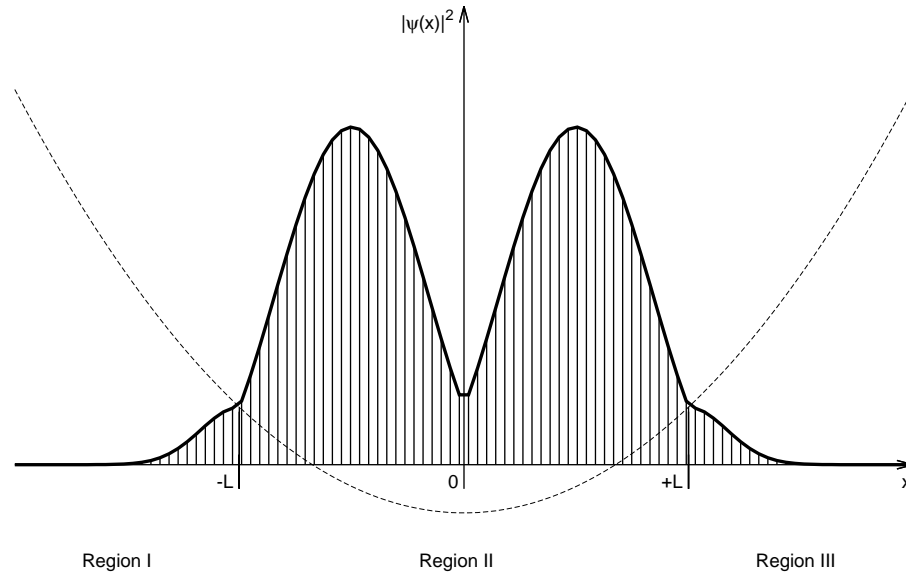


Figura 2.1: Representação esquemática da densidade de probabilidade normalizada,  $|\Psi(x)|^2$ , no sistema de coordenadas relativas. O parâmetro variacional  $L$  pode ser usado para delinear três regiões de acordo com os limites do potencial harmônico.

Nosso ansatz variacional apresenta a seguinte configuração (maiores detalhes podem ser obtidos no *Apêndice B*):

$$\Psi = \begin{cases} \psi_I = e^{-\alpha(x+L)^2} \psi_{II}(-L) & -\infty < x < -L \\ \psi_{II} = (e^{ikL} e^{-ikx} + e^{ikx}) \Theta(x) \\ \quad + (e^{ikL} e^{ikx} + e^{-ikx}) \Theta(-x) & -L < x < +L \\ \psi_{III} = e^{-\alpha(x-L)^2} \psi_{II}(+L) & +L < x < +\infty \end{cases} \quad (2.10)$$

onde  $\Theta$  é a função degrau de Heaviside,

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \\ \frac{1}{2}, & x = 0 \end{cases}$$

Na região *II* ( $-L < x < +L$ ) o sistema de dois férmions está sujeito ao potencial de contato e ao potencial da armadilha. Devido a simetria do sistema, nas proximidades do eixo central ( $x = 0$ ) o termo de interação é dominante. Em outras palavras, a interação de contato é muito mais relevante do que a interação devido ao potencial de aprisionamento. Por esta razão é

possível aproximar a função de onda tentativa na região  $II$  por uma função de onda que descreve um sistema de dois férmions distintos interagindo por contato. Historicamente, tais sistemas foram estudados no contexto de redes unidimensionais de tamanho " $L$ " e condições de contorno periódicas, resolvidas exatamente por Yang [2] e Gaudin [3] através do método do ansatz de Bethe. Posteriormente, grandes contribuições foram dadas por Takahashi [7], Sutherland [46] entre outros [40, 47, 48].

Portanto, nossa escolha para a função tentativa nessa região corresponde à solução do problema de dois férmions interagentes através de um potencial do tipo delta de Dirac em coordenadas relativas, de forma que  $\psi_{II}$  é construída como uma autofunção do Hamiltoniano de interação

$$H_I \psi_{II} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) \right] \psi_{II} = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 \psi_{II}.$$

Ou seja, isto significa que  $\psi_{II}$  corresponderá a uma autofunção de  $H_I$  com energia  $E_I = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2$  para todos os "quasi-momenta"  $k$ 's que satisfizerem a seguinte equação [2]

$$e^{ikL} = \frac{k + i\frac{2\mu}{\hbar^2}c}{k - i\frac{2\mu}{\hbar^2}c}, \quad (2.11)$$

conhecida como equação do ansatz de Bethe ( $EAB$ ).

Assim, para cada valor do parâmetro de acoplamento " $c$ " nós precisamos determinar o valor do quasi-momento " $k$ " que satisfaz a equação (2.11), para o estado fundamental, para que possamos definir completamente a função de onda  $\psi_{II}$ .

Uma análise cuidadosa da equação (2.11) mostra que os possíveis valores para os quasi-momenta  $k$  dependem do sinal de " $c$ " [7]. Para o caso repulsivo ( $c > 0$ ), somente valores reais para os parâmetros  $k$ 's são soluções das equações do ansatz de Bethe (2.11) no estado fundamental e, portanto, serão os valores utilizados para construir  $\psi_{II}$ . Para o caso atrativo ( $c < 0$ ) os  $k$ 's que compõem o estado fundamental são números puramente imaginários. Por isso nós vamos considerar estes casos separadamente.

Nossa proposta consiste em construir a parte central da nossa função tentativa como uma função de onda que é autofunção do Hamiltoniano do movimento relativo de dois férmions distintos que interagem através de um potencial de contato. Este problema é completamente solúvel e pode ser generalizado para qualquer número de férmions [2, 3, 7]. Note que, na literatura, usualmente se considera o potencial de interação como uma perturbação ao potencial harmônico da armadilha. Nós aqui vamos apresentar um método alternativo utilizando o método do ansatz de Bethe para construir a função tentativa e então usar o princípio variacional para encontrar o estado fundamental do Hamiltoniano completo.

Nas regiões  $I$  e  $III$  o potencial harmônico é o único presente; portanto, a escolha mais simples a ser feita é supor que o sistema deva se comportar seguindo o comportamento assintótico de uma autofunção do Hamiltoniano do oscilador harmônico. Como nós esperamos um rápido decaimento na densidade de probabilidade nessas regiões,  $\psi_I$  e  $\psi_{III}$  têm a forma gaussiana e dependem do parâmetro variacional  $\alpha$ . É importante notar que, embora a função de onda seja contínua para todos os valores de  $x$ , sua derivada primeira não o é. Posteriormente nós vamos considerar a contribuição da descontinuidade da derivada para o valor total da energia do estado fundamental do sistema.

Antes de seguir para a análise dos casos repulsivo e atrativo vamos analisar as condições de continuidade da função de onda nos limites entre as três regiões. A condição de continuidade em todos os intervalos estabelece que

$$\begin{aligned}\psi_I(-L) &= \psi_{II}(-L), \\ \psi_{II}(+L) &= \psi_{III}(+L).\end{aligned}$$

## 2.4 Resultados

### 2.4.1 Interação repulsiva ( $c > 0$ )

Neste caso, somente alguns valores de  $k$ , puramente reais, satisfazem a equação do ansatz de Bethe (2.11) para o estado fundamental. Portanto, nesta seção, nós vamos considerar apenas  $k \in \mathbb{R}$ . Assim, podemos escrever a função de onda como

$$\Psi = \begin{cases} \psi_I = e^{-\alpha(x+L)^2} \psi_{II}(-L) & -\infty < x < -L \\ \psi_{II} = (e^{ikL}e^{-ikx} + e^{ikx})\Theta(x) \\ \quad + (e^{ikL}e^{ikx} + e^{-ikx})\Theta(-x) & -L < x < +L \\ \psi_{III} = e^{-\alpha(x-L)^2} \psi_{II}(+L) & +L < x < +\infty \end{cases}.$$

Com o objetivo de aplicar o princípio variacional, nós inicialmente iremos calcular a normalização da função de onda. Uma vez que

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* \psi_I dx + \int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx + \int_L^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dx\end{aligned}$$

nós obtemos, como demonstrado detalhadamente no *Apêndice C*,

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 2\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)] + \frac{4}{k} [kL + \sin(kL)]. \quad (2.12)$$

De forma análoga nós podemos calcular o valor esperado de energia do sistema no estado  $\psi$ :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (H_{rel} \Psi) dx \\ &= \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel} \psi_I) dx + \int_{-L}^L \psi_{II}^* (H_{rel} \psi_{II}) dx + \int_L^{\infty} \psi_{III}^* (H_{rel} \psi_{III}) dx \end{aligned}$$

Como demonstrado no *Apêndice C*, o resultado do cálculo destas integrais nos dá o valor esperado de energia de  $H_{rel}$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle &= \frac{\hbar^2 \alpha}{\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)] + \frac{2\hbar^2 k^2 L}{\mu} \\ &+ \mu \omega^2 [1 + \cos(kL)] \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} + \frac{L}{\alpha} \right] \\ &+ \frac{\mu \omega^2}{3k^3} [2L^3 k^3 + 3(k^2 L^2 - 1) \sin(kL) + 3kL \cos(kL)]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Na expressão (2.13) nós também consideramos a contribuição de energia dada pela descontinuidade da derivada primeira nos pontos  $x = \pm L$ ,

$$\begin{aligned} &\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} \Psi^* (H_{rel} \Psi) dx + \int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} \Psi^* (H_{rel} \Psi) dx \right] \\ &= -\frac{2\hbar^2 k}{\mu} \sin(kL) \end{aligned}$$

Por construção, somente os valores de  $k$  que satisfazem a equação do ansatz de Bethe (2.11) para o estado fundamental podem ser utilizados. Neste caso repulsivo, a *EAB* pode ser convenientemente reescrita como

$$k = \frac{2}{L} \arctan \left( \frac{2\mu c}{\hbar^2 k} \right), \quad (2.14)$$

que é relativamente simples de resolver, numericamente.

Assim, nós temos todos os ingredientes necessários para realizar a minimização numérica



de  $\frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  com respeito aos parâmetros variacionais  $\alpha$  e  $L$ . Basicamente, para cada valor atribuído ao parâmetro de interação  $c$ , nós varremos todos os valores possíveis para  $\alpha$  e  $L$ , calculando  $k$ , solução da equação (2.14), para cada  $L$ , e estabelecemos os parâmetros críticos  $\alpha^*$  e  $L^*$  tal que  $\frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  apresente o menor valor possível (veja o *Apêndice D* para uma tabela ilustrativa destes resultados). Desta forma nós determinamos a energia para o estado fundamental do sistema de dois férmions como uma função do parâmetro de interação através do princípio variacional, onde a função tentativa é construída através do método do ansatz de Bethe. Este resultado é apresentado na Figura 2.2 usando as variáveis físicas  $\epsilon$  e  $a_{1D}$  (veja a equação (2.18)). Nós daremos maiores detalhes na subseção 2.4.3, onde também vamos comparar este resultado com a solução analítica conhecida [39].

Caso limite: note que no limite  $L \rightarrow 0$ ,  $c \rightarrow 0$  (oscilador harmônico) as expressões (2.13) e (2.12) se reduzem a

$$\lim_{L \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} + \frac{\mu \omega^2}{8\alpha}.$$

Realizando a minimização da energia total em relação ao parâmetro variacional  $\alpha$  no limite  $L \rightarrow 0$ ,

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} + \frac{\mu \omega^2}{8\alpha} \right) \right|_{\alpha=\alpha^*} = 0,$$

encontramos o parâmetro crítico  $\alpha^*$ ,

$$|\alpha^*| = \frac{\mu \omega}{2\hbar},$$

de forma que

$$\lim_{L \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \Big|_{\alpha=\alpha^*} = \frac{1}{2} \hbar \omega,$$

que, como esperado, é a energia do ponto zero do oscilador harmônico simples unidimensional.

## 2.4.2 Interação atrativa ( $c < 0$ )

Neste caso somente valores puramente imaginários de  $k$  satisfazem as equações do ansatz de Bethe (2.11) para o estado fundamental; por essa razão, nós vamos considerar apenas  $k \in \mathbb{C}$ . Por isso, é conveniente definir a variável  $k = ik'$ ,  $k' \in \mathbb{R}$ . Assim

$$\Psi = \begin{cases} \psi_I = e^{-\alpha(x+L)^2} \psi_{II}(-L) & -\infty < x < -L \\ \psi_{II} = (e^{-k'L} e^{k'x} + e^{-k'x}) \Theta(x) \\ \quad + (e^{-k'L} e^{-k'x} + e^{-k'x}) \Theta(-x) & -L < x < +L \\ \psi_{III} = e^{-\alpha(x-L)^2} \psi_{II}(+L) & +L < x < +\infty \end{cases}$$

Em termos de  $k'$ , nós podemos reescrever a equação do ansatz de Bethe (2.11) como

$$e^{-k'L} = \frac{k' + \frac{2\mu}{\hbar^2} c}{k' - \frac{2\mu}{\hbar^2} c}, \quad (2.15)$$

que pode ser resolvida numericamente, por iteração.

Com o objetivo de aplicar o princípio variacional, nós primeiramente calculamos a normalização da função de onda. Da mesma forma que procedemos no caso repulsivo, nós obtemos (detalhes no *Apêndice C*)

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* \psi_I dx + \int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx + \int_L^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dx \\ &= 2e^{-k'L} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cosh(k'L)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{k'} [Lk' + \sinh(k'L)] \right\}. \end{aligned}$$

Calculando o valor esperado de  $H_{rel}$  nós encontramos

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (H_{rel} \Psi) dx \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha}{\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} e^{-k'L} [1 + \cosh(k'L)] \\ &\quad - \frac{2\hbar^2 k'^2 L}{\mu} e^{-k'L} + \frac{\mu \omega^2}{3k'^3} e^{-k'L} [2L^3 k'^3 \\ &\quad + 3(k'^2 L^2 + 1) \sinh(k'L) - 3k'L \cosh(k'L)] \\ &\quad + \mu \omega^2 e^{-k'L} [1 + \cosh(k'L)] \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} + \frac{L}{\alpha} \right], \quad (2.16) \end{aligned}$$

onde novamente nós consideramos a contribuição dada pela descontinuidade da derivada primeira da função de onda nos pontos  $x = \pm L$ ,

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} \Psi^* (H_{rel} \Psi) dx + \int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} \Psi^* (H_{rel} \Psi) dx \right] \\ &= \frac{2\hbar^2 k'}{\mu} e^{-k'L} \sinh(kL), \end{aligned}$$

na expressão (2.16). Note que, por construção, apenas os valores de  $k'$  que satisfazem as equações do ansatz de Bethe (2.15) para o estado fundamental podem ser utilizados.

Da mesma forma como procedemos para o caso repulsivo, nós minimizamos numericamente o valor esperado para a energia do sistema  $\frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  em relação aos parâmetros variacionais  $\alpha$  e  $L$  e determinamos a energia do estado fundamental do sistema como uma função do acoplamento. Este resultado é mostrado na Figura 2.2. Na próxima seção nós faremos uma comparação deste resultado com a solução analítica obtida por Busch [39] (veja também [36]).

Caso limite: note que, novamente, no limite  $L \rightarrow 0$ ,  $c \rightarrow 0$  (oscilador harmônico)

$$\lim_{L \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} + \frac{\mu \omega^2}{8\alpha}. \quad (2.17)$$

Minimizando a energia total do sistema com respeito a  $\alpha$  no limite  $L \rightarrow 0$ , nós obtemos  $|\alpha^*| = \frac{\mu \omega}{2\hbar}$ , tal que novamente nós obtemos a energia para o estado fundamental para o oscilador harmônico.

### 2.4.3 Comparação

Os resultados obtidos nas seções anteriores por meio do ansatz de Bethe e do princípio variacional para encontrar a energia do estado fundamental do sistema de dois férmions em função do parâmetro de acoplamento  $c$  são apresentados na figura (2.2) (linha vermelha). Por conveniência e para comparar com resultados conhecidos, nós definimos as variáveis adimensionais

$$\epsilon = \frac{E_{GS} - \frac{1}{2}\hbar\omega}{\hbar\omega} \quad a_{1D} = -\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}}{2c} \sqrt{\frac{\omega}{\mu}}, \quad (2.18)$$

onde  $\epsilon$  denota a energia do estado fundamental deslocada da energia de ponto zero em unidades de  $\hbar\omega$  e  $a_{1D}$  é o comprimento de onda de espalhamento em uma dimensão.

A solução analítica em coordenadas relativas para um sistema de dois férmions distintos interagindo através de uma função delta e confinados em uma armadilha harmônica foi primeiramente obtida por Busch em [39]. Basicamente, neste trabalho a função de onda para o sistema é construída utilizando como base as funções de onda do oscilador harmônico simples.

Posteriormente, estes resultados foram generalizados para diferentes geometrias de potencial de aprisionamento em [49] entre outros [50, 51, 52, 53, 54]. Essencialmente, as autoenergias do movimento relativo são determinadas implicitamente pela seguinte equação:

$$2a_{1D} = \frac{\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2} + \frac{1}{2}\right)}, \quad (2.19)$$

onde  $\Gamma(x)$  é a função gama.

Esta solução analítica para o estado fundamental está plotada na figura (2.2) (linha pontilhada preta). Nós podemos observar uma excelente concordância entre este resultado e o nosso resultado obtido pela combinação do ansatz de Bethe com o princípio variacional (linha vermelha). Dessa forma, podemos considerar nosso ansatz como um potencial candidato para sistemas compostos por mais do que duas partículas, onde uma solução analítica não existe. Isto será discutido na próxima seção. Podemos observar que o estado fundamental de um sistema formado por dois férmions com spins desemparelhados satisfaz a mesma condição de simetria espacial de um sistema de dois bósons sem spin. Isto porque a função de onda total, que pode ser escrita como o produto de função espacial pela função de spin, deve ser anti-simétrica sob a troca de quaisquer coordenadas. Uma vez que a função de spin é anti-simétrica, a função espacial deve ser simétrica, como no caso de dois bósons sem spin.

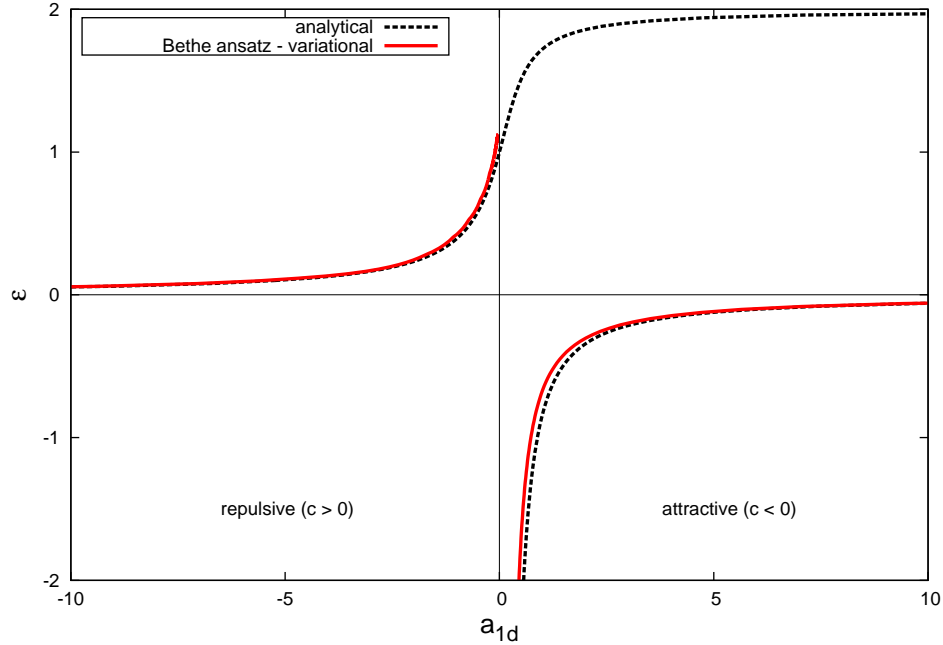


Figura 2.2: Energias do estado fundamental para o movimento relativo de dois férmions distintos interagindo através de um potencial de contato e confinados em uma armadilha harmônica com frequência  $\omega$ . Os níveis de energia obtidos analiticamente (linha pontilhada preta) são comparados com os resultados de energia dados pela combinação do ansatz de Bethe com o princípio variacional (linha vermelha).

## 2.5 Sistema de três partículas interagentes

Vamos agora analisar um sistema com três partículas. Por simplicidade, vamos considerar primeiro um sistema de três bósons, evitando assim a complexidade dos graus adicionais de spin, para testar a viabilidade do ansatz por regiões. Considere três bósons interagentes com massa  $m$  sujeitos a um potencial harmônico axialmente simétrico com frequência  $\omega$ . O Hamiltoniano do sistema é dado por

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) + c\delta(x_2 - x_1) + c\delta(x_3 - x_2) + c\delta(x_3 - x_1) \\
 & + \frac{1}{2}m\omega^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

onde  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  denotam a posição dos três bósons confinados numa armadilha harmônica com frequência  $\omega$ . De maneira análoga ao caso estudado na seção anterior, a descrição das interações de contato entre as partículas pode ser modelada pela função delta. A simetria do modelo permite que façamos uma transformação de coordenadas para o sistema de Jacobi,

definido genericamente como segue [45]

$$R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$r_j = \left( \begin{matrix} j+1 \\ j-1 \end{matrix} \right)^{-\frac{1}{2}} \left( jx_{j+1} - \sum_{k=1}^j x_k \right), \quad j = 1, \dots, N-1 \quad (2.21)$$

Explicitamente, para o caso de três partículas, temos

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{3} (x_1 + x_2 + x_3), \\ r_1 &= x_2 - x_1, \\ r_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} (2x_3 - x_1 - x_2). \end{aligned} \quad (2.22)$$

sendo as transformações inversas dadas por

$$\begin{aligned} x_1 &= R - \frac{r_1}{2} - \frac{r_2}{2\sqrt{3}} \\ x_2 &= R + \frac{r_1}{2} - \frac{r_2}{2\sqrt{3}} \\ x_3 &= R + \frac{r_2}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

Definindo a massa reduzida  $\mu = \frac{m}{2}$  e a massa total  $M = 3m$ , nós podemos separar o Hamiltoniano do sistema em suas contribuições do centro de massa do sistema  $H_{CM}$  e movimento relativo  $H_{REL}$ , de forma que  $H = H_{CM} + H_{rel}$ , sendo

$$\begin{aligned} H_{CM} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 R^2 \\ H_{rel} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right) + c \left[ \delta(r_1) + 2\delta(r_1 + \sqrt{3}r_2) + 2\delta(r_1 - \sqrt{3}r_2) \right] + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (r_1^2 + r_2^2) \end{aligned}$$

Novamente, as autofunções e os autovalores de  $H_{CM}$  são dados pela solução do oscilador harmônico. Por outro lado, o Hamiltoniano do sistema relativo  $H_{rel}$  não possui solução exata. Portanto, vamos concentrar nossa atenção no sistema de coordenadas relativas. Como mostrado na Figura 2.3, neste caso existem 9 regiões relevantes - limitadas através do parâmetro  $L$  - para o comportamento da função de onda tentativa do nosso sistema em coordenadas relativas:

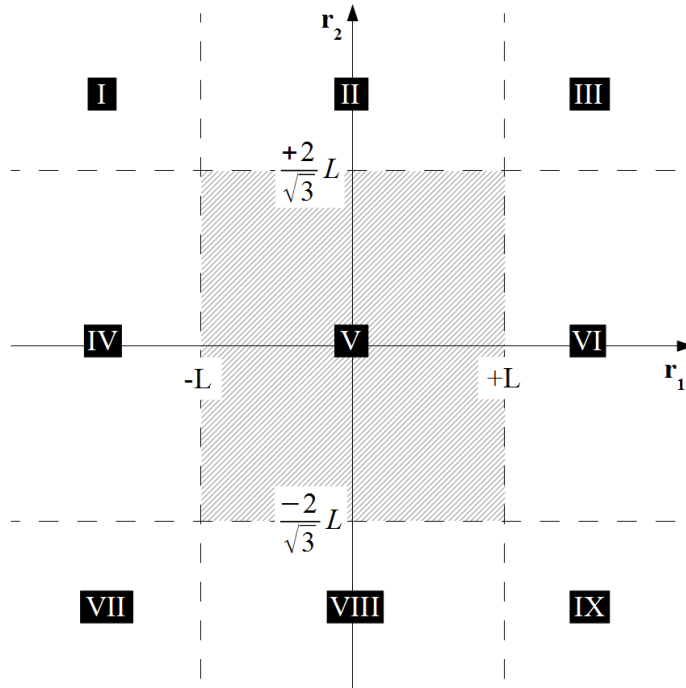


Figura 2.3: Representação esquemática das nove regiões delimitadas pelo parâmetro  $L$ .

Na região V vamos aproximar a função de onda tentativa pela função de onda que descreve um sistema de bósons interagindo por contato, dado pelo ansatz de Bethe

$$\psi_V \sim \psi_B(r_1, r_2)$$

Nós podemos expressar  $\psi_V$  no sistema de coordenadas relativo como<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \psi_V(r_1, r_2) = & i(c + 2ik)(c + ik)^2 e^{\frac{1}{2}ik(r_1 + \sqrt{3}r_2)} + (k - ic)(c + 2ik)(c - ik)e^{ikr_1} \\ & + (k - ic)(c + 2ik)(c - ik) + e^{-\frac{1}{2}ik(r_1 - \sqrt{3}r_2)} + (k + ic)(c + ik)(c - 2ik)e^{-ikr_1} \\ & + (2k + ic)(k + ic)^2 e^{-\frac{1}{2}ik(r_1 + \sqrt{3}r_2)} + (k - ic)(2k + ic)(k + ic) + e^{\frac{1}{2}ik(r_1 - \sqrt{3}r_2)} \end{aligned}$$

onde o parâmetro  $k$  satisfaz a equação (maiores detalhes no *Apêndice A*)

$$e^{ikL} = \frac{k + i\frac{2\mu}{\hbar^2}ck + i\frac{4\mu}{\hbar^2}c}{k - i\frac{2\mu}{\hbar^2}ck - i\frac{4\mu}{\hbar^2}c}.$$

Nas demais regiões podemos supor que o sistema apresenta o comportamento assintótico

<sup>1</sup>Estamos aqui considerando apenas o setor  $x_1 < x_2 < x_3$ ; a função de onda nos outros pode ser obtida por simetria (veja o *Apêndice A*)

de uma autofunção do Hamiltoniano do oscilador harmônico. Como nós esperamos um rápido decaimento na densidade de probabilidade nessas regiões,  $\psi_I, \dots, \psi_{IX}$  têm uma forma gaussiana, isto é,

$$\psi_{\dots, IV, VI, \dots} \sim e^{-\alpha(r_1 \pm L)^2 - \beta\left(r_2 \pm \frac{2}{\sqrt{3}}L\right)^2}$$

Acima, os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  controlam o decaimento exponencial da função de onda. A condição de continuidade em todos os intervalos exige que

$$\begin{aligned} \psi_I\left(r_1, r_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}L\right) &= \psi_{IV}\left(r_1, r_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}L\right), & -\infty < r_1 < -L \\ \psi_I(r_1 = -L, r_2) &= \psi_{II}(r_1 = -L, r_2), & \frac{2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \infty \\ \psi_{II}\left(r_1, r_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}L\right) &= \psi_V\left(r_1, r_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}L\right), & -L < r_1 < L \\ \psi_{II}(r_1 = L, r_2) &= \psi_{III}(r_1 = L, r_2), & \frac{2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \infty \\ \psi_{III}\left(r_1, r_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}L\right) &= \psi_{VI}\left(r_1, r_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}L\right), & L < r_1 < \infty \\ \psi_{VI}(r_1 = L, r_2) &= \psi_V(r_1 = L, r_2), & \frac{-2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \frac{2L}{\sqrt{3}} \\ \psi_{VI}\left(r_1, r_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}L\right) &= \psi_{IX}\left(r_1, r_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}L\right), & L < r_1 < \infty \\ \psi_{IX}(r_1 = L, r_2) &= \psi_{VIII}(r_1 = L, r_2), & -\infty < r_2 < \frac{-2L}{\sqrt{3}} \\ \psi_{VIII}\left(r_1, r_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}L\right) &= \psi_V\left(r_1, r_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}L\right), & -L < r_1 < L \\ \psi_{VIII}(r_1 = -L, r_2) &= \psi_{VII}(r_1 = -L, r_2), & -\infty < r_2 < \frac{-2L}{\sqrt{3}} \\ \psi_{VII}\left(r_1, r_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}L\right) &= \psi_{IV}\left(r_1, r_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}L\right), & -\infty < r_1 < -L \\ \psi_{IV}(r_1 = -L, r_2) &= \psi_V(r_1 = -L, r_2), & \frac{-2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \frac{2L}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$



Assim sendo, nosso ansatz fica

$$\psi(r_1, r_2, \{\alpha, \beta, L\}) = \left\{ \begin{array}{ll} \psi_I = \psi_B\left(-L, \frac{2L}{\sqrt{3}}\right) e^{-\alpha(r_1+L)^2 - \beta\left(r_2 - \frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2} & \begin{array}{l} -\infty < r_1 < -L \\ \frac{2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \infty \end{array} \\ \psi_{II} = \psi_B\left(r_1, \frac{2L}{\sqrt{3}}\right) e^{-\beta\left(r_2 - \frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2} & \begin{array}{l} -L < r_1 < L \\ \frac{2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \infty \end{array} \\ \psi_{III} = \psi_B\left(-L, \frac{2L}{\sqrt{3}}\right) e^{-\alpha(r_1-L)^2 - \beta\left(r_2 - \frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2} & \begin{array}{l} L < r_1 < \infty \\ \frac{2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \infty \end{array} \\ \psi_{IV} = \psi_B(-L, r_2) e^{-\alpha(r_1+L)^2} & \begin{array}{l} -\infty < r_1 < -L \\ \frac{-2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \frac{2L}{\sqrt{3}} \end{array} \\ \psi_V = \psi_B(r_1, r_2) & \begin{array}{l} -L < r_1 < L \\ \frac{-2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \frac{2L}{\sqrt{3}} \end{array} \\ \psi_{VI} = \psi_B(L, r_2) e^{-\alpha(r_1-L)^2} & \begin{array}{l} L < r_1 < \infty \\ \frac{-2L}{\sqrt{3}} < r_2 < \frac{2L}{\sqrt{3}} \end{array} \\ \psi_{VII} = \psi_B\left(-L, \frac{-2L}{\sqrt{3}}\right) e^{-\alpha(r_1+L)^2 - \beta\left(r_2 + \frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2} & \begin{array}{l} -\infty < r_1 < -L \\ -\infty < r_2 < \frac{-2L}{\sqrt{3}} \end{array} \\ \psi_{VIII} = \psi_B\left(r_1, \frac{-2L}{\sqrt{3}}\right) e^{-\beta\left(r_2 + \frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2} & \begin{array}{l} -L < r_1 < L \\ -\infty < r_2 < \frac{-2L}{\sqrt{3}} \end{array} \\ \psi_{IX} = \psi_B\left(-L, \frac{-2L}{\sqrt{3}}\right) e^{-\alpha(r_1-L)^2 - \beta\left(r_2 + \frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2} & \begin{array}{l} L < r_2 < \infty \\ -\infty < r_2 < \frac{-2L}{\sqrt{3}} \end{array} \end{array} \right.$$

## 2.6 Considerações sobre o ansatz por regiões

Embora o desenvolvimento do ansatz por regiões para o caso de três bósons interagentes seja possível e consistente com aquele feito na seção anterior, nós encontramos várias razões para tentar melhorá-lo. O principal motivo é a dificuldade de generalização deste ansatz para sistemas com um número maior de partículas. Basicamente, o número de regiões de interesse cresce à medida que novas coordenadas são adicionadas. Por exemplo, para um sistema composto por quatro partículas nós teríamos que considerar o comportamento da função de

onda em vinte e sete regiões distintas. Embora esta tarefa não apresente nenhum problema conceitual e possa ser executada, não é prática do ponto de vista operacional. A partir de então decidimos alterar a construção do ansatz de modo a torná-lo mais simples e eficiente, com menos regiões e maior flexibilidade, nos levando a formulação do ansatz geométrico, que será abordado no próximo capítulo.

# Capítulo 3

## Ansatz geométrico

### 3.1 Introdução

No capítulo anterior nós desenvolvemos um ansatz, chamado ansatz por regiões, que tinha por objetivo ser uma aproximação razoável para a função de onda que descreve o comportamento de sistemas de poucas partículas confinadas por um potencial harmônico. De fato, foram obtidas boas estimativas para o valor esperado do estado fundamental de energia de um sistema composto por duas partículas ao utilizarmos este ansatz como uma função tentativa combinada com o método variacional. Entretanto, as limitações do ansatz por regiões ficaram evidentes quando tentamos aplicar o desenvolvimento para o caso de três bósons interagentes em um potencial harmônico. Neste capítulo nós vamos apresentar o ansatz geométrico. Não se trata de um ansatz totalmente novo, mas de uma melhoria feita sobre o ansatz por regiões. Após demonstrar o desenvolvimento do ansatz e nossa abordagem variacional de maneira genérica, nós vamos apresentar alguns resultados importantes - como o valor esperado de energia do estado fundamental, a correlação de pares, entre outros, obtidos através do ansatz geométrico para sistemas com dois e três bósons confinados por um potencial harmônico. Encontramos uma concordância excelente dos resultados obtidos através do ansatz geométrico com aqueles disponíveis na literatura, tanto para o caso de dois bósons quanto para o caso de três bósons (considerando o resultado numérico obtido por [43]). É importante destacar que, embora o caso de duas partículas seja bastante simples e tenha sido resolvido no capítulo anterior, nós o incluímos neste capítulo para ilustrar a melhoria na aproximação à energia do estado fundamental devido ao ansatz geométrico em relação ao ansatz por regiões.

Também observamos que, neste capítulo, as derivações foram realizadas no software *Mathematica 9*. Por isto, apresentamos aqui os principais resultados e no *Apêndice E* as principais partes do programa utilizado.

## 3.2 Sistema de $N$ partículas interagentes em um potencial harmônico

Considere um sistema de  $N$  partículas interagentes com massa  $m$  sujeitas a um potencial harmônico axialmente simétrico com frequência  $\omega$ . O Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = \sum_{j=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + c \sum_{j < k} \delta(x_k - x_j) + \frac{1}{2} m \omega^2 x_j^2 \right) \quad (3.1)$$

onde  $c$  representa a intensidade da interação, que pode ser repulsiva ou atrativa, respectivamente para  $c > 0$  ou  $c < 0$ . A presença do termo do potencial harmônico faz com que o Hamiltoniano completo (3.1) não seja exatamente solúvel pelo ansatz de Bethe. Entretanto, se nós considerarmos apenas o Hamiltoniano de interação,

$$H_I = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) + 2c\delta(x_1 - x_3) + 2c\delta(x_2 - x_3)$$

este é exatamente solúvel pelo ansatz de Bethe. Como mencionamos no *Apêndice A*, a função de onda de Bethe é construída como uma combinação de ondas planas. No domínio fundamental  $\chi : x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_N$  esta superposição tem a forma

$$\psi_\chi(x_1, \dots, x_N) = \sum_P A(k_{P_1}, \dots, k_{P_N}) \exp(ik_{P_1}x_1 + \dots + ik_{P_N}x_N) \quad (3.2)$$

onde a soma é feita sobre todas as  $N!$  permutações de  $P$ . Os coeficientes  $A(P)$  são determinados pela relação

$$A(P) = C\epsilon(P) \prod_{j < k} (k_{P_j} - k_{P_k} + ic) \quad (3.3)$$

Em princípio, os quasi-momenta  $k_j$  são determinados pelas equações do ansatz de Bethe. Nós podemos diminuir consideravelmente o número destes utilizando uma hipótese, conhecida como “hipótese de strings” para o estado fundamental, adequada às particularidades do sistema [7]. Foi mostrado em [55] que para o estado fundamental todos os  $k_j$  são ou puramente reais ou puramente imaginários, e formam pares de sinal inverso:

$$k_i = -k_{N-i+1}$$

No caso de um número ímpar de partículas, estas condições são satisfeitas se um dos quasi-momenta for nulo e os demais formarem pares com sinais inversos. Portanto, podemos diminuir o número de quasi-momenta independentes para  $\lfloor N/2 \rfloor$ . A função de onda de

Bethe completa para todos os domínios pode ser determinada a partir da função de onda no domínio fundamental através de considerações sobre a simetria do sistema:

$$\psi_B(x_1, \dots, x_N) = \sum_Q \psi_X(x_{Q_1}, \dots, x_{Q_N}) \Theta(x_{Q_1} < \dots < x_{Q_N}) \quad (3.4)$$

onde a soma sobre  $Q$  é a soma sobre todas as permutações das coordenadas  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , e  $\Theta$  representa a função de Heaviside (maiores detalhes no *Apêndice A*).

A simetria do modelo permite que façamos uma transformação de coordenadas para o sistema de Jacobi [45], que nos permite remover a coordenada do centro de massa e reescrever as coordenadas restantes como um conjunto de coordenadas relativas:

$$R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (3.5)$$

$$r_j = \binom{j+1}{j-1}^{-\frac{1}{2}} \left( jx_{j+1} - \sum_{k=1}^j x_k \right), \quad j = 1, \dots, N-1$$

Nós vamos nos referir ao vetor  $\vec{r} = \{r_1, \dots, r_{N-1}\}$  como o conjunto de coordenadas relativas, enquanto que  $R$  é a coordenada de centro de massa. A transformação inversa é dada por

$$x_j = R + \frac{\text{sgn}(j-1)}{j} \binom{j}{j-2}^{\frac{1}{2}} r_{j-1} - \sum_{k=j}^{N-1} \binom{k+1}{k-1}^{\frac{1}{2}} \frac{1}{k(k+1)} r_k, \quad j = 1, \dots, N \quad (3.6)$$

onde  $\text{sgn}(x)$  é a função sinal, definida como

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x = 0 \\ -1, & x < 0 \end{cases}$$

e  $\binom{a}{b}$  é o binômio de Newton. Sendo a massa reduzida  $\mu = \frac{m}{2}$  e a massa total  $M = Nm$ , nós desacoplamos a contribuição do centro de massa do sistema, de forma que

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 R^2 + \sum_{j=1}^{N-1} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r_j^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r_j^2 \right) + c \sum_j \delta(d_j(\vec{r}))$$

O Hamiltoniano acima é separável em uma contribuição do centro de massa e de outra do sistema relativo. Assim podemos nos concentrar apenas no termo em coordenadas relativas. As funções  $d_j(\vec{r})$  determinam os pontos onde as funções delta atuam no sistema de coordenadas relativas. Pode-se observar que esta função não depende da coordenada  $R$  do centro de massa. Note que o termo em coordenadas relativas possui uma simetria aproximadamente radial, de forma que podemos fazer uma transformação adicional de coordenadas para o sistema de coordenadas hiperesféricas. Neste sistema de coordenadas nós denotaremos a componente radial do sistema como  $\lambda$  e as componentes angulares do sistema como  $\vec{\theta} = \{\theta_1, \dots, \theta_{N-2}\}$ , de forma que, seguindo [45]

$$r_i = \lambda \cos \theta_i \prod_{j=1}^{i-1} \sin \theta_j, \quad i = 1, \dots, N-2$$

$$r_{N-1} = \lambda \prod_{j=1}^{N-2} \sin \theta_j$$

Especificamente, para o caso  $N = 3$ ,

$$r_1 = \lambda \cos \theta_1$$

$$r_2 = \lambda \sin \theta_1$$

onde

$$\lambda = \sqrt{r_1^2 + r_2^2} \quad e \quad \theta_1 = \arctan\left(\frac{r_2}{r_1}\right)$$

Com esta transformação de coordenadas, o Hamiltoniano relativo passa a forma

$$H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \lambda^2 + c \sum_j \delta(d_j(\lambda, \vec{\theta})) \quad (3.7)$$

onde  $\nabla^2$  é o operador laplaciano em coordenadas hiperesféricas. Explicitamente,

$$H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{1}{\lambda^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \lambda^2 + c \sum_j \delta(d_j(\lambda, \vec{\theta}))$$

onde

$$d_1(\lambda, \theta) = \lambda \cos \theta$$

$$d_2(\lambda, \theta) = \lambda (\cos \theta + \sqrt{3} \sin \theta)$$

$$d_3(\lambda, \theta) = \lambda (\cos \theta - \sqrt{3} \sin \theta)$$

Uma vez que o termo de interação delta está presente, este Hamiltoniano não é exatamente solúvel. Assim, nós devemos elaborar, baseados na simetria e comportamento deste Hamiltoniano em casos limites, um ansatz que represente o comportamento da função de onda do sistema.

### 3.3 Ansatz geométrico

Nós observamos que, para pequenos valores de  $\lambda$ , o Hamiltoniano (3.7) é aproximadamente o Hamiltoniano de um sistema de  $N$  partículas que interagem entre si por um potencial de contato, que é exatamente solúvel pelo ansatz de Bethe. Entretanto, para valores suficientemente grandes de  $\lambda$ , o comportamento do Hamiltoniano é dominado pelo termo do oscilador harmônico, e neste limite nós esperamos um decaimento exponencial da função de onda. Portanto, vamos supor que existem apenas duas regiões relevantes para o comportamento da função de onda: uma região *interna*, quanto  $\lambda$  é pequeno e o comportamento do sistema é dominado pela função de Bethe, e outra região *externa*, onde  $\lambda$  é suficientemente grande para que o comportamento do oscilador seja predominante. Para delimitar estas regiões - e, portanto, o comportamento da função de onda - nós vamos introduzir o parâmetro variacional  $\Lambda$ . Assim, nosso ansatz para a função de onda passa a ter a seguinte forma:

$$\Psi(\lambda, \vec{\theta}, \{\vec{\kappa}, \Lambda\}) = \begin{cases} \psi_B(\vec{\kappa}, \lambda, \vec{\theta}) & \lambda < \Lambda \\ A(\vec{\theta}) \exp[-\alpha(\vec{\theta})(\lambda^2 - \Lambda^2)] & \lambda > \Lambda \end{cases} \quad (3.8)$$

Acima,  $\psi_B$  é a função de onda de Bethe completa (3.4) depois das transformações para o sistema de coordenadas de Jacobi e coordenadas hiper-esféricas. O vetor  $\vec{\kappa} = (k_1, k_2, \dots, k_{\lfloor N/2 \rfloor})$  representa um conjunto de parâmetros. A função  $\alpha(\vec{\theta})$  é o parâmetro de decaimento gaussiano, enquanto que  $A(\vec{\theta})$  é uma função a ser determinada. Ambas as funções  $A(\vec{\theta})$  e  $\alpha(\vec{\theta})$  são determinadas pelas condições de continuidade da função de onda e de sua derivada primeira no limite entre as duas regiões:

$$A(\vec{\theta}) = \psi_B(\vec{\kappa}, \Lambda, \vec{\theta}) \quad (3.9)$$

$$\alpha(\vec{\theta}) = -\frac{1}{2\Lambda} \frac{1}{\psi_B(\vec{\kappa}, \Lambda, \vec{\theta})} \left. \frac{\partial \psi_B(\vec{\kappa}, \lambda, \vec{\theta})}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=\Lambda} \quad (3.10)$$

Na Figura 3.1 nós ilustramos de maneira esquemática a densidade de probabilidade obtida

a partir do nosso ansatz para o caso de três bósons no regime repulsivo. É possível ver como as regiões são delimitadas, bem como a estrutura hexagonal das regiões de baixa e alta probabilidade, que reflete a simetria da interação de contato entre pares no caso de três partículas.

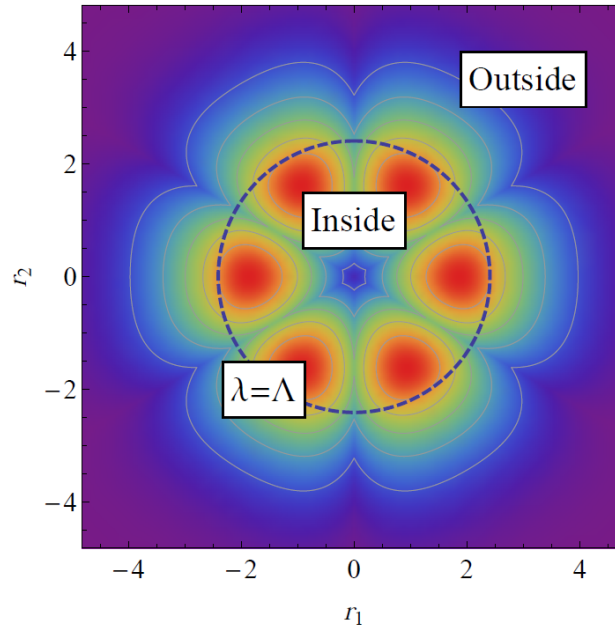


Figura 3.1: Representação esquemática da densidade de probabilidade para o caso de três bósons no regime repulsivo. O parâmetro variacional  $\Lambda$  determina a fronteira entre as duas regiões: interna (Bethe ansatz) e externa (comportamento assintótico do oscilador harmônico). As cores variam do roxo ao vermelho indicando, respectivamente, baixa e alta densidades de probabilidade.

Resumindo, as principais diferenças entre o ansatz por regiões e o ansatz geométrico são as seguintes:

1. Além do fato de trabalharmos apenas com duas regiões, para qualquer número de partículas, flexibilizamos também os  $\{k's\}$ , tornando-os parâmetros variacionais, ao invés de soluções das equações do ansatz de Bethe, como no ansatz por regiões;
2. Já os parâmetros  $\{\alpha's\}$  passam a ser determinados pela condição de continuidade da derivada primeira da função de onda ao invés de serem tratados como parâmetros variacionais. Em ambos os casos, o parâmetro que delimita as diferentes regiões (“L” ou “ $\Lambda$ ”) é tratado como um parâmetro variacional.



### 3.4 Abordagem variacional

Na construção do ansatz geométrico, ambos  $\Lambda$  e  $\vec{\kappa}$  serão tratados como parâmetros variacionais no procedimento de minimização usado para obter o estado fundamental de energia. Ou seja, nós desejamos encontrar os parâmetros críticos  $\Lambda = \Lambda^*$  e  $\vec{\kappa} = \vec{\kappa}^*$  tais que

$$\left. \frac{\partial}{\partial \Lambda} \frac{\langle \psi | H_{REL} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right|_{\Lambda=\Lambda^*} = 0$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial \vec{\kappa}} \frac{\langle \psi | H_{REL} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right|_{\vec{\kappa}=\vec{\kappa}^*} = 0$$

onde

$$\langle \psi | H_{REL} | \psi \rangle = \int d\lambda d\Omega \lambda^{N-2} \psi^* \left( \lambda, \vec{\theta}, \{\vec{\kappa}, \Lambda\} \right) \left[ H_{REL} \psi \left( \lambda, \vec{\theta}, \{\vec{\kappa}, \Lambda\} \right) \right]$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d\lambda d\Omega \lambda^{N-2} \psi^* \left( \lambda, \vec{\theta}, \{\vec{\kappa}, \Lambda\} \right) \psi \left( \lambda, \vec{\theta}, \{\vec{\kappa}, \Lambda\} \right)$$

sendo  $d\Omega$  o diferencial de ângulo sólido. Desta maneira, nós temos todos os ingredientes necessários para determinar o estado fundamental de energia de sistemas de partículas interagentes confinadas por um potencial harmônico através do princípio variacional, onde a função tentativa é construída combinando o ansatz de Bethe e o comportamento assintótico do oscilador harmônico. Estes cálculos foram realizados utilizando o software *Mathematica 9*. Maiores detalhes podem ser obtidos no *Apêndice E*, onde apresentamos as principais partes do programa. No que segue, apresentamos os resultados. Vamos utilizar esta abordagem para os casos de dois e três bósons sem spin, interagentes por contato e confinados por uma armadilha harmônica.

### 3.5 Resultados para $N = 2$ e $N = 3$ bósons

Nesta seção nós vamos apresentar alguns resultados obtidos pela utilização da nossa abordagem baseada no ansatz geométrico para sistemas de dois e três bósons confinados por um potencial harmônico. Não vamos escrever por extenso algumas expressões importantes, como a função de onda e o valor esperado de energia, porque elas são demasiadamente grandes e atrapalhariam a fluidez da leitura. Estes detalhes técnicos podem ser encontrados no *Apêndice E*, junto com a descrição do programa utilizado para obter os valores numéricos e os gráficos.

Na Figura 3.2 nós apresentamos os valores esperados de energia para o estado fundamental

para os sistemas com  $N = 2$  e  $N = 3$  bósons obtidos através de nossa abordagem variacional utilizando o ansatz geométrico. Observa-se excelente concordância entre os valores obtidos e aqueles previamente encontrados na literatura, seja a solução analítica para o caso  $N = 2$  [39, 49], seja por métodos numéricos alternativos para o regime repulsivo do caso  $N = 3$ . Para ilustrar a melhoria do ansatz geométrico em relação ao ansatz por regiões, apresentamos a Figura 3.3 abaixo com as variáveis utilizadas no capítulo anterior para melhor comparação.

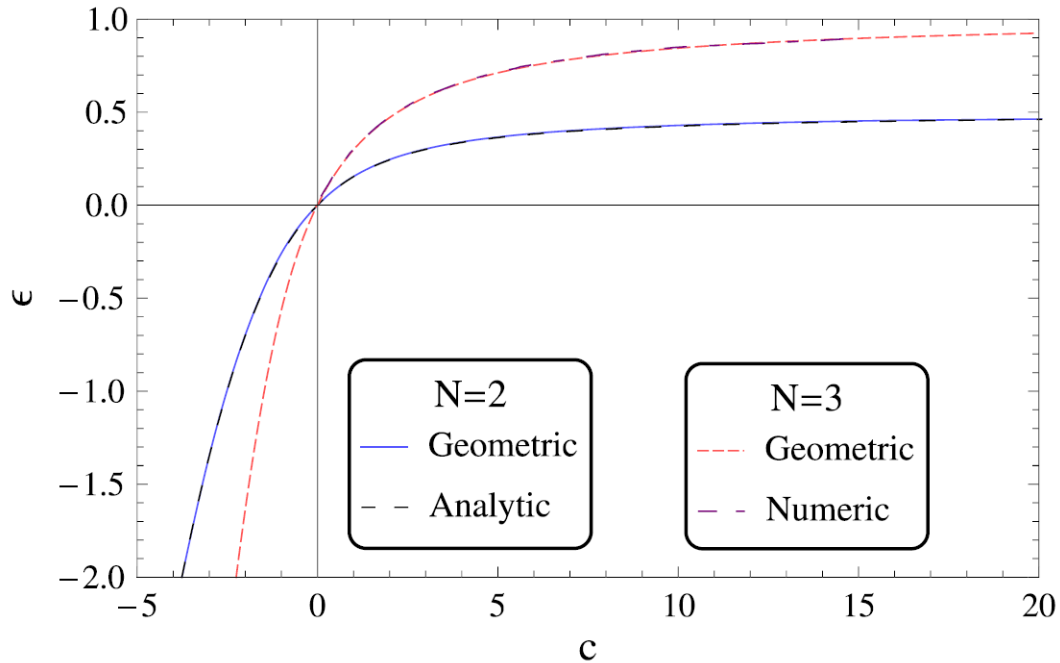


Figura 3.2: Energia do estado fundamental  $\epsilon = \frac{E_n}{N\hbar\omega} - \frac{1}{2}$  como função do parâmetro de interação  $c$  para diferentes números de bósons. O caso  $N = 2$  coincide com o resultado analítico [39, 49] em todos os regimes, e o caso  $N = 3$  concorda com os resultados publicados no regime repulsivo [43].

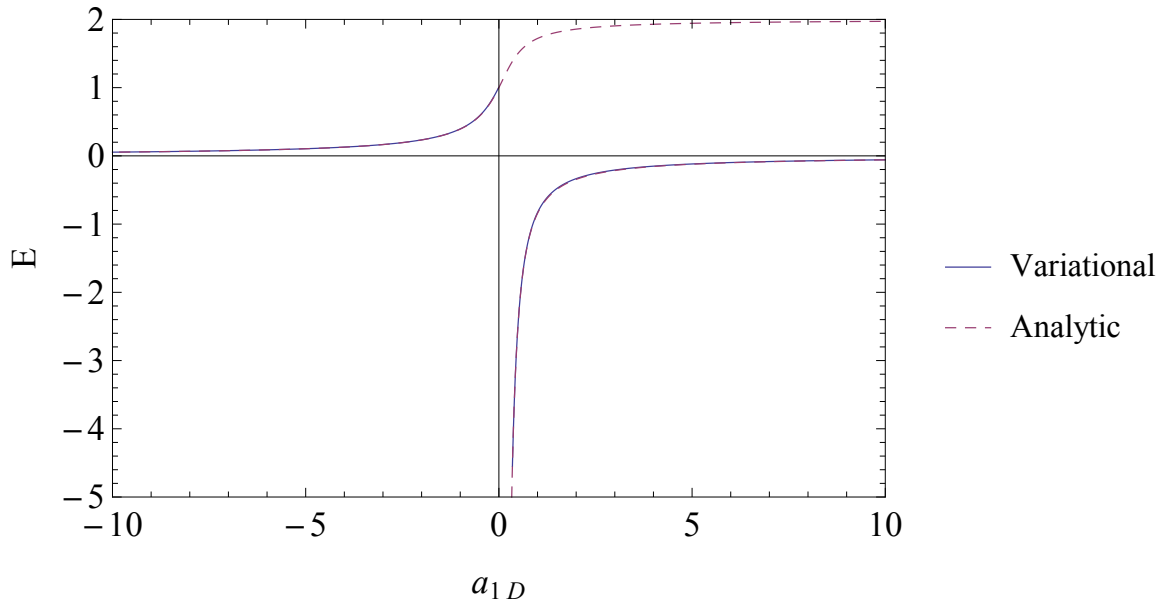


Figura 3.3: Energia do estado fundamendo para o movimento relativo de duas partículas como função do parâmetro de interação  $a_{1D}$  para o caso  $N = 2$ . Há uma clara melhoria em relação à aproximação feita através do ansatz por regiões (compare com a Figura 2.2).

Nas figuras 3.4 e 3.5 nós apresentamos a densidade de probabilidade de dois e três bósons, respectivamente, para diferentes valores do parâmetro de acoplamento  $c$ , considerando ambos os regimes atrativo e repulsivo. Uma comparação com o resultado analítico para dois bósons também é mostrada na Figura 3.4. Nós observamos que o ansatz geométrico apresenta boa concordância com a função de onda exata. No caso atrativo nosso ansatz subestima levemente o máximo da densidade de probabilidade, enquanto que no caso repulsivo o ansatz representa adequadamente o comportamento da função de onda próxima aos pontos de contato e nas regiões assintóticas, uma vez que estas são as regiões onde as contribuições para a energia são dominantes, enquanto subestima levemente a função de onda na região intermediária do acoplamento.

Para duas partículas no caso atrativo, a densidade de probabilidade do movimento relativo exibe um máximo no ponto  $r_1 = 0$  que aumenta e se torna mais localizado à medida que os valores de  $|c|$  tornam-se maiores. Similarmente, no caso de três bósons com interação atrativa, um pico mais localizado na densidade de probabilidade é observado com o aumento de  $|c|$ . Para o caso repulsivo, uma cúspide emerge ao aumentar-se a repulsão no caso  $N = 2$  e um decréscimo na densidade de probabilidade ao longo dos planos definidos pelos pontos onde  $x_i - x_j = 0$ , para  $i \neq j$ , pode ser observado. Claramente, nosso ansatz captura os aspectos mais relevantes a respeito das propriedades físicas do sistema estudado: no caso repulsivo, a tendência das partículas se repelirem e então estarem afastadas uma das outras à medida que

a força de interação  $c$  aumenta; enquanto que no caso atrativo a tendência de agregamento das partículas, que aumenta a medida que aumentamos os valores de  $|c|$ .

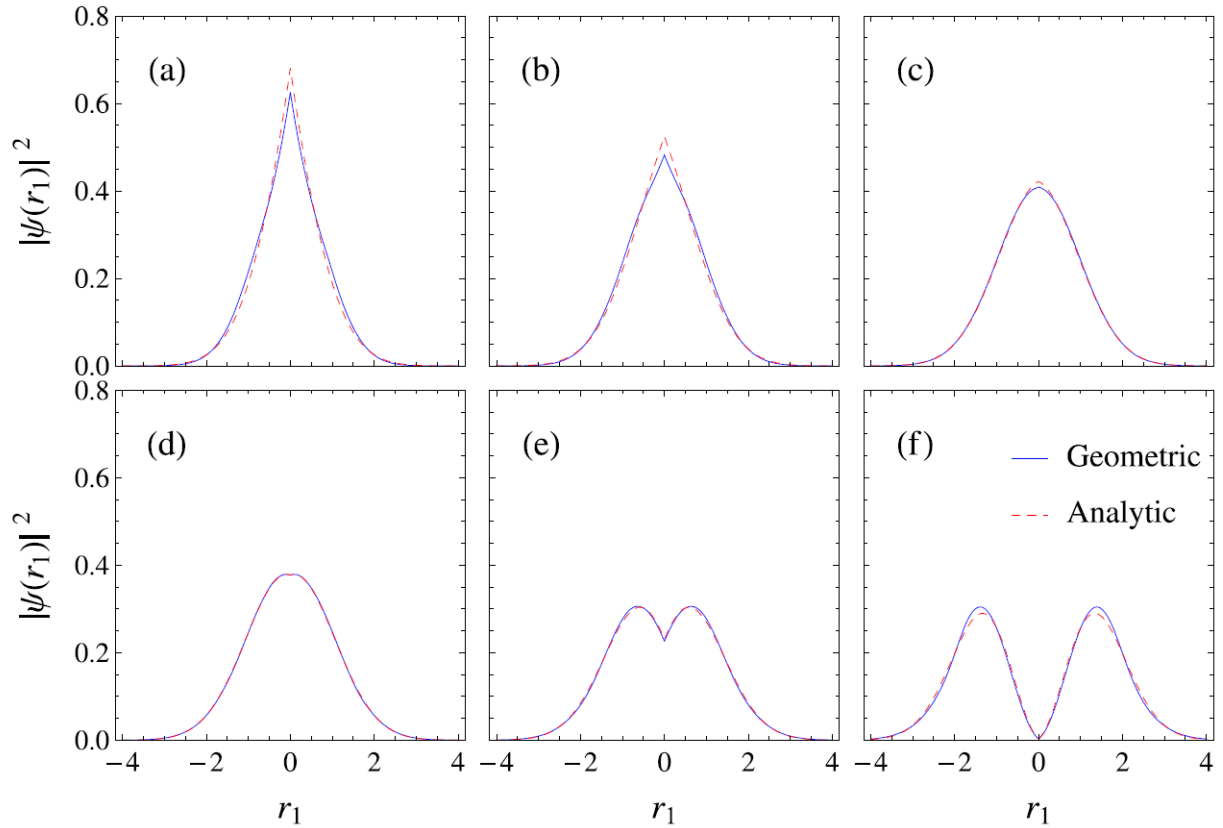


Figura 3.4: Densidade de probabilidade para o caso de dois bósons e diferentes valores da constante de acoplamento para (a)  $c = -1$ , (b)  $c = -0.5$ , (c)  $c = -0.1$ , (d)  $c = 0.1$ , (e)  $c = 1$ , (f)  $c = 20$ .

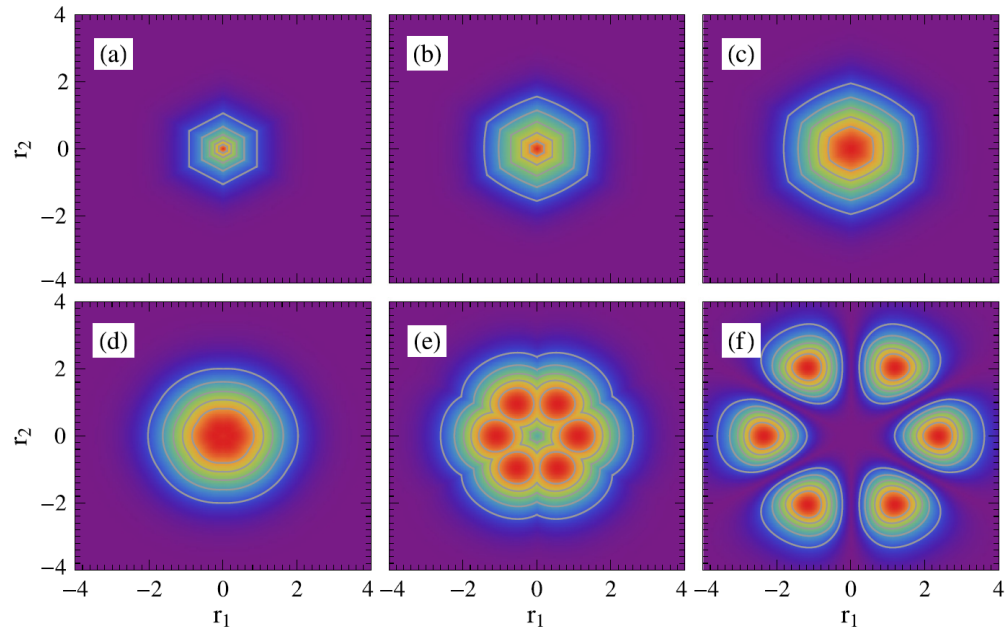


Figura 3.5: Densidade de probabilidade no sistema de coordenadas de Jacobi para o caso de três bósons e diferentes valores da constante de acoplamento (a)  $c = -1$ , (b)  $c = -0.5$ , (c)  $c = -0.1$ , (d)  $c = 0.1$ , (e)  $c = 1$ , (f)  $c = 20$ . As cores variam do roxo ao vermelho indicando, respectivamente, baixos e altos valores de densidade de probabilidade.

Nas figuras 3.6 e 3.7 nós plotamos a função de correlação de pares  $\rho_2(x_1, x_2)$  [42] e a densidade de uma partícula normalizada  $\rho_1(x_1)$  obtida pela integração sobre todas as coordenadas exceto duas e uma, respectivamente [56]. Para o caso  $N = 2$ ,  $\rho_2(x_1, x_2)$  dá a densidade de probabilidade como uma função das posições  $x_i$  das partículas, enquanto que no caso  $N = 3$  ela fornece a densidade de probabilidade de dois corpos.

Nós observamos que no caso atrativo a correlação de pares colapsa para a energia do estado fundamental de uma única partícula com massa  $Nm$ , enquanto que no caso repulsivo as partículas tendem a se repelir e distribuir-se ao longo da armadilha. No regime de forte repulsão as densidades se separam em diferentes pólos separados pelo plano  $x_1 - x_2 = 0$ , como esperado devido à repulsão entre as partículas. Estes resultados fornecem um esquema para comparação direta com os perfis de densidade que podem, em princípio, ser obtidos experimentalmente.

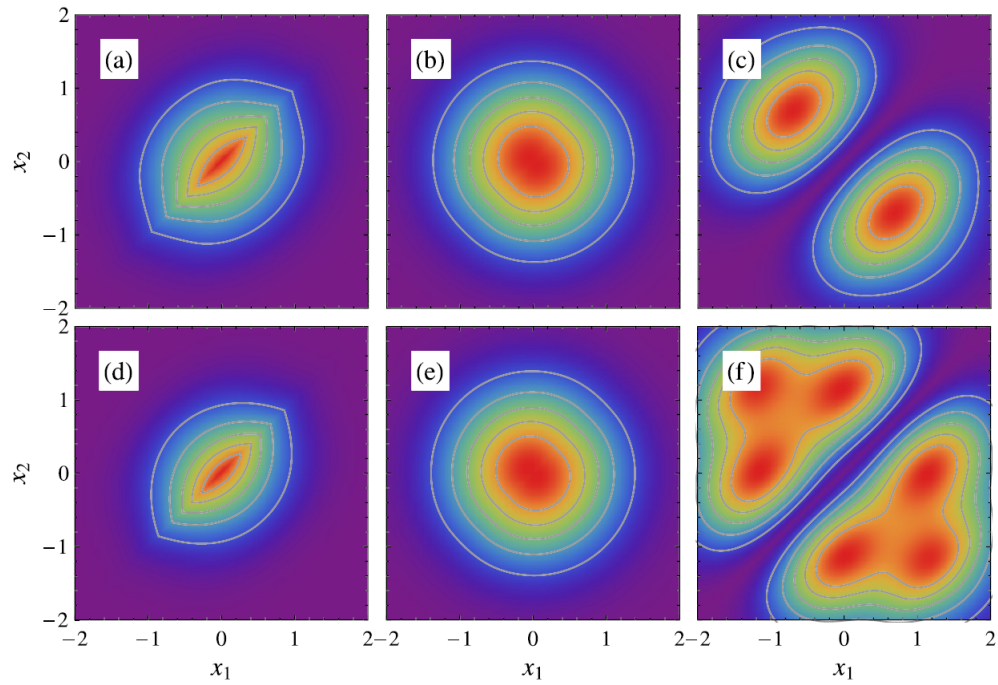


Figura 3.6: Função de correlação de pares  $\rho_2(x_1, x_2)$  para o caso de dois bósons (linha superior) para diferentes valores da constante de acoplamento (a)  $c = -5$ , (b)  $c = 0.1$ , (c)  $c = 20$  e para o caso de três bósons (linha inferior) para (d)  $c = -5$ , (e)  $c = 0.1$ , (f)  $c = 20$ . As cores variam do roxo ao vermelho indicando, respectivamente, baixos e altos valores da correlação de pares.

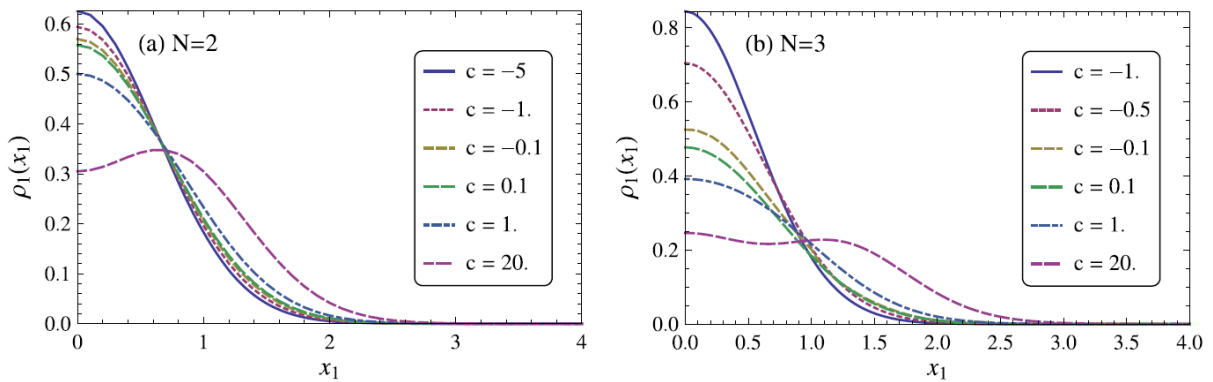


Figura 3.7: Densidade de uma partícula normalizada  $\rho_1(x_1)$  como uma função da posição  $x_1$  para diferentes valores do acoplamento  $c$ , para ambos os regimes atrativo e repulsivo para (a) dois bósons e (b) três bósons.

### 3.6 Conclusões

Neste capítulo apresentamos uma função de onda geométrica que foi construída utilizando a solução exata do modelo de bósons interagentes através de um potencial de contato combinado com uma função que descreve o comportamento assintótico do oscilador harmônico. Esta combinação envolve somente duas regiões: uma região interna, onde o sistema é descrito pela solução exata do modelo de bósons interagentes dada pela função de onda de Bethe, e uma região externa, onde o comportamento do oscilador harmônico é dominante. Além do fato de trabalharmos apenas com duas regiões, para qualquer número de partículas, flexibilizamos também os  $\{k's\}$ , tornando-os parâmetros variacionais, ao invés de soluções das equações do ansatz de Bethe, como no ansatz por regiões. Utilizando este ansatz como uma função de onda tentativa no método variacional, nós obtivemos formidável concordância com os valores do estado fundamental de energia encontrados na literatura para sistemas unidimensionais de dois e três bósons interagentes confinados por um potencial harmônico. Além disso, o ansatz captura as características físicas fundamentais do sistema, como a tendência das partículas se agrupar no caso atrativo e de se repelir, afastando-se umas das outras no caso repulsivo. É importante destacar que o ansatz geométrico é válido para ambos os regimes atrativo e repulsivo. Em princípio, nossa proposta pode ser adaptada a diferentes cenários, como por exemplo: diferentes geometrias do potencial de confinamento, sistemas de bósons com spin e sistemas fermiônicos, além de sistemas mistos, compostos por bósons e férmions.

Embora não haja nenhum problema conceitual em estender nossa abordagem baseada no ansatz geométrico para um número maior de partículas, existem algumas dificuldades numéricas. Na medida em que nós aumentamos o número de partículas  $N$ , o número de termos presentes na função de onda de Bethe escala com  $N!$ . Além disso, temos mais parâmetros variacionais, bem como mais integrais a serem realizadas. As integrações na coordenada radial podem ser feitas analiticamente, mas as  $N - 2$  integrações da parte angular devem ser calculadas numericamente. Os cálculos numéricos consomem bastante tempo para sua realização. Portanto, a generalização para  $N$  maiores é um problema essencialmente numérico, que pode, em princípio, ser resolvido com algum esforço e tempo.

Uma possibilidade para contornar esta dificuldade consiste em substituir a função de onda do ansatz de Bethe na região interna por uma função do tipo Jastrow, que é contruída como um produto das funções de onda de Bethe de duas partículas,  $\psi_{ij}$ , isto é [57]

$$\Psi_J^\nu = C \prod_{i < j}^P (\psi_{ij})^\nu.$$

Esta é um importante simplificação, especialmente para  $N$  grandes, onde o ansatz de Jastrow

escala proporcionalmente com o número de pares  $\frac{N(N-1)}{2}$ .



# Capítulo 4

## Conclusões

Neste trabalho nós desenvolvemos uma nova abordagem para aproximar o valor do estado fundamental de energia de alguns sistemas de poucas partículas interagentes confinadas por um potencial harmônico unidimensional. Nós utilizamos o princípio variacional combinado com uma função de onda tentativa cuidadosamente construída para refletir as principais características dos sistemas estudados. Nossa metodologia para a construção da função de onda tentativa consistiu em explorar a solução exata do sistema unidimensional de partículas interagentes por meio de um potencial de contato, obtida pelo método do ansatz de Bethe. Usualmente, na literatura, é seguido um caminho diferente do que adotamos, ao se considerar o potencial harmônico mais relevante e o potencial de interação como uma perturbação. Mas, uma vez que as interações são do tipo delta, nós dispomos do método do ansatz de Bethe. Então, basicamente, nós consideramos a função de onda do modelo exatamente solúvel como a parte central da função de onda tentativa para o método variacional e a complementamos com o conhecimento que se tem sobre o comportamento assintótico do oscilador harmônico.

Nós começamos desenvolvendo o ansatz por regiões para analisar um sistema composto por duas partículas interagentes. Nós encontramos boa concordância entre os valores obtidos para o estado fundamental de energia deste sistema através da nossa abordagem com aqueles dados pela solução analítica existente. Além disso, o ansatz por regiões é válido em ambos os regimes atrativo e repulsivo. Entretanto, ao tratar um sistema composto por três partículas, nós encontramos algumas dificuldades operacionais que nos obrigaram a alterar a construção do ansatz para torná-lo mais simples e eficiente. Desta forma construímos o ansatz geométrico, uma função de onda tentativa que possui apenas duas regiões independentemente do número de partículas que compõe o sistema: uma região interna, onde a função de onda é descrita pela solução exata dada pelo ansatz de Bethe ao problema de partículas interagentes em uma dimensão, e uma região externa, cujo comportamento é dominado pelo limite assintótico do oscilador harmônico. Nós ressaltamos que este ansatz geométrico, que utiliza-

mos como uma função variacional, captura naturalmente a física essencial do problema e nos permitiu obter excelente concordância com os resultados numéricos existentes para o caso de três bósons e, no caso de dois bósons, com o resultado analítico. Notavelmente, o ansatz é válido nos regimes atrativo e repulsivo. Outras informações relevantes sobre os sistemas, como a distribuição de probabilidades e as funções de correlação de pares, foram facilmente obtidas através do nosso ansatz.

A boa concordância entre nossos resultados e os resultados analíticos e numéricos existentes demonstra que o ansatz geométrico satisfaz nossa expectativa e pode ser potencialmente aplicado no estudo de diversos sistemas de poucos corpos na mecânica quântica. Usando os métodos estabelecidos neste trabalho, em princípio, é possível estender nossa análise para sistemas mais complexos como, por exemplo, para o problema de três férmions confinados num potencial harmônico, que é um experimento em curso atualmente [41].

Como comentamos nas conclusões do capítulo 3, as principais dificuldades encontradas pelo ansatz geométrico para tratar sistemas com um número maior de partículas são de natureza numérica: aumentando o número de partículas, o número de termos presentes na função de onda de Bethe aumenta consideravelmente e o número de parâmetros variacionais também, tornando o processo bastante demorado. Uma possibilidade para contornar esta dificuldade consiste em substituir a função de onda do ansatz de Bethe na região interna por uma função mais simples, contruída como um produto das funções de onda de Bethe de duas partículas, como realizado recentemente em [57]. Neste trabalho os autores utilizam um ansatz do tipo Jastrow-variacional para obter informações físicas importantes sobre sistemas unidimensionais de partículas cuja força de interação não é a mesma para todos os pares. Em princípio, uma função tentativa do tipo Jastrow poderia ser combinada com o ansatz geométrico para estudar sistemas de poucas partículas interagentes em um potencial harmônico unidimensional.

# Apêndice A

## Ansatz de Bethe

### A.1 Introdução

Neste apêndice nós vamos apresentar os principais aspectos do método do ansatz de Bethe coordenado para o tratamento de sistemas de gases quânticos interagentes. Nós vamos utilizar o modelo de um gás de bósons interagentes sem spin para ilustrar o procedimento. Este modelo foi resolvido exatamente por Lieb e Liniger em [9] utilizando o conceito do ansatz de Bethe coordenado. Nós utilizamos como bibliografia básica para este apêndice os trabalhos de [7].

O primeiro passo consiste em identificar possíveis candidatos para a função de onda. Em uma dimensão, a conservação da energia e do momentum implica que, quando há espalhamento entre duas partículas idênticas, elas somente podem manter seu momentum ou então trocá-lo. Portanto, o único efeito da interação pode ser a adição de uma mudança de fase na função de onda.

Uma vez que o efeito da interação está restrito à mudança de fase, um ansatz para a função de onda pode ser construído em termos de uma superposição de alguns modos de onda plana com quasi-momenta desconhecidos. Forçando este ansatz com coeficientes indeterminados a satisfazer as condições de continuidade da função de onda e a equação de autovalores  $H\Psi = E\Psi$  nós obtemos as equações de consistência conhecidas como equações do ansatz de Bethe.

Posteriormente, nós aplicamos condições de contorno periódicas para encontrar relações entre os coeficientes. Note que outras condições de contorno podem ser utilizadas [58].

Após todos estes procedimentos, para um sistema de  $N$  partículas nós teremos um conjunto de  $N$  equações algébricas acopladas com  $N$  quasi-momenta desconhecidos e dependentes de  $N$  parâmetros. A solução destas equações fornece as autofunções do modelo. Uma delas, em particular, fornece o estado fundamental de energia do sistema.

Em resumo, o problema de resolver o problema da equação de Schroedinger é reduzido pelo ansatz de Bethe a resolver um conjunto de equações algébricas. Nós vamos ilustrar como funciona o ansatz de Bethe para um modelo específico de interesse desta tese, o modelo de Lieb-Liniger. Outros modelos podem ser tratados de forma semelhante, levando em conta as particularidades do caso.

## A.2 Modelo de Lieb-Liniger

O modelo do gás de bósons interagentes em uma dimensão, também conhecido como modelo de Lieb-Liniger, é definido pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j)$$

onde  $x_i$  são as coordenadas das  $N$  partículas e  $c$  é o parâmetro de interação. Fisicamente, este é um modelo bastante realístico para partículas em uma dimensão com interações de curto alcance e constitui uma poderosa ferramenta analítica para interpretar resultados experimentais.

## A.3 Problema de 2 partículas

Vamos começar considerando dois bósons sem spin interagindo por contato

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2)$$

onde  $c$  é a força da interação (atrativa se  $c < 0$  e repulsiva se  $c > 0$ ). Vamos escrever um autoestado genérico dividindo o sistema nas regiões  $x_1 < x_2$  e  $x_1 > x_2$ :

$$\Psi = \psi(x_1, x_2) \Theta(x_2 - x_1) + \psi(x_2, x_1) \Theta(x_1 - x_2)$$

Observe que esta função de onda é simétrica em relação à permutação  $x_1 \leftrightarrow x_2$  (simetria bosônica). A função de Heaviside  $\Theta(x)$  é definida como

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \\ \frac{1}{2}, & x = 0 \end{cases}$$

Nós assumimos uma superposição de ondas planas, isto é,

$$\psi(x_1, x_2) = A(12) e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + A(21) e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}$$

Ao resolver a equação de autovalores  $H\Psi = E\Psi$  nós encontramos

$$H\Psi = \underbrace{(k_1^2 + k_2^2)\Psi}_{\text{autovalores}} + \underbrace{2\delta(x_1 - x_2) \{i(k_1 - k_2) [A(21) - A(12)] + c[A(12) + A(21)]\}}_{\text{termos indesejados}} e^{i(k_1 + k_2)x_1}$$

A equação de autovalores é satisfeita se for exigido que os termos indesejados sejam nulos, ou seja,

$$i(k_1 - k_2) [A(21) - A(12)] + c[A(12) + A(21)] = 0$$

A equação acima pode ser reescrita como

$$\frac{A(12)}{A(21)} = \frac{k_1 - k_2 + ic}{k_1 - k_2 - ic} \quad (\text{A.1})$$

Aplicando as condições de contorno periódicas no intervalo  $[0, L]$ ,

$$\psi(x_i) = \psi(x_i + L)$$

nós encontramos

$$\begin{aligned} A(12) &= A(21) e^{ik_1 L} \\ A(21) &= A(12) e^{ik_2 L} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Combinando os resultados (A.1) e (A.2) nós obtemos as equações do ansatz de Bethe para os quasi-momenta  $k_1$  e  $k_2$ :

$$\begin{aligned} e^{ik_1 L} &= \frac{k_1 - k_2 + ic}{k_1 - k_2 - ic}, \\ e^{ik_2 L} &= \frac{k_2 - k_1 + ic}{k_2 - k_1 - ic}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

## A.4 Problema de $N$ partículas

Seguindo a mesma linha de raciocínio desenvolvida na seção anterior, nós vamos tratar um sistema de  $N$  bósons com condições de contorno periódicas. Considere a região  $\chi$

que representa uma permutação particular do ordenamento das partículas, por exemplo  $\chi : x_1 < x_2 < \dots < x_N$ . Podemos escrever a função de onda nessa região como

$$\psi_\chi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P A(P|\chi) e^{i(k_{P_1}x_1 + \dots + k_{P_N}x_N)} \quad (\text{A.4})$$

$P$  é uma permutação dos quasi-momenta. Para ilustrar, apresentamos abaixo a função de onda nesta região para o caso de três partículas:

$$\begin{aligned} \psi_{x_1 < x_2 < x_3}(x_1, x_2, x_3) &= A(123|123) e^{i(k_1x_1 + k_2x_2 + k_3x_3)} + A(132|123) e^{i(k_1x_1 + k_3x_2 + k_2x_3)} \\ &+ A(213|123) e^{i(k_2x_1 + k_1x_2 + k_3x_3)} + A(231|123) e^{i(k_2x_1 + k_3x_2 + k_1x_3)} \\ &+ A(312|123) e^{i(k_3x_1 + k_21x_2 + k_2x_3)} + A(321|123) e^{i(k_3x_1 + k_2x_2 + k_1x_3)}. \end{aligned}$$

A função de onda de Bethe completa para todos os domínios é escrita considerando todas as  $N!$  regiões possíveis:

$$\psi_B(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_Q \psi_\chi(x_{Q_1}, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N}) \Theta(x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N})$$

onde a soma sobre  $Q$  é realizada sobre todas as permutações possíveis das coordenadas  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  e  $\Theta(x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N}) = \Theta(x_{Q_N} - x_{Q_{N-1}}) \Theta(x_{Q_{N-1}} - x_{Q_{N-2}}) \dots \Theta(x_{Q_2} - x_{Q_1})$ .

Considere dois termos da função de onda de Bethe completa para um sistema de  $N$  partículas:

$$\begin{aligned} \psi_B(\dots, x_r, x_s, \dots) &= \dots \\ &[\dots + A(\dots rs\dots|\dots rs\dots) e^{i(\dots + k_r x_r + k_s x_s)} + \dots \\ &+ A(\dots sr\dots|\dots rs\dots) e^{i(\dots + k_s x_r + k_r x_s)} + \dots] \Theta(\dots < x_r < x_s < \dots) + \\ &[\dots + A(\dots rs\dots|\dots sr\dots) e^{i(\dots + k_r x_s + k_s x_r)} + \dots \\ &+ A(\dots sr\dots|\dots sr\dots) e^{i(\dots + k_s x_s + k_r x_r)} + \dots] \Theta(\dots < x_s < x_r < \dots) + \\ &\dots \end{aligned}$$

Fazendo a permutação  $x_r \leftrightarrow x_s$  temos

$$\begin{aligned}
 \psi_B(\dots, x_s, x_r, \dots) = & \dots \\
 & [\dots + A(\dots rs\dots|\dots rs\dots) e^{i(\dots+k_r x_s+k_s x_r)} + \dots \\
 & + A(\dots sr\dots|\dots rs\dots) e^{i(\dots+k_s x_s+k_r x_r)} + \dots] \Theta(\dots < x_s < x_r < \dots) + \\
 & [\dots + A(\dots rs\dots|\dots sr\dots) e^{i(\dots+k_r x_r+k_s x_s)} + \dots \\
 & + A(\dots sr\dots|\dots sr\dots) e^{i(\dots+k_s x_r+k_r x_s)} + \dots] \Theta(\dots < x_r < x_s < \dots) + \\
 & \dots
 \end{aligned}$$

Um vez que a função de onda é bosônica, uma permutação na ordem de quaisquer duas partículas deve manter a função de onda inalterada:

$$\psi_B(\dots, x_r, x_s, \dots) = \psi_B(\dots, x_s, x_r, \dots)$$

Por inspeção, concluímos que a simetria da função de onda é satisfeita se

$$A(\dots rs\dots|\dots rs\dots) = A(\dots rs\dots|\dots sr\dots)$$

Portanto, as constantes  $A$  não dependem do setor em que estamos trabalhando. Por isso nós podemos nos concentrar no setor  $\chi : x_1 < x_2 < \dots < x_N$  e resolver o sistema neste setor. Caso for necessário considerar um setor diferente desta, sabemos que é possível gerar a função de onda pela correspondente permutação dos quasi-momenta. Por isso, a partir de agora, vamos omitir a dependência explícita da permutação de coordenadas  $\chi$ , compreendendo que nós estamos trabalhando em um dado setor e que os demais podem ser obtidos por simetria.

Podemos escrever a função de onda de Bethe completa para o sistema de três partículas como

$$\begin{aligned}
 \Psi_B(x_1, x_2, x_3) = & \\
 & [A(123) e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)} + A(132) e^{i(k_1 x_1 + k_3 x_2 + k_2 x_3)} \\
 & + A(213) e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2 + k_3 x_3)} + A(231) e^{i(k_2 x_1 + k_3 x_2 + k_1 x_3)} \\
 & + A(312) e^{i(k_3 x_1 + k_1 x_2 + k_2 x_3)} + A(321) e^{i(k_3 x_1 + k_2 x_2 + k_1 x_3)}] \Theta(x_1 < x_2 < x_3) \\
 & + [A(123) e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_3 + k_3 x_2)} + A(132) e^{i(k_1 x_1 + k_3 x_3 + k_2 x_2)} \\
 & + A(213) e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_3 + k_3 x_2)} + A(231) e^{i(k_2 x_1 + k_3 x_3 + k_1 x_2)} \\
 & + A(312) e^{i(k_3 x_1 + k_1 x_3 + k_2 x_2)} + A(321) e^{i(k_3 x_1 + k_2 x_3 + k_1 x_2)}] \Theta(x_1 < x_3 < x_2) \\
 & + [A(123) e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1 + k_3 x_3)} + A(132) e^{i(k_1 x_2 + k_3 x_1 + k_2 x_3)} \\
 & + A(213) e^{i(k_2 x_2 + k_1 x_1 + k_3 x_3)} + A(231) e^{i(k_2 x_2 + k_3 x_1 + k_1 x_3)} \\
 & + A(312) e^{i(k_3 x_2 + k_1 x_1 + k_2 x_3)} + A(321) e^{i(k_3 x_2 + k_2 x_1 + k_1 x_3)}] \Theta(x_2 < x_1 < x_3) \\
 & + [A(123) e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_3 + k_3 x_1)} + A(132) e^{i(k_1 x_2 + k_3 x_3 + k_2 x_1)} \\
 & + A(213) e^{i(k_2 x_2 + k_1 x_3 + k_3 x_1)} + A(231) e^{i(k_2 x_2 + k_3 x_3 + k_1 x_1)} \\
 & + A(312) e^{i(k_3 x_2 + k_1 x_3 + k_2 x_1)} + A(321) e^{i(k_3 x_2 + k_2 x_3 + k_1 x_1)}] \Theta(x_2 < x_3 < x_1) \\
 & + [A(123) e^{i(k_1 x_3 + k_2 x_1 + k_3 x_2)} + A(132) e^{i(k_1 x_3 + k_3 x_1 + k_2 x_2)} \\
 & + A(213) e^{i(k_2 x_3 + k_1 x_1 + k_3 x_2)} + A(231) e^{i(k_2 x_3 + k_3 x_1 + k_1 x_2)} \\
 & + A(312) e^{i(k_3 x_3 + k_1 x_1 + k_2 x_2)} + A(321) e^{i(k_3 x_3 + k_2 x_1 + k_1 x_2)}] \Theta(x_3 < x_1 < x_2) \\
 & + [A(123) e^{i(k_1 x_3 + k_2 x_2 + k_3 x_1)} + A(132) e^{i(k_1 x_3 + k_3 x_2 + k_2 x_1)} \\
 & + A(213) e^{i(k_2 x_3 + k_1 x_2 + k_3 x_1)} + A(231) e^{i(k_2 x_3 + k_3 x_2 + k_1 x_1)} \\
 & + A(312) e^{i(k_3 x_3 + k_1 x_2 + k_2 x_1)} + A(321) e^{i(k_3 x_3 + k_2 x_2 + k_1 x_1)}] \Theta(x_3 < x_2 < x_1)
 \end{aligned}$$

Todas as permutações possíveis dos quasi-momenta podem ser geradas pela troca sucessiva de dois índices de cada vez. Isto é equivalente ao espalhamento de duas partículas considerado na seção anterior. Se  $P'$  difere de  $P$  unicamente pela permutação de dois índices, então a generalização da relação (A.1) nos diz que

$$\frac{A(P)}{A(P')} = \frac{A(\dots rs\dots)}{A(\dots sr\dots)} = \frac{k_r - k_s + ic}{k_r - k_s - ic} \quad (\text{A.5})$$



## Condições de contorno periódicas

Considere novamente dois termos da função de onda de Bethe completa para um sistema de  $N$  partículas:

$$\begin{aligned}
 \psi_B(\dots, x_r, x_s, \dots) = & \dots \\
 & [\dots + A(rs\dots N) e^{i(k_r x_r + k_s x_s + \dots + k_N x_N)} + \dots \\
 & + A(s\dots Nr) e^{i(k_s x_r + \dots + k_N x_{N-1} + k_r x_N)} + \dots] \Theta(x_r < x_s \dots < x_N) + \\
 & [\dots + A(rs\dots N) e^{i(k_r x_s + \dots + k_{N-1} x_N + k_N x_r)} + \dots \\
 & + A(s\dots Nr) e^{i(k_s x_s + \dots + k_N x_N + k_r x_r)} + \dots] \Theta(x_s < \dots < x_N < x_r) + \\
 & \dots
 \end{aligned}$$

Para quantizar o sistema, nós vamos impor condições de contorno periódicas para todas as coordenadas  $x_j$ . Por simplicidade, vamos exigir que a função de onda seja periódica no intervalo  $(0, L)$ , tal que  $\psi_B(x_j = 0) = \psi_B(x_j = L)$ . Assim,

$$\begin{aligned}
 \psi_B(\dots, x_r = 0, x_s, \dots) = & \dots \\
 & [\dots + A(rs\dots N) e^{i(k_s x_s + \dots + k_N x_N)} + \dots \\
 & + A(s\dots Nr) e^{i(\dots + k_N x_{N-1} + k_r x_N)} + \dots] \Theta(0 < x_s \dots < x_N) + \\
 & \dots
 \end{aligned}$$

pois  $\Theta(x_s < \dots < x_N < 0) = \Theta(0 - x_N) \Theta(x_N - x_{N-1}) \dots = 0$ , e

$$\begin{aligned}
 \psi_B(\dots, x_r = L, x_s, \dots) = & \dots \\
 & [\dots + A(rs\dots N) e^{i(k_r x_s + \dots + k_{N-1} x_N)} e^{ik_N L} + \dots \\
 & + A(s\dots Nr) e^{i(k_s x_s + \dots + k_N x_N)} e^{ik_r L} + \dots] \Theta(x_s < \dots < x_N < L) + \\
 & \dots
 \end{aligned}$$

pois  $\Theta(L < x_s \dots < x_N) = \Theta(x_N - x_{N-1}) \dots \Theta(x_s - L) = 0$ . Assim, a condição de contorno periódica

$$\psi_B(\dots, x_r = 0, x_s, \dots) = \psi_B(\dots, x_r = L, x_s, \dots)$$

nos leva a concluir, por inspeção, que

$$e^{ik_r L} = \frac{A(rs\dots N)}{A(s\dots Nr)}$$

Estas condições equivalem a mover a partícula ao redor de um círculo, atravessando setores com diferentes ordenamentos entre as partículas o que, como nós vimos anteriormente, podem ser expressos como diferentes permutações dos quasi-momenta. Ou seja,

$$A(rst\dots N) \rightarrow A(srt\dots N) \rightarrow A(str\dots N) \rightarrow \dots \rightarrow A(st\dots Nr)$$

Mas, segundo a relação (A.5) podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{A(rst\dots N)}{A(srt\dots N)} &= \frac{k_r - k_s + ic}{k_r - k_s - ic} \\ \frac{A(srt\dots N)}{A(str\dots N)} &= \frac{k_r - k_t + ic}{k_r - k_t - ic} \\ &\vdots \\ \frac{A(st\dots rN)}{A(st\dots Nr)} &= \frac{k_r - k_N + ic}{k_r - k_N - ic} \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} A(rst\dots N) &= \frac{k_r - k_s + ic}{k_r - k_s - ic} A(srt\dots N) \\ &= \frac{k_r - k_s + ic}{k_r - k_s - ic} \frac{k_r - k_t + ic}{k_r - k_t - ic} A(str\dots N) \\ &\vdots \\ &= \frac{k_r - k_s + ic}{k_r - k_s - ic} \frac{k_r - k_t + ic}{k_r - k_t - ic} \dots \frac{k_r - k_N + ic}{k_r - k_N - ic} A(st\dots Nr) \end{aligned}$$

Equivalentemente, esta condição pode ser escrita como

$$e^{ik_j L} = \prod_{l \neq j} \left( \frac{k_j - k_l + ic}{k_j - k_l - ic} \right), \quad j = 1, \dots, N. \quad (\text{A.6})$$

conhecida como as equações do ansatz de Bethe (*EAB*). Explicitamente, para o caso de três bósons:

$$\begin{aligned}
 e^{ik_1L} &= \frac{k_1 - k_2 + ic}{k_1 - k_2 - ic} \frac{k_1 - k_3 + ic}{k_1 - k_3 - ic} \\
 e^{ik_2L} &= \frac{k_2 - k_1 + ic}{k_2 - k_1 - ic} \frac{k_2 - k_3 + ic}{k_2 - k_3 - ic} \\
 e^{ik_3L} &= \frac{k_3 - k_1 + ic}{k_3 - k_1 - ic} \frac{k_3 - k_2 + ic}{k_3 - k_2 - ic}
 \end{aligned}$$

A solução das  $EAB$  foi estudada em [58]. Em particular, para o estado fundamental sabemos que a distribuição das raízes tem uma estrutura do tipo (para  $N = 3$ ):

$$\begin{aligned}
 k_3 &= -k_1 \\
 k_2 &= 0
 \end{aligned}$$

de forma que as três equações do ansatz de Bethe ficam reduzidas a uma única equação:

$$e^{ikL} = \frac{k + ic}{k - ic} \frac{2k + ic}{2k - ic}$$

e só precisamos trabalhar com um quasi-momenta  $k$ .

Usando os resultados (A.5) e (A.6) nós podemos escrever os coeficientes  $A(P)$  como

$$A(P) = C (-1)^P \prod_{i < j} (k_{P_i} - k_{P_j} + ic)$$

Com isto, a função de onda (A.4) fica totalmente determinada, desde que se resolva as equações do ansatz de Bethe e se determine os quasi-momenta “ $k$ ’s”.

# Apêndice B

## Construção do termo central do ansatz por regiões

Neste apêndice nós vamos aplicar o método do ansatz de Bethe na construção da função de onda genérica para dois férmions interagentes por um potencial de contato do tipo delta, em uma rede unidimensional com periodicidade  $L$ .

Considere duas partículas interagentes por um potencial do tipo delta de Dirac em um sistema unidimensional com periodicidade  $L$ . O Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2).$$

Podemos escrever a função de onda espacial mais geral para o sistema como

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) &= [A(12, 12) e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + A(21, 12) e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}] \Theta(x_2 - x_1) \\ &+ [A(12, 21) e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)} + A(21, 21) e^{i(k_2 x_2 + k_1 x_1)}] \Theta(x_1 - x_2). \end{aligned}$$

A ação do Hamiltoniano sobre a função de onda resulta em

$$H\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2) + \text{termos indesejados},$$

onde os “termos indesejados” são funções de  $k_1$  e  $k_2$ . Exigindo que os termos indesejados sejam nulos,  $k_1$  e  $k_2$  devem satisfazer algumas condições de consistência conhecidas como equações do ansatz de Bethe, que dependem da simetria da função de onda. A energia e o momentum são dados, respectivamente, por

$$E = k_1^2 + k_2^2, \quad P = k_1 + k_2$$

Uma vez que o sistema apresenta uma configuração de spin singleto (antissimétrica), a função de onda deve ser espacialmente simétrica,

$$\psi(x_2, x_1) = \psi(x_1, x_2),$$

o que aplica

$$\begin{cases} A(12, 12) = A(12, 21) \equiv A(12) \\ A(21, 12) = A(21, 21) \equiv A(21) \end{cases}$$

Além disso, as condições de contorno periódicas

$$\psi\left(x_j = -\frac{L}{2}\right) = \psi\left(x_j = \frac{L}{2}\right), \quad j = 1, 2$$

levam às relações

$$\begin{cases} A(12) = A(21) e^{ik_1 L} \\ A(21) = A(12) e^{ik_2 L} \end{cases}$$

Observe que, para o estado fundamental,  $P = 0 \Rightarrow k_2 = -k_1 \equiv -k$ . Portanto, podemos escrever a função de onda simétrica em condições de contorno periódicas como

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) &= A(21) [e^{ik_1 L} e^{ik_1(x_1-x_2)} + e^{-ik_1(x_1-x_2)}] \Theta(x_2 - x_1) \\ &+ A(21) [e^{ik_1 L} e^{-ik_1(x_1-x_2)} + e^{ik_1(x_1-x_2)}] \Theta(x_1 - x_2) \end{aligned}$$

Observe que, definindo  $x = x_2 - x_1$ , obtemos nosso ansatz para a região *II* do sistema de coordenadas relativas.

# Apêndice C

## Normalização da função de onda e valor esperado do Hamiltoniano pelo ansatz por regiões

Neste apêndice nós vamos demonstrar, em detalhe, os cálculos realizados para a obtenção do valor esperado de energia para o estado fundamental, tanto no caso atrativo ( $c < 0$ ) quanto no caso repulsivo ( $c > 0$ ) para o caso  $N = 2$  utilizando o ansatz por regiões.

### C.1 Caso repulsivo ( $c > 0$ )

No caso repulsivo os quasi-momenta  $k's$ , soluções das equações do ansatz de Bethe para o estado fundamental, são números reais. Podemos escrever nossa função tentativa como

$$\psi = \begin{cases} \psi_I = e^{-\alpha(x+L)^2} \psi_{II}(-L) & -\infty < x < -L \\ \psi_{II} = (e^{ikL} e^{-ikx} + e^{ikx}) \Theta(x) \\ \quad + (e^{ikL} e^{ikx} + e^{-ikx}) \Theta(-x) & -L < x < +L \\ \psi_{III} = e^{-\alpha(x-L)^2} \psi_{II}(+L) & +L < x < +\infty \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

É fácil observar que

$$\begin{aligned}\psi_I(-L) &= \psi_{II}(-L), \\ \psi_{II}(+L) &= \psi_{III}(+L), \\ \psi_{II}(\pm L) &= 1 + e^{ikL}.\end{aligned}$$

Além disso,  $\psi_{II}^*(\pm L)\psi_{II}(\pm L) = 2[1 + \cos(kL)]$ .

### C.1.1 Normalização da função de onda

$$\begin{aligned}\langle \psi | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* \psi_I dx + \int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx + \int_L^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dx\end{aligned}$$

Vamos resolver cada termo separadamente. O primeiro termo nos dá

$$\int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* \psi_I dx = 2[1 + \cos(kL)] \int_{-\infty}^{-L} e^{-2\alpha(x+L)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)]. \quad (\text{C.2})$$

Da mesma forma, podemos escrever o segundo termo como

$$\begin{aligned}\int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx &= \int_{-L}^{+L} 2 \{1 + \cos[k(2x - L)]\} \Theta(x) \Theta(x) dx \\ &\quad + \int_{-L}^{+L} 2 \{1 + \cos[k(2x + L)]\} \Theta(-x) \Theta(-x) dx.\end{aligned}$$

Fazendo a substituição de variáveis  $y = -x$  e usando a propriedade básica da função degrau,

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \\ \frac{1}{2}, & x = 0 \end{cases}$$

nós obtemos

$$\begin{aligned}\int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx &= 4 \int_0^L \{1 + \cos [k(2y - L)]\} dy \\ &= \frac{4}{k} [kL + \sin(kL)]\end{aligned}\quad (C.3)$$

Finalmente, para o terceiro termo

$$\int_L^\infty \psi_{III}^* \psi_{III} dx = 2 [1 + \cos(kL)] \int_L^\infty e^{-2\alpha(x-L)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)]. \quad (C.4)$$

Assim sendo, utilizando os resultados (B.2), (B.3) e (B.4), nós obtemos

$$\langle \psi | \psi \rangle = 2\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)] + \frac{4}{k} [kL + \sin(kL)] \quad (C.5)$$

### C.1.2 Valor esperado do Hamiltoniano

$$\begin{aligned}\langle \psi | H_{rel} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^\infty \psi^* (H_{rel} \psi) dx \\ &= \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel} \psi_I) dx + \int_{-L}^L \psi_{II}^* (H_{rel} \psi_{II}) dx + \int_L^\infty \psi_{III}^* (H_{rel} \psi_{III}) dx\end{aligned}$$

Vamos calcular a expressão para o valor esperado de energia termo a termo. Observando que

$$\begin{aligned}H_{rel} \psi_I &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right) \psi_I \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right) \psi_I,\end{aligned}$$

pois  $\delta(x)$  atua somente no intervalo  $(-L, L)$ , e que

$$\psi_I = (1 + e^{ikL}) e^{-\alpha(x+L)^2}$$

segue que

$$\begin{aligned}H_{rel} \psi &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} (1 + e^{ikL}) [4\alpha^2 (x+L)^2 - 2\alpha] e^{-\alpha(x+L)^2} \\ &\quad + \frac{1}{2} (1 + e^{ikL}) \mu\omega^2 x^2 e^{-\alpha(x+L)^2}.\end{aligned}$$



APÊNDICE C. NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA E VALOR ESPERADO DO HAMILTONIANO

Portanto, podemos escrever a primeira integral do valor esperado de energia como

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel} \psi_I) dx &= -\frac{\hbar^2}{\mu} [1 + \cos(kL)] \int_{-\infty}^{-L} [4\alpha^2 (x+L)^2 - 2\alpha] e^{-2\alpha(x+L)^2} dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \mu \omega^2 [1 + \cos(kL)] \int_{-\infty}^{-L} x^2 e^{-2\alpha(x+L)^2} dx. \end{aligned}$$

Como estas integrais já foram calculadas anteriormente, vamos apenas usar o resultado:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel} \psi_I) dx &= \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)] \\ &\quad + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{\alpha} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] [1 + \cos(kL)] \quad (C.6) \end{aligned}$$

Da mesma forma,

$$H_{rel} \psi_{II} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right) \psi_{II},$$

onde

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= (e^{ikL} e^{-ikx} + e^{ikx}) \Theta(x) \\ &\quad + (e^{ikL} e^{ikx} + e^{-ikx}) \Theta(-x) \end{aligned}$$

Observe que

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} = -k^2 \psi_{II} + 2ik(1 - e^{ikL}) \delta(x)$$

e

$$\delta(x) \psi_{II} = (1 + e^{ikL}) \delta(x)$$

Assim

$$H_{rel} \psi_{II} = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right) \psi_{II}$$

para todos os valores de  $k$  que satisfazem a equação

$$e^{ikL} = \frac{k + i\frac{2\mu}{\hbar^2} c}{k - i\frac{2\mu}{\hbar^2} c} \quad (C.7)$$

APÊNDICE C. NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA E VALOR ESPERADO DO HAMILTONIANO

conhecida como equação do ansatz de Bethe. Portanto, podemos escrever a segunda integral do valor esperado de energia como

$$\int_{-L}^L \psi_{II}^* (H_{rel} \psi_{II}) dx = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \int_{-L}^L x^2 \psi_{II}^* \psi_{II} dx$$

Usando o resultado (B.3), nós podemos escrever

$$\int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx = \frac{4}{k} [kL + \sin(kL)]$$

e, além disso,

$$\int_{-L}^L x^2 \psi_{II}^* \psi_{II} dx = 4 \int_{-L}^L x^2 \{1 + \cos[k(2L - x)]\} dx$$

Uma vez que

$$\int x^2 \cos[k(2L - x)] dx = \frac{1}{4k^3} \{ (2k^2 x^2 - 1) \sin[k(2L - x)] + 2kx \cos[k(2L - x)] \}$$

nós encontramos

$$\int_0^L x^2 \psi_{II}^* \psi_{II} dx = \frac{L^3}{3} + \frac{1}{2k^3} [(k^2 L^2 - 1) \sin(kL) + kL \cos(kL)]$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \int_{-L}^L \psi_{II}^* (H_{rel} \psi_{II}) dx &= 2 \frac{\hbar^2 k}{\mu} [kL + \sin(kL)] \\ &+ \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left\{ \frac{4L^3}{3} + \frac{2}{k^3} [(k^2 L^2 - 1) \sin(kL) + kL \cos(kL)] \right\} \end{aligned} \quad (C.8)$$

Finalmente, consideremos

$$\begin{aligned} H_{rel} \psi_{III} &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right) \psi_{III} \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right) \psi_{III}, \end{aligned}$$

pois  $\delta(x)$  atua somente no intervalo  $(-L, L)$ . Uma vez que

$$\psi_{III} = (1 + e^{ikL}) e^{-\alpha(x-L)^2}$$

segue que

$$H_{rel}\psi_{III} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (1 + e^{ikL}) [4\alpha^2 (x - L)^2 - 2\alpha] e^{-\alpha(x-L)^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 (1 + e^{ikL}) x^2 e^{-\alpha(x-L)^2}.$$

Portanto, o último termo da expressão do valor esperado de energia é

$$\int_L^\infty \psi_{III}^* (H_{rel}\psi_{III}) dx = -\frac{\hbar^2}{\mu} [1 + \cos(kL)] \int_L^\infty [4\alpha^2 (x - L)^2 - 2\alpha] e^{-2\alpha(x-L)^2} dx + \frac{1}{2}\mu\omega^2 [1 + \cos(kL)] \int_L^\infty x^2 e^{-2\alpha(x-L)^2} dx.$$

Uma vez que estas integrais já foram calculadas anteriormente, vamos usar o resultado obtido.

Assim

$$\int_L^\infty \psi_{III}^* (H_{rel}\psi_{III}) dx = \frac{\hbar^2\alpha}{2\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)] + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{\alpha} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] [1 + \cos(kL)]. \quad (C.9)$$

Portanto, utilizando os resultados (B.6), (B.8) e (B.9), nós podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle \psi | H_{rel} | \psi \rangle &= \frac{\hbar^2\alpha}{\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cos(kL)] \\ &+ \mu\omega^2 \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{\alpha} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] [1 + \cos(kL)] \\ &+ 2\frac{\hbar^2 k}{\mu} [kL + \sin(kL)] \\ &+ \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left\{ \frac{4L^3}{3} + \frac{2}{k^3} [(k^2 L^2 - 1) \sin(kL) + kL \cos(kL)] \right\} \quad (C.10) \end{aligned}$$

Observe que nós devemos considerar a contribuição de energia devida a descontinuidade da derivada primeira da função de onda tentativa. Seja  $\langle I \rangle$  a mudança de energia devida à descontinuidade da derivada primeira. Ou seja,

$$\begin{aligned}
 \langle I \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} dx \psi^*(x) [H\psi(x)] + \int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} dx \psi^*(x) [H\psi(x)] \right\} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} dx \psi^*(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} \right] + \int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} dx \psi^*(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} \right] \right\} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} ik (1 - e^{ikL}) \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} dx (e^{-ikL} e^{-ikx} + e^{ikx}) \delta(x+L) \right\} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} ik (1 - e^{ikL}) \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} dx (e^{-ikL} e^{ikx} + e^{-ikx}) \delta(L-x) \right\} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2\mu} ik (1 - e^{ikL}) (1 + e^{ikL}) \\
 &= -\frac{2\hbar^2}{\mu} k \sin(kL)
 \end{aligned}$$

## C.2 Caso atrativo ( $c < 0$ )

No caso atrativo os quasi-momenta  $k$  são números puramente imaginários. Definindo  $k' = ik$ , com  $k \in R$ , podemos escrever nossa função tentativa como

$$\psi = \begin{cases} \psi_I = e^{-\alpha(x+L)^2} \psi_{II}(-L) & -\infty < x < -L \\ \psi_{II} = (e^{-k'L} e^{k'x} + e^{-k'x}) \Theta(x) \\ \quad + (e^{-k'L} e^{-k'x} + e^{-k'x}) \Theta(-x) & -L < x < +L \\ \psi_{III} = e^{-\alpha(x-L)^2} \psi_{II}(+L) & +L < x < +\infty \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

É fácil observar que

$$\begin{aligned}
 \psi_I(-L) &= \psi_{II}(-L), \\
 \psi_{II}(+L) &= \psi_{III}(+L), \\
 \psi_{II}(\pm L) &= 1 + e^{-k'L}.
 \end{aligned}$$

### C.2.1 Normalização da função de onda

$$\begin{aligned}\langle \psi | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* \psi_I dx + \int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx + \int_L^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dx\end{aligned}$$

Vamos resolver cada termo separadamente, trabalhando por regiões. O primeiro termo nos dá

$$\int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* \psi_I dx = \left(1 + e^{-k'L}\right)^2 \int_{-\infty}^{-L} e^{-2\alpha(x+L)^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \left(1 + e^{-k'L}\right)^2.$$

A partir das definições das funções  $\sinh(x)$  e  $\cosh(x)$ ,

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad \cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

nós podemos escrever

$$\int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* \psi_I dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} e^{-k'L} [1 + \cosh(k'L)] \quad (\text{C.12})$$

Da mesma forma, podemos escrever o segundo termo, que corresponde a região  $II$ , como

$$\begin{aligned}\int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx &= \int_{-L}^{+L} \left[ e^{2k'(x-L)} + 2e^{-k'L} + e^{-2k'x} \right] \Theta(x) \Theta(x) dx \\ &\quad + \int_{-L}^{+L} \left[ e^{-2k'(x-L)} + 2e^{-k'L} + e^{2k'x} \right] \Theta(-x) \Theta(-x) dx.\end{aligned}$$

Fazendo a substituição de variáveis  $y = -x$  e usando a propriedade básica da função degrau,

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \\ \frac{1}{2}, & x = 0 \end{cases}$$

nós obtemos

$$\begin{aligned}
 \int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx &= 2 \int_0^L \left[ e^{2k'(y-L)} + 2e^{-k'L} + e^{-2k'y} \right] dy \\
 &= \frac{2}{k'} \left( 1 - e^{-2k'L} \right) + 4Le^{-k'L} \\
 &= 4e^{-k'L} \left[ \frac{\sinh(k'L)}{k'} + L \right]
 \end{aligned} \tag{C.13}$$

Finalmente, para o terceiro termo

$$\begin{aligned}
 \int_L^\infty \psi_{III}^* \psi_{III} dx &= \left( 1 + e^{-k'L} \right)^2 \int_{-\infty}^{-L} e^{-2\alpha(x-L)^2} dx \\
 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \left( 1 + e^{-k'L} \right)^2 \\
 &= \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} e^{-k'L} [1 + \cosh(k'L)]
 \end{aligned} \tag{C.14}$$

Assim sendo, utilizando os resultados (B.12), (B.13) e (B.14), nós obtemos

$$\langle \psi | \psi \rangle = 2e^{-k'L} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} [1 + \cosh(k'L)] + 2 \left[ \frac{\sinh(k'L)}{k'} + L \right] \right\} \tag{C.15}$$

### C.2.2 Valor esperado do Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | H_{rel} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^\infty \psi^* (H\psi) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel}\psi_I) dx + \int_{-L}^L \psi_{II}^* (H_{rel}\psi_{II}) dx + \int_L^\infty \psi_{III}^* (H_{rel}\psi_{III}) dx
 \end{aligned}$$

Vamos calcular a expressão para o valor esperado de energia termo a termo. Observando que

$$\begin{aligned}
 H_{rel}\psi_I &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right) \psi_I \\
 &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right) \psi_I,
 \end{aligned}$$

pois  $\delta(x)$  atua somente no intervalo  $(-L, L)$ , e que

$$\psi_I = \left( 1 + e^{-k'L} \right) e^{-\alpha(x+L)^2}$$

APÊNDICE C. NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA E VALOR ESPERADO DO HAMILTONI

segue que

$$H_{rel}\psi_I = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(1 + e^{-k'L}\right) [4\alpha^2 (x + L)^2 - 2\alpha] e^{-\alpha(x+L)^2} + \frac{1}{2} \left(1 + e^{-k'L}\right) \mu\omega^2 x^2 e^{-\alpha(x+L)^2}.$$

Portanto, podemos escrever a primeira integral do valor esperado de energia como

$$\int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel}\psi_I) dx = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(1 + e^{-k'L}\right)^2 \int_{-\infty}^{-L} [4\alpha^2 (x + L)^2 - 2\alpha] e^{-2\alpha(x+L)^2} dx + \frac{1}{2} \mu\omega^2 \left(1 + e^{-k'L}\right)^2 \int_{-\infty}^{-L} x^2 e^{-2\alpha(x+L)^2} dx.$$

Fazendo a troca de variáveis  $y = x + L$ , nós podemos escrever

$$\int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel}\psi_I) dx = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(1 + e^{-k'L}\right)^2 \int_{-\infty}^0 [4\alpha^2 y^2 - 2\alpha] e^{-2\alpha y^2} dy + \frac{1}{2} \mu\omega^2 \left(1 + e^{-k'L}\right)^2 \int_{-\infty}^0 (y - L)^2 e^{-2\alpha y^2} dy.$$

Uma vez que

$$e^{-\beta y^2} \text{ é função par e } \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta y^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}},$$

$$y e^{-\beta y^2} \text{ é função ímpar e } \int_{-\infty}^{\infty} y e^{-\beta y^2} dy = \frac{1}{2\beta},$$

$$y^2 e^{-\beta y^2} \text{ é função par e } \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-\beta y^2} dy = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\beta^{\frac{3}{2}}},$$

APÊNDICE C. NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA E VALOR ESPERADO DO HAMILTONI

nós obtemos

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{-L} \psi_I^* (H_{rel} \psi_I) dx &= \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \left(1 + e^{-k'L}\right)^2 \\
 &+ \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left(1 + e^{-k'L}\right)^2 \left[ \frac{1}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{2\alpha} + \frac{L^2}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] \\
 &= [1 + \cosh(k'L)] e^{-k'L} \left\{ \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right. \\
 &\left. + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{\alpha} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] \right\} \quad (C.16)
 \end{aligned}$$

Da mesma forma,

$$H_{rel} \psi_{II} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right) \psi_{II},$$

onde

$$\begin{aligned}
 \psi_{II} &= (e^{-k'L} e^{k'x} + e^{-k'x}) \Theta(x) \\
 &+ (e^{-k'L} e^{-k'x} + e^{-k'x}) \Theta(-x).
 \end{aligned}$$

Observe que

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} = k'^2 \psi_{II} + 2k' \left( e^{-k'L} - 1 \right) \delta(x)$$

e

$$\delta(x) \psi_{II} = \left( 1 + e^{-k'L} \right) \delta(x)$$

Assim

$$H_{rel} \psi_{II} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} k'^2 + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right) \psi_{II}$$

para todos os valores de  $k'$  que satisfazem a equação

$$e^{-k'L} = \frac{k' + \frac{2\mu}{\hbar^2} c}{k' - \frac{2\mu}{\hbar^2} c} \quad (C.17)$$

conhecida como equação do ansatz de Bethe. Portanto, podemos escrever a segunda integral do valor esperado de energia como



APÊNDICE C. NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA E VALOR ESPERADO DO HAMILTONI

$$\int_{-L}^L \psi_{II}^* (H_{rel} \psi_{II}) dx = -\frac{\hbar^2}{2\mu} k'^2 \int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \int_{-L}^L x^2 \psi_{II}^* \psi_{II} dx$$

Usando o resultado (B.13), nós podemos escrever

$$\int_{-L}^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx = 4e^{-k'L} \left[ \frac{\sinh(k'L)}{k'} + L \right]$$

e, além disso,

$$\int_{-L}^L x^2 \psi_{II}^* \psi_{II} dx = 2 \int_0^L x^2 \left[ e^{2k'(x-L)} + 2e^{-k'L} + e^{-2k'x} \right] dx$$

Uma vez que

$$\int x^2 e^{\pm 2k'(x-L)} dy = \frac{1}{4k'^3} [2k'x(k'x \mp 1) \pm 1] e^{2k'(x-L)}$$

nós encontramos

$$\begin{aligned} \int_0^L x^2 \psi_{II}^* \psi_{II} dx &= \frac{2L^3}{3} e^{-k'L} \\ &+ \frac{1}{4k'^3} \left[ 2k'(k'L - 1) - 2k'L(k'L + 1) e^{-2k'L} - 2e^{-2k'L} + 2 \right] \\ &= \frac{2L^3}{3} e^{-k'L} \\ &+ \frac{e^{-k'L}}{k'^3} \left[ (k'^2 L^2 + 1) \sinh(k'L) - k'L \cosh(k'L) \right] \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \int_{-L}^L \psi_{II}^* (H_{rel} \psi) dx &= -2 \frac{\hbar^2 k'}{\mu} e^{-k'L} [\sinh(k'L) + k'L] \\ &+ \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left\{ \frac{e^{-k'L}}{k'^3} [(k'^2 L^2 + 1) \sinh(k'L) - k'L \cosh(k'L)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{2L^3}{3} e^{-k'L} \right\} \end{aligned} \tag{C.18}$$

Finalmente, cosideremos

$$\begin{aligned} H_{rel}\psi_{III} &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2c\delta(x) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right) \psi_{III} \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right) \psi_{III}, \end{aligned}$$

pois  $\delta(x)$  atua somente no intervalo  $(-L, L)$ . Uma vez que

$$\psi_{III} = \left( 1 + e^{-k'L} \right) e^{-\alpha(x-L)^2}$$

segue que

$$\begin{aligned} H_{rel}\psi_{III} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( 1 + e^{-k'L} \right) [4\alpha^2 (x-L)^2 - 2\alpha] e^{-\alpha(x-L)^2} \\ &\quad + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left( 1 + e^{-k'L} \right) x^2 e^{-\alpha(x-L)^2}. \end{aligned}$$

Portanto, o último termo da expressão do valor esperado de energia é

$$\begin{aligned} \int_L^\infty \psi_{III}^* (H_{rel}\psi_{III}) dx &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( 1 + e^{-k'L} \right)^2 \int_L^\infty [4\alpha^2 (x-L)^2 - 2\alpha] e^{-2\alpha(x-L)^2} dx \\ &\quad + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left( 1 + e^{-k'L} \right)^2 \int_L^\infty x^2 e^{-2\alpha(x-L)^2} dx. \end{aligned}$$

Fazendo a substituição  $y = x - L$ , nós podemos escrever

$$\begin{aligned} \int_L^\infty \psi_I^* (H_{rel}\psi_I) dx &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( 1 + e^{-k'L} \right)^2 \int_0^\infty [4\alpha^2 y^2 - 2\alpha] e^{-2\alpha y^2} dy \\ &\quad + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left( 1 + e^{-k'L} \right)^2 \int_0^\infty (y+L)^2 e^{-2\alpha y^2} dy. \end{aligned}$$

Uma vez que

$$\begin{aligned} e^{-\beta y^2} \text{ é função par e } \int_{-\infty}^\infty e^{-\beta y^2} dy &= \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \\ y e^{-\beta y^2} \text{ é função ímpar e } \int_{-\infty}^\infty y e^{-\beta y^2} dy &= \frac{1}{2\beta}, \\ y^2 e^{-\beta y^2} \text{ é função par e } \int_{-\infty}^\infty y^2 e^{-\beta y^2} dy &= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\beta^{\frac{3}{2}}}, \end{aligned}$$

APÊNDICE C. NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA E VALOR ESPERADO DO HAMILTONI

nós obtemos

$$\begin{aligned}
 \int_L^\infty \psi_{III}^* (H_{rel} \psi_{III}) dx &= \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} (1 + e^{-k'L})^2 \\
 &+ \frac{1}{2} \mu \omega^2 (1 + e^{-k'L})^2 \left[ \frac{1}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{2\alpha} + \frac{L^2}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] \\
 &= [1 + \cosh(k'L)] e^{-k'L} \left\{ \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right. \\
 &\left. + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{\alpha} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] \right\} \quad (C.19)
 \end{aligned}$$

Portanto, utilizando os resultados (B.16), (B.18) e (B.19), nós podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | H_{rel} | \psi \rangle &= [1 + \cosh(k'L)] e^{-k'L} \left\{ \frac{\hbar^2 \alpha}{\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right. \\
 &+ \mu \omega^2 \left[ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \frac{L}{\alpha} + L^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \right] \left. \right\} \\
 &- 2 \frac{\hbar^2 k'}{\mu} e^{-k'L} [\sinh(k'L) + k'L] \\
 &+ \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left\{ \frac{e^{-k'L}}{k'^3} [(k'^2 L^2 + 1) \sinh(k'L) - k'L \cosh(k'L)] \right. \\
 &\left. + \frac{2L^3}{3} e^{-k'L} \right\} \quad (C.20)
 \end{aligned}$$

Novamente, devemos considerar a contribuição da descontinuidade da derivada primeira da função de onda tentativa. Da mesma forma como procedemos para o caso repulsivo,

$$\begin{aligned}
 \langle I \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} dx \psi^*(x) [H_{rel} \psi(x)] + \int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} dx \psi^*(x) [H_{rel} \psi(x)] \right\} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} dx \psi^*(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} \right] + \int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} dx \psi^*(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} \right] \right\} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} k' (e^{-k'L} - 1) \int_{-L-\epsilon}^{-L+\epsilon} dx (e^{-k'L} e^{-k'x} + e^{k'x}) \delta(x+L) \right\} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} k' (e^{-k'L} - 1) \int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} dx (e^{-k'L} e^{+k'x} + e^{-k'x}) \delta(L-x) \right\} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{\mu} k' (e^{-k'L} - 1) (1 + e^{-k'L}) \\
 &= \frac{2\hbar^2}{\mu} k' e^{-k'L} \sinh(k'L)
 \end{aligned}$$

## Apêndice D

Tabelas numéricas para o ansatz por regiões

### D.1 Caso repulsivo

$c (\times 10^{-1})$	$L^* (\times 10^{-1})$	$\alpha^* (\times 10^0)$	$k \in \mathbb{R} (\times 10^0)$	$\varepsilon (\times 10^{-1})$
1.0	2.00001	2.0001	2.48108534189312	1.79895431649907
1.1	2.00001	2.0001	2.59938036368998	1.95698117332444
1.2	2.00001	2.0001	2.71207327117847	2.11588869778156
1.3	2.00001	1.9001	2.81983796709257	2.27369327051349
1.4	2.00001	1.9001	2.92322082826674	2.43158290491755
1.5	2.00001	1.9001	3.02267238466238	2.59033585040928
1.6	2.00001	1.8001	3.11856953035592	2.74982538757732
1.7	4.00001	2.9001	2.23185652709453	2.88915722953781
1.8	4.00001	2.9001	2.29196740022828	3.01388568450972
1.9	4.00001	2.8001	2.35007450590014	3.13878669987220
2.0	4.00001	2.8001	2.40632756846965	3.26422461493830
2.1	4.00001	2.8001	2.46085815517797	3.39048417071925
2.2	4.00001	2.7001	2.51378264671727	3.51716392240364
2.3	4.00001	2.7001	2.56520460917552	3.64401143281610
2.4	4.00001	2.7001	2.61521670853572	3.77164288069510
2.5	4.00001	2.7001	2.66390227120034	3.90004491494113
2.6	4.00001	2.6001	2.71133656745395	4.02816673342030
2.7	6.00001	4.2001	2.19400062683882	4.12062654447463
2.8	6.00001	4.2001	2.22796827448281	4.21064759761943
2.9	6.00001	4.1001	2.26104398428057	4.30108207425351
3.0	6.00001	4.1001	2.29327190788294	4.39180467849452
3.1	6.00001	4.1001	2.32469269931849	4.48299295679848
3.2	6.00001	4.1001	2.35534389867803	4.57462594396520
3.3	6.00001	4.0001	2.38526026278388	4.66644556236487
3.4	6.00001	4.0001	2.41447405156720	4.75861576687473
3.5	6.00001	4.0001	2.44301527722663	4.85117351087640
3.6	6.00001	3.9001	2.47091192194123	4.94401889254690
3.7	6.00001	3.9001	2.49819012887964	5.03699609447552
3.8	6.00001	3.9001	2.52487437042258	5.13030707597610
3.9	6.00001	3.9001	2.55098759685314	5.22393331808862
4.0	8.00001	6.1001	2.15498971340755	5.29920066731795
4.1	8.00001	6.1001	2.17439530479928	5.35744184165454
4.2	8.00001	6.1001	2.19336213680095	5.41587892995812
4.3	8.00001	6.1001	2.21190643394512	5.47449279571130

## D.2 Caso atrativo

$c (\times 10^{-1})$	$L^* (\times 10^{-6})$	$\alpha^* (\times 10^0)$	$k \in \mathbb{C} (\times 10^3)$	$\varepsilon (\times 10^{-1})$
-1.0	1.0	2.0001	1.12099830197492	-2.11015668414156
-1.1	1.0	2.0001	1.17571294405103	-2.33583755080616
-1.2	1.0	2.1001	1.22799212669281	-2.56272980177587
-1.3	1.0	2.1001	1.27813473556656	-2.79398356717907
-1.4	1.0	2.2001	1.32638310602027	-3.02725931428215
-1.5	1.0	2.2001	1.37293695712587	-3.26395480045341
-1.6	1.0	2.3001	1.41796319951542	-3.50420822403070
-1.7	1.0	2.4001	1.46160301886315	-3.74668859588692
-1.8	1.0	2.4001	1.50397710652510	-3.99390844305031
-1.9	1.0	2.5001	1.54518959735861	-4.24427351282403
-2.0	1.0	2.6001	1.58533108505789	-4.49778044508790
-2.1	1.0	2.6001	1.62448096613911	-4.75509454954919
-2.2	1.0	2.7001	1.66270928669975	-5.01702241394191
-2.3	1.0	2.8001	1.70007821509448	-5.28268895544716
-2.4	1.0	2.9001	1.73664322917287	-5.55235227320620
-2.5	1.0	3.0001	1.77245408291922	-5.82622426060882
-2.6	1.0	3.1001	1.80755560061480	-6.10447867962326
-2.7	1.0	3.2001	1.84198833470865	-6.38725766856859
-2.8	1.0	3.3001	1.87578911493895	-6.67467702164338
-2.9	1.0	3.4001	1.90899150990152	-6.96683049806812
-3.0	1.0	3.5001	1.94162621754564	-7.26379335907336
-3.1	1.0	3.6001	1.97372139753233	-7.56562528635899
-3.2	1.0	3.8001	2.00530295569654	-7.87299591313398
-3.3	1.0	3.9001	2.03639478878863	-8.18560489672248
-3.4	1.0	4.0001	2.06701899607081	-8.50326045203539
-3.5	1.0	4.0001	2.09719606309510	-8.82670426198932
-3.6	1.0	4.2001	2.12694502200632	-9.15566180144587
-3.7	1.0	4.3001	2.15628359193434	-9.49034027802218
-3.8	1.0	4.5001	2.18522830241715	-9.83081219212954
-3.9	1.0	4.6001	2.21379460229636	-10.1774090188925
-4.0	1.0	4.8001	2.24199695612193	-10.5298095988545
-4.1	1.0	5.0001	2.26984892977382	-10.8884527073279
-4.2	1.0	5.1001	2.29736326673920	-11.2534976505619
-4.3	1.0	5.3001	2.32455195626206	-11.6247996595527

# Apêndice E

## Programação

Neste apêndice nós apresentamos os pontos essenciais da programação realizada no software *Mathematica 9* para o caso  $N = 3$ . Deixaremos explícitas as transformações de coordenadas e a construção da função de onda. As demais expressões (normalização, valor esperado, integrações numéricas, etc) são demasiadamente longas e por isso serão omitidas.



## Transformação de coordenadas

### Coordinates and Coordinate Transformations

```
(*CoordinateTransform x→R r*)
S[n_]:=Table[If[i==1, 1/n, If[j==i, 1/Sqrt[Binomial[i,i-2]], If[j<i, 1/Sqrt[Binomial[i,i-2]], 0]]], {i,1,n}, {j,1,n}];

(*CoordinateTransform R r→x*)
s[n_]:=Inverse[S[n]];

x=Table[Symbol["x"<>ToString[i]], {i,1,nbosons}];
k=Table[If[i==(nbosons+1)/2, 0, If[i<(nbosons+1)/2, Symbol["k"<>ToString[i]], -Symbol["k"<>ToString[nbosons+1-i]]]], {i,1,nbosons}];
kvar=Table[Symbol["k"<>ToString[i]], {i,1,Floor[nbosons/2]}];
r=Table[Symbol["r"<>ToString[i]], {i,1,nbosons-1}];
θ=Table[Symbol["θ"<>ToString[i]], {i,1,nbosons-2}];
Rr=Join[{R}, r];
λθ=Join[{λ}, θ];
J=CoordinateChartData["Hyperspherical", "VolumeFactor", λθ]; (*use to transform integrals*)
g=CoordinateChartData["Hyperspherical", "Metric", λθ];
ginv=CoordinateChartData["Hyperspherical", "InverseMetric", λθ];

(*Coordinate Transformations*)
xrtrans=Thread[x→s[nbosons].Rr]
rxtrans=Thread[Rr→S[nbosons].x]
rθtrans=Thread[r→CoordinateTransform["Hyperspherical"→"Cartesian", λθ]]
θrtrans=Thread[λθ→CoordinateTransform["Cartesian"→"Hyperspherical", r]]
```

$$\left\{ x_1 \rightarrow R - \frac{r_1}{2} - \frac{r_2}{2\sqrt{3}}, x_2 \rightarrow R + \frac{r_1}{2} - \frac{r_2}{2\sqrt{3}}, x_3 \rightarrow R + \frac{r_2}{\sqrt{3}} \right\}$$

$$\left\{ R \rightarrow \frac{x_1}{3} + \frac{x_2}{3} + \frac{x_3}{3}, r_1 \rightarrow -x_1 + x_2, r_2 \rightarrow -\frac{x_1}{\sqrt{3}} - \frac{x_2}{\sqrt{3}} + \frac{2x_3}{\sqrt{3}} \right\}$$

$$\{ r_1 \rightarrow \lambda \cos[\theta_1], r_2 \rightarrow \lambda \sin[\theta_1] \}$$

$$\left\{ \lambda \rightarrow \sqrt{r_1^2 + r_2^2}, \theta_1 \rightarrow \text{ArcTan}[r_1, r_2] \right\}$$

## Construção da função de onda

### Wavefunctions

```
f[x_List,k_List]:=Exp [i x .k]
```

```
A[P_List,k_List,c]:= (LeviCivitaTensor[Length[P]] [[###] &@@P] Product[(k[[j]]-k[[i]]+i c), {i,1,Length[P]}, {j,1,i-1}]
```

```
ψ[x_List,k_List,c]:=Total[Apply[(A[[#1,#2,c]f[x,#2])&,#]&@({Permutations[Table[i,{i,Length[k]}]],Permutations[k]->)}]
```

```

If[case=="Attractive",
  If[nbosons==3,
    ψin[c_,Λ_,α_]=Expand[(ψ[x,i k,c]//ExpToTrig//FullSimplify)/.xrtrans/.rθtrans,λ],
    ψin[c_,Λ_,α_]=Expand[(ψ[x,i k,c]//ExpToTrig//FullSimplify)/.xrtrans/.rθtrans,λ]
  ],
  If[nbosons==3,
    ψin[c_,Λ_,α_]=Expand[(ψ[x,k,c]//ExpToTrig//Simplify)/.xrtrans/.rθtrans/.{Cos[a_]>>Cos[Simplify[a]],Sin[a_]>>Sin[Simplify[a]]},λ],
    ψin[c_,Λ_,α_]=Collect[Expand[(ψ[x,k,c]//ExpToTrig//Expand//Simplify)/.xrtrans/.rθtrans/.{Cos[a_]>>Cos[Simplify[a]],
    Sin[a_]>>Sin[Simplify[a]]},λ],{Cos[_],Sin[_]}/.{_ Cos[b_]>>FullSimplify[a] Cos[b],_ Sin[b_]>>FullSimplify[a] Sin[b]}
  ]
]
ψout[c_,Λ_,α_]=(ψin[c,Λ,α]/.λ->Λ)Exp[- α[θ,kvar,c,Λ](λ²-Λ²)]

```

$$\begin{aligned}
 & 4 k_1 (c^2 + k_1^2) \cos[k_1 \lambda \cos[\theta_1]] + 4 c^2 k_1 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 4 k_1^3 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - \\
 & 2 (4 c^2 k_1 - 2 k_1^3) \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 2 c^3 \sin[k_1 \lambda \cos[\theta_1]] + 2 c k_1^2 \sin[k_1 \lambda \cos[\theta_1]] - \\
 & 2 c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - 2 c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - \\
 & 2 c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 10 c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right]
 \end{aligned}$$

$$e^{-(\lambda^2 - \Lambda^2) \alpha(\theta_1, (k_1), c, \Lambda)}$$

$$\begin{aligned}
 & \left( 4 k_1 (c^2 + k_1^2) \cos[k_1 \wedge \cos[\theta_1]] + 4 c^2 k_1 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \wedge (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 4 k_1^3 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \wedge (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - \right. \\
 & 2 (4 c^2 k_1 - 2 k_1^3) \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \wedge (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 2 c^3 \sin[k_1 \wedge \cos[\theta_1]] + 2 c k_1^2 \sin[k_1 \wedge \cos[\theta_1]] - \\
 & 2 c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \wedge (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - 2 c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \wedge (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - \\
 & \left. 2 c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \wedge (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 10 c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \wedge (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] \right)
 \end{aligned}$$

## Obtenção da função $\alpha(\Lambda, \theta)$ a partir da descontinuidade da derivada primeira

```
(*Ensure that the derivative is continuous at the inside/outside boundary*)
AbsoluteTiming[Assuming[assumptions,
abound[c_,_]=Last[Last[Flatten[Solve[(D[(ψout[c,Λ,α]-ψin[c,Λ,α]),λ]/.λ→Λ)=0,α[θ,kvar,c,Λ]]]]]
]]
abound[θin_List,kin_List,c_,_]:=abound[c,Λ]/.Thread[θ→θin]/.Thread[kvar→kin]

{0.689039, (-2 c^3 k1 Cos[θ1] Cos[k1 Λ Cos[θ1]] -
2 c k1^3 Cos[θ1] Cos[k1 Λ Cos[θ1]] + c^3 k1 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1]) +
c k1^3 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1]) + c^3 k1 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1])]
(Cos[θ1] + √3 Sin[θ1]) - 5 c k1^3 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1])] (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1]) +
4 k1^2 (c^2 + k1^2) Cos[θ1] Sin[k1 Λ Cos[θ1]] + 2 c^2 k1^2 (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1]) Sin[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] +
2 k1^4 (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1]) Sin[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] +
2 k1 (-2 c^2 k1 + k1^3) (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1]) Sin[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1])])]/
(4 Λ (2 c^2 k1 Cos[k1 Λ Cos[θ1]] + 2 k1^3 Cos[k1 Λ Cos[θ1]] + 2 c^2 k1 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] +
2 k1^3 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] - 4 c^2 k1 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1])] +
2 k1^3 Cos[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1])] + c^3 Sin[k1 Λ Cos[θ1]] + c k1^2 Sin[k1 Λ Cos[θ1]] -
c^3 Sin[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] - c k1^2 Sin[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] - √3 Sin[θ1])] -
c^3 Sin[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1])] + 5 c k1^2 Sin[1/2 k1 Λ (Cos[θ1] + √3 Sin[θ1])])])

ψin[c_,_]:=ψin[c,Λ,abound[*[kvar,θ,c,Λ]*]
ψout[c_,_]:=ψout[c,Λ,abound[*[kvar,θ,c,Λ]*]

ψfull[r1_,r2_,k1_,c_,_]=Piecewise[{{Evaluate[ψout[c,Λ]]/.Thread[θ→Mod[θ-π/6,π/3]+π/6],r.r>Λ^2 (*&&c>0*)},
{Evaluate[ψin[c,Λ]]/.Thread[θ→Mod[θ-π/6,π/3]+π/6],r.r<Λ^2 (*&&c>0*)} (*, {ψout[c,Λ],r.r>Λ^2&&c<0}, {ψin[c,Λ],r.r<Λ^2&&c<0} *)]/.θrtrans
```

## Normalização da função de onda

### Normalisation

#### Integrands

```
densityin[c_, Λ_, α_] = Assuming[assumptions, (ψin[c, Λ, α] -) ψin[c, Λ, α] // Refine]
densityout[c_, Λ_, α_] = Assuming[assumptions, (ψout[c, Λ, α] -) ψout[c, Λ, α] // Refine]
```

```
densityin[c_, Λ_, α_] = Assuming[assumptions, Simplify[(ψin[c, Λ, α] -) ψin[c, Λ, α]]]
densityout[c_, Λ_, α_] = Assuming[assumptions, Simplify[(ψout[c, Λ, α] -) ψout[c, Λ, α]]]
```

$$4 \left( 2 k_1 (c^2 + k_1^2) \cos[k_1 \lambda \cos[\theta_1]] + 2 k_1 (c^2 + k_1^2) \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - 4 c^2 k_1 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 2 k_1^3 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + c^3 \sin[k_1 \lambda \cos[\theta_1]] + c k_1^2 \sin[k_1 \lambda \cos[\theta_1]] - c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 5 c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] \right)^2$$

$$4 e^{-2(\lambda^2 - \Lambda^2) \alpha} e^{i(\theta_1), \{k_1\}, c, \Lambda} \left( 2 k_1 (c^2 + k_1^2) \cos[k_1 \Lambda \cos[\theta_1]] + 2 k_1 (c^2 + k_1^2) \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \Lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - 4 c^2 k_1 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \Lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 2 k_1^3 \cos\left[\frac{1}{2} k_1 \Lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + c^3 \sin[k_1 \Lambda \cos[\theta_1]] + c k_1^2 \sin[k_1 \Lambda \cos[\theta_1]] - c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \Lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \Lambda (\cos[\theta_1] - \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] - c^3 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \Lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] + 5 c k_1^2 \sin\left[\frac{1}{2} k_1 \Lambda (\cos[\theta_1] + \sqrt{3} \sin[\theta_1])\right] \right)^2$$

#### Normalisation Sandwich

```
(*integrand1[λ_, c_, Λ_, α_] = Expand[(Expand[J densityin[c, Λ, α], λ] // TrigReduce) // .integraltrans, λ]; *)
(*integrand1[λ_, c_, Λ_, α_] = Expand[J densityin[c, Λ, α], λ]; *)
(*integrand1[λ_, c_, Λ_, α_] = Expand[Expand[J densityin[c, Λ, α], λ] // .integraltrans // Simplify, λ]; *)
integrand1[λ_, c_, Λ_, α_] = Expand[(Collect[Collect[Expand[J densityin[c, Λ, α], λ] // .integraltrans, λ], {Cos[_], Sin[_], Cosh[_], Sinh[_], λ}]] // .integraltrans2, λ];
Print[Length[integrand1[λ, c, Λ, α]]];
AbsoluteTiming[Assuming[Join[assumptionsin, {λ > 0}], (
normin[c_, Λ_, α_] = Total[ParallelTable[Print[i]; Integrate[integrand1[λ, c, Λ, α][[i]], {λ, 0, Λ}]
// Simplify, {i, 1, Length[integrand1[λ, c, Λ, α]]}, Method -> "FinestGrained"] // Simplify
)]]];
AbsoluteTiming[Assuming[Join[assumptionsout, {λ > 0}], (
normout[c_, Λ_, α_] = Integrate[J densityout[c, Λ, α], {λ, Λ, ∞}]
)]]];
```

## Definição do operador Hamiltoniano

### Energy

#### Hamiltonian

```
(*In this implementation, the delta functions are not within any of the
regions and must be added manually later*)
(*The reduced mass  $\mu = \frac{1}{2}m$ , while the cobined mass is  $M=3m$ *)
Hout[ψ_,assumptions_,case_] := Module[{ψψ,ψddψ},
Assuming[assumptions,
ψψ=Simplify[ψ-ψ];
ψddψ=Simplify[ψ-Laplacian[ψ,λθ,"Hyperspherical"]];
Simplify[Refine[ $\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi\text{dd}\psi+\psi\psi-\frac{\mu}{2}\omega^2\lambda^2\left(1+\text{DiracDelta}[r]+\text{DiracDelta}[r+\sqrt{3}\rho]+\text{DiracDelta}[r-\sqrt{3}\rho]\right)\right)$ ]]]]
]
Hin[ψ_,assumptions_,case_] := Module[{ψψ,ψddψ},
Assuming[assumptions,
ψψ=FullSimplify[ψ-ψ];
(*ψddψ=FullSimplify[ψ-Laplacian[ψ,Join[{λ},θ],"Hyperspherical"]];*)
IF[case=="Repulsive",
FullSimplify[Refine[ $\left(\frac{\hbar^2\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}}{4\mu}+\frac{\mu}{2}\omega^2\lambda^2\right)\psi\psi\left(1+\text{DiracDelta}[r]+\text{DiracDelta}[r+\sqrt{3}\rho]+\text{DiracDelta}[r-\sqrt{3}\rho]\right)$ ]],
FullSimplify[Refine[ $\left(-\frac{\hbar^2\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}}{4\mu}+\frac{\mu}{2}\omega^2\lambda^2\right)\psi\psi\left(1+\text{DiracDelta}[r]+\text{DiracDelta}[r+\sqrt{3}\rho]+\text{DiracDelta}[r-\sqrt{3}\rho]\right)$ ]]
]
]]
```

```
Hin[ψin[c,λ,α],assumptionsin,case] == Hout[ψin[c,λ,α],assumptionsin,case] // Simplify
True
```

```
AbsoluteTiming[ψHψin[c_,λ_,α_,ħ_,μ_,ω_] = Hin[ψin[c,λ,α],assumptionsin,case]]
AbsoluteTiming[ψHψout[c_,λ_,α_,ħ_,μ_,ω_] = Hout[ψout[c,λ,α],assumptionsout,case]]
```

## Minimização do valor esperado através do Golden Section Method

### Golden Section Method (trial)

#### Minimisation Functions

```
(*Only one segment is included. However the factor in the numerator and denominator cancels*)
calcE[kin_List,cin_,Ain_,hin_,muin_,win_,prec_:$MachinePrecision] :=
Block[{$MinPrecision=prec},
With[{k1=SetPrecision[kin,prec],c=SetPrecision[cin,prec],A=SetPrecision[Ain,prec],h=SetPrecision[hin,prec],
mu=SetPrecision[muin,prec],omega=SetPrecision[win,prec]},(*With[{k1=kin,c=cin,A=Ain,h=hin,mu=muin,omega=win},*])
(*Print[{Precision/@{k1,c,A,h,mu,w}}];*)With[{@Region=@region},If[abound[{{\frac{\pi}{2}},k1,c,A}<0|abound[{{\frac{\pi}{3}},k1,c,A}<0,\infty,
N[
(NIntegrate[(\psiH\psiin[c,A,h,\mu,\omega]+\psiH\psiout[c,A,h,\mu,\omega])(**\psiH\psiDisc2[c,A,h,\mu,\omega]*))/Thread[kvar->k1],###,WorkingPrecision->prec]&@@@Region)
NIntegrate[normin[c,A]+normout[c,A]/Thread[kvar->k1],###,WorkingPrecision->prec]&@@@Region
+Total[\psiH\psiDiscAndDelta[c,A,h,\mu,\omega]/Thread[kvar->k1]]
NIntegrate[normin[c,A]+normout[c,A]/Thread[kvar->k1],###,WorkingPrecision->prec]&@@@Region] + \frac{1}{2} (*From motion in coordinate R*)
]]
]]]

```

- The Golden Section Method requires a list (used to store values and parameters) to be passed back to the calling function. Pass an empty list here.

```
calcEn[kin_List,c_,A_,h_,mu_,omega_,prec_:$MachinePrecision]:={calcE[kin,c,A,h,mu,omega,prec],{}}
```

- The Main Function. This initialises the values to look for the minimum and calls the golden section method for each minimisation parameter. The inputs are:
  - c: The interaction strength
  - $h = 1$
  - $\mu = \frac{1}{2}$
  - $\omega = 1$
  - previous: The result returned by a run at a nearby value. It is assumed that the program will start near  $c=0$  and slowly increase. Note that the program is not very robust and if the previous result is too close or too far away no minimum will be found. This can be adjusted somewhat by changing the initial parameters.
  - case: "repulsive" or "attractive"
- Optional Values
  - save -> True or False: If save->True the output will be saved to filename<>" tempdata"

```
Options[minimiseE]={save→False(* , verbose→False, quiet→False*)};
SyntaxInformation[minimiseE]= { "ArgumentsPattern" -> {_,_,_,_,_,_, OptionsPattern[]] };

minimiseE[c_, ħ_, μ_, ω_, previous_, case_ : case, opts: OptionsPattern[]]:=Block[{a1D, En, vals, invals, Aa, Ab, Ac, ka, kb, kc, Ap, cp, k1p, res,
tic, toc, t,
verboseQ, quietQ, saveQ},
{(*verboseQ, quietQ, *) saveQ}={(*OptionValue[verbose] , OptionValue[quiet] , *) OptionValue[save]};

a1D = - $\sqrt{\frac{\hbar \omega}{\mu} \frac{\hbar}{c}}$ ;

tic=AbsoluteTime];

(*Input values*)
invals={"a1D"→a1D, "c"→c, "ħ"→ħ, "μ"→μ, "ω"→ω, "case"→case, "nbosons"→nbosons};

Print["c"<>ToString[c, StandardForm]<>" , a1D"<>ToString[a1D, StandardForm]<>" , tstart"<>DateString[{"Hour", ":", "Minute"}]]];

cp="c"/.previous;
Ap="ħ"/.previous;
k1p="k1"/.previous;

(*Which[(*Still could implement that the trial value is the value of the point before*)
case="Repulsive", {Aa, Ab, Ac}={0.8, 1.0, 1.2}  $\frac{0.58+1.9 c}{0.85+1. c}$  ;,
case="Attractive", {Aa, Ab, Ac}={0.1, 0.4, 0.9} Abs[c] ;, (*A must be <Abs[c]?????*)
case="SuperTonks", Aa=N $\left[\frac{1}{2} \left(1.9 - \frac{0.58+1.9 \text{Abs}[c]}{0.85+1. \text{Abs}[c]}\right)\right]$ ; Ab=N $\left[1.9 - \frac{0.58+1.9 \text{Abs}[c]}{0.85+1. \text{Abs}[c]}\right]$ ; Ac=N $\left[2 \left(1.9 - \frac{0.58+1.9 \text{Abs}[c]}{0.85+1. \text{Abs}[c]}\right)\right]$ ; ,
True, If[quietQ==False, "Case not recognised"]; Return[Null];
];
*)
```

```

If[c==0,{En,vals}={N[ $\frac{\text{nbosons}}{2}$ ],{" $\Lambda$ "->0,Thread[(ToString/@kvar)->ConstantArray[0,Length[kvar]]]}}];
If[case=="Repulsive"&&c>0,
Print[" $\Lambda=$ "<>ToString[ $\left\{\Delta_p, \left(1+\frac{1}{5}\text{Log}\left[\frac{c}{cp}\right]\right)\Delta_p, \frac{1}{4}\left(3+\frac{c}{cp}\right)\Delta_p\right\}$ ,StandardForm]];
{En,vals}=goldenSection[
goldenSection[
calcEn[{k1},c, $\Lambda$ , $\hbar$ , $\mu$ , $\omega$ ]
,{k1,0, $\frac{c}{cp}k1p$ },{k1p $\frac{\Delta_p}{\Lambda}$ , $\frac{1}{4}\left(3+\frac{c}{cp}\right)k1p$ , $\frac{c}{cp}k1p$ },{*{0.4 $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\frac{\pi}{\Lambda}$ ,0.5 $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\frac{\pi}{\Lambda}$ ,0.6 $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\frac{\pi}{\Lambda}$ }},*]abound[ $\left\{\frac{\pi}{3}\right\}$ ,{k1},c, $\Lambda$ ]>0,verbose->False
(*,FilterRules[{opts},Options[goldenSection]]*],{ $\Lambda$ ,0, $\infty$ },{ $\Delta_p$ , $\left(1+\frac{1}{5}\text{Log}\left[\frac{c}{cp}\right]\right)\Delta_p$ (* $\Delta_p$ *), $\frac{1}{4}\left(3+\frac{c}{cp}\right)\Delta_p$ (* $\frac{c}{cp}\Delta_p$ *)},
 $\Lambda>0\&\&\Lambda>\frac{1}{2}\left(5\text{Log}\left[\text{Log}\left[\sqrt{c}+1\right]+1\right]\right)$ ,verbose->True(*,FilterRules[{opts},Options[goldenSection]]*);{*,{k1,0, $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\frac{\pi}{\Lambda}$ },
{0.4 $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\frac{\pi}{\Lambda}$ ,0.5 $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\frac{\pi}{\Lambda}$ ,0.6 $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\frac{\pi}{\Lambda}$ },abound[ $\left\{\frac{\pi}{3}\right\}$ ,{k1},c, $\Lambda$ ]>0,verbose->False(*,FilterRules[{opts},Options[goldenSection]]*);
{ $\Lambda$ ,0, $\infty$ },{0.8 $\frac{0.58+1.9c}{0.85+1.c}$ , $\frac{0.58+1.9c}{0.85+1.c}$ ,1.2 $\frac{0.58+1.9c}{0.85+1.c}$ }}, $\Lambda>0$ ,verbose->True(*,FilterRules[{opts},Options[goldenSection]]*);*}
];
If[case=="Attractive"&&c<0,
Print[" $\Lambda=$ "<>ToString[ $\left\{\Delta_p, \frac{1}{4}\left(3+\frac{c}{cp}\right)\Delta_p, \frac{c}{cp}\Delta_p\right\}$ ,StandardForm]];
{En,vals}=goldenSection[
(*Print["k0="<>ToString[ $\left\{k1p\left(\frac{\Delta_p}{\Lambda}\right)^2, \frac{\sqrt{2}\sqrt{\text{Abs}[c]}}{4\sqrt{\Lambda}}\left(\frac{1}{\text{Cosh}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\text{Abs}[c]\Lambda)\right]}+\text{Abs}[c]\right)^2, \frac{\sqrt{2}\sqrt{\text{Abs}[c]}}{\sqrt{\Lambda}}\left(\frac{1}{\text{Cosh}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\text{Abs}[c]\Lambda)\right]}+\text{Abs}[c]\right)\right\}$ ,StandardForm]<>," kmax="<>ToString[ $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\left(\text{Min}\left[\text{Abs}[c],\sqrt{\text{Abs}[c]}\right]\right)$ ,StandardForm]]];*)
{En,vals}=calcEn[ $\left\{\frac{\text{nbosons}-1}{2}c\right\}$ ,c, $\Lambda$ , $\hbar$ , $\mu$ , $\omega$ ,100];
{En,Join[vals,{"k1"->Abs[ $\frac{\text{nbosons}-1}{2}c$ ]]}]
(*{En,vals}=calcEn[ $\left\{\frac{\text{nbosons}-1}{2}\left(\text{Abs}[c]+\sqrt{\text{Abs}[c]}\right)\right\}$ ,c, $\Lambda$ , $\hbar$ , $\mu$ , $\omega$ ,100];
{En,Join[vals,{"k1"-> $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\left(\text{Abs}[c]+\sqrt{\text{Abs}[c]}\right)$ ]}];*)
(*goldenSection[
calcEn[{k1},c, $\Lambda$ , $\hbar$ , $\mu$ , $\omega$ ,100]
,{k1,0, $\frac{1}{4}\frac{\text{nbosons}-1}{2}\text{Abs}[c]$ , $\frac{\sqrt{2}\sqrt{\text{Abs}[c]}}{\sqrt{\Lambda}}\left(\frac{1}{\text{Cosh}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\text{Abs}[c]\Lambda)\right]}+\text{Abs}[c]\right)^2$ }, $\left\{k1p\left(\frac{\Delta_p}{\Lambda}\right)^2, \frac{\sqrt{2}\sqrt{\text{Abs}[c]}}{4\sqrt{\Lambda}}\left(\frac{1}{\text{Cosh}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\text{Abs}[c]\Lambda)\right]}+\text{Abs}[c]\right)\right\}$ 
+Abs[c],1.001 $\frac{\text{nbosons}-1}{2}\text{Abs}[c]$ }{*{0.6Abs[c],0.8Abs[c],Abs[c]}},*],abound[ $\left\{\frac{\pi}{2}\right\}$ ,{k1},c, $\Lambda$ ]>0,
verbose->True(*,FilterRules[{opts},Options[goldenSection]]*);*)
,{ $\Lambda$ ,0, $\infty$ (*2Abs[c]*)}, $\left\{\Delta_p, \frac{1}{8}\left(1+7\frac{c}{cp}\right)\Delta_p, \frac{c}{cp}\Delta_p\right\}$ (*{0.1Abs[c],0.4Abs[c],0.9Abs[c]}}, $\Lambda>0$ ,verbose->True
(*,FilterRules[{opts},Options[goldenSection]]*);
];

```



Produção de dados para a composição dos gráficos

```

Get[filename <> "Etab"];
Get[filename <> "Etab2"];
Get::noopen : Cannot open ThreeBosonsRepulsiveEtab2 .>>

k1p  $\frac{\Lambda p}{\Lambda}$ ,  $\frac{1}{4} \left( 3 + \frac{c}{cp} \right) k1p$ ,  $\frac{c}{cp} k1p$ 

EtabRep[[2 ;; 20]]
With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  minimiseE[2.0, ħ, μ, ω, EtabRep[[20]], case, save → False]
]

EtabRep[[59]]
{En → 3.63417, a1D → -0.282843, c → 5., ħ → 1, μ →  $\frac{1}{2}$ , ω → 1,
  Λ → 2.49887, k1 → 1.54951, t → 495.8963636, case → Repulsive, nbosons → 3}

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  minimiseE[0.9, ħ, μ, ω, {"En" → 2.3196791257124034`, "a1D" → -1.5890040026663992`, "c" → 0.89`,
    "ħ" → 1, "μ" →  $\frac{1}{2}$ , "ω" → 1, "case" → "Repulsive", "nbosons" → 3, "Λ" → 1.772092005640602`,
    "k1" → 1.2428069993422302`, "t" → 187.2047075`9.723861758921393}], case, save → False]
]

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  ctab = Table[i, {i, 0.01, 10, 0.01}];
  EtabRep =
  Rest[FoldList[ minimiseE[#2, ħ, μ, ω, #1, case, save → True] &,
    {"En" → 1.5119381359530024`, "a1D" → -141.4213562373095`, "c" → 0.009`, "ħ" → 1, "μ" →  $\frac{1}{2}$ , "ω" → 1,
    "Λ" → 0.65`, "k1" → 0.98`}, ctab]]
]

EtabRep // Length
EtabRep2 // Length

59
30

EtabRep // Length

89

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  ctab = Table[i, {i, 14, 20, 0.5}];
  EtabRep2 = Rest[FoldList[ minimiseE[#2, ħ, μ, ω, #1, case, save → True] &, EtabRep[[76]], ctab]]
]

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  ctab = Table[i, {i, 5.5, 20, 0.5}];
  EtabRep2 = Rest[FoldList[ minimiseE[#2, ħ, μ, ω, #1, case, save → True] &, EtabRep[[59]], ctab]]
]

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  ctab = Table[i, {i, 1.1, 5, 0.1}];
  EtabRep2 = Rest[FoldList[ minimiseE[#2, ħ, μ, ω, #1, case, save → True] &, EtabRep[[19]], ctab]]
]

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  ctab = Join[Table[i, {i, 0.01, 0.1, 0.01}], Table[i, {i, 0.2, 1, 0.1}]];
  EtabRep =
  Rest[FoldList[ minimiseE[#2, ħ, μ, ω, #1, case, save → True] &,
    {"En" → 1.5119381359530024`, "a1D" → -141.4213562373095`, "c" → 0.009`, "ħ" → 1, "μ" →  $\frac{1}{2}$ , "ω" → 1,
    "Λ" → 0.65`, "k1" → 0.98`}, ctab]]
]

```

```

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  ctab = Table[i, {i, 0.2, 40, 0.2}];
  EtabRep = FoldList[MinimizeE[#2, ħ, μ, ω, #1, case, save → False] &,
    {
      "En" → 1.6161105304679446`, "a1D" → -14.142135623730951`, "c" → 0.1`, "ħ" → 1, "μ" → 1/2, "ω" → 1,
      "Δ" → 1.100985888836944`, "k1" → 1.0089734093253573`}, ctab]
]

With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  ctab = {0.01, 0.04, 0.1, 0.4, 1.0, 4.0, 10.0, 40.0};
  EtabRep = Map[MinimizeE[#, ħ, μ, ω, case, save → True] &, ctab]
]

ctab = {0.01, 0.04, 0.1, 0.4, 1.0, 4.0, 10.0, 40.0};
(*Reduced mass = 1/2*)
With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  EtabRep = Map[scanΛ[#, ħ, μ, ω, verbose → True] &, ctab]
]

ctab = {1};
(*Reduced mass = 1/2*)
With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  EtabRep = Map[scanΛ[#, ħ, μ, ω, verbose → True] &, ctab]
]

ctab = {0.01};
(*Reduced mass = 1/2*)
With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  EtabRep = Map[scanΛ[#, ħ, μ, ω, verbose → True] &, ctab]
]

ctab = {100};
(*Reduced mass = 1/2*)
With[{ħ = 1, μ = 1/2, ω = 1},
  EtabRep = Map[scanΛ[#, ħ, μ, ω, verbose → True] &, ctab]
]

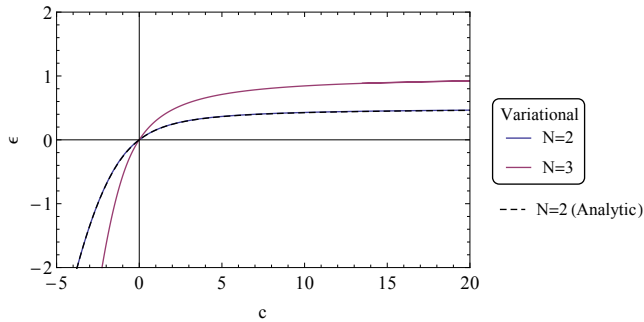
```

## Energias

```

Ecfig =
Show[
  {ListLinePlot[{{{-5, 0.5}, {10, 0.5}}, {"c", "En"} /. Join[EtabAtr2, EtabRep2],
    {"c", "En"} /. Join[Reverse[EtabAtr3], EtabRep3]}, PlotRange -> {{-5, 10}, {-4, 4}}, Frame -> True,
    PlotLegends -> {"N=1", "N=2", "N=3"}, FrameLabel -> {"c", "E"}, BaseStyle -> Directive[14]],
  ListLinePlot[{"c", "e" + 1} /. E2Exact, PlotStyle -> {Dashed, Black}, PlotLegends -> {"N=2 (Analytic)"}]
]}
ecfig =
Show[
  {ListLinePlot[{{{-10, 0}, {10, 0}}, *} {"c",  $\frac{En - 1}{2}$ } /. Join[EtabAtr2, EtabRep2],
    {"c",  $\frac{En - 1.5}{3}$ } /. Join[Reverse[EtabAtr3], EtabRep3],
    {{"En" -> 4.154329100077619`, "a1D" -> -0.10475656017578482`, "c" -> 13.5`, "h" -> 1, "mu" ->  $\frac{1}{2}$ ,
      "omega" -> 1, "case" -> "Repulsive", "nbosons" -> 3, "Lambda" -> 2.802964913458758`, "k1" -> 1.6221655857136206`,
      "tau" -> 559.9210257`10.199671769571127 }]}], PlotRange -> {{-5, 20}, {-2, 2}}, Frame -> True,
    PlotLegends -> LineLegend[{"N=2", "N=3"}, LegendLabel -> "Variational", LegendFunction -> "Frame"]
    (*{{"N=1", *} "N=2", "N=3"}*), FrameLabel -> {"c", "e"}, BaseStyle -> Directive[14]],
  ListLinePlot[{"c", "e" / 2} /. E2Exact, PlotStyle -> {Dashed, Black}, PlotLegends -> {"N=2 (Analytic)"}
    (*LineLegend[{"N=2"}, LegendLabel -> "Analytic", LegendFunction -> "Frame" *])]
]}

```

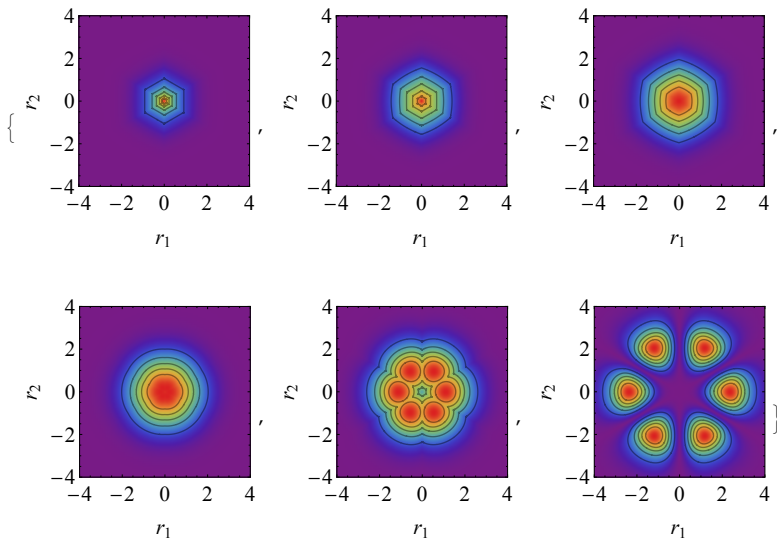


## Densidades de probabilidade

```

ThreeWavefunctionfig = Join[
  Table[
    With[{Δ = "Δ" /. sample3[[i]], c = "c" /. sample3[[i]], k1 = "k1" /. sample3[[i]], ħ = 1, ω = 1, μ = 1/2},
      ContourDensityPlot[Abs[ψfullAtr[r1, r2, k1, c, Δ]]^2, {r1, -4, 4}, {r2, -4, 4}, ColorFunction -> "Rainbow",
        PlotRange -> All, PlotPoints -> 100, MaxRecursion -> 6, Mesh -> None, Exclusions -> None, Contours -> 5,
        FrameLabel -> {"r1", "r2"}, BaseStyle -> Directive[16] (*, PlotLegends -> Automatic*)]
    ], {i, {1, 2, 3}}],
  Table[
    With[{Δ = "Δ" /. sample3[[i]], c = "c" /. sample3[[i]], k1 = "k1" /. sample3[[i]], ħ = 1, ω = 1, μ = 1/2},
      ContourDensityPlot[Abs[ψfullRep[r1, r2, k1, c, Δ]]^2, {r1, -4, 4}, {r2, -4, 4}, ColorFunction -> "Rainbow",
        PlotRange -> All, PlotPoints -> 100, MaxRecursion -> 6, Mesh -> None, Exclusions -> None, Contours -> 5,
        FrameLabel -> {"r1", "r2"}, BaseStyle -> Directive[16] (*, PlotLegends -> Automatic*)]
    ], {i, {4, 5, 6}}]
  ]

```



## Funções de correlação

```
(*Single Particle Density*)
ρ1[data_]:= (NIntegrate[Evaluate[Abs[Ψ[x,"k1","c","Λ"]]2/.SetPrecision[data,100]/.Θrtrans/.rxtrans],{x2,-∞,∞},{x3,-∞,∞},
Method->"MultidimensionalRule",WorkingPrecision->90,PrecisionGoal->4,AccuracyGoal->4])

(*Two Particle Density*)
ρ2[data_]:= (NIntegrate[Evaluate[Abs[Ψ[x,"k1","c","Λ"]]2/.SetPrecision[data,100]/.Θrtrans/.rxtrans],{x3,-∞,∞},
WorkingPrecision->90,PrecisionGoal->40,AccuracyGoal->40])

sample3norm = Table[norm3[sample3[[i]], "c" /. sample3[[i]], {i, 1, Length[sample3]}]
{156.977, 5.82876, 0.000809322, 1135.84, 20 604.5, 2.38089 × 1010}

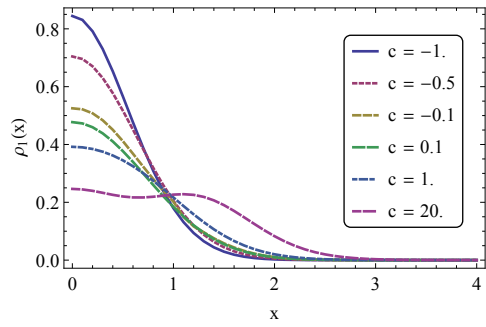
NIntegrate[Evaluate[Abs[Ψ[x,"k1","c","Λ"]]2/.SetPrecision[sample3[[6]], 100]/.Θrtrans/.rxtrans],
{x1,-∞,∞},{x2,-∞,∞},{x3,-∞,∞},Method->"MultidimensionalRule",WorkingPrecision->90,
PrecisionGoal->4,AccuracyGoal->4]/sample3norm[[6]]

$Aborted

ρtab = ParallelTable[{x1, ρ1[sample3[[i]]], sample3norm[[i]]}, {x1, 0, 4, 0.1}, {i, 1, Length[sample3]}, Method->"FinestGrained"]-
ρtab/Map[Apply[Plus, #] &, ρtab]
ρtab[[1]]-[[2]]
4
0.16052

ρtab[[1]]-[[2]]
{0.844393, 0.830846, 0.791544, 0.730374, 0.653052, 0.566178, 0.476318, 0.38915, 0.309021, 0.238698,
0.179478, 0.131436, 0.0937884, 0.0652323, 0.0442289, 0.0292364, 0.0188401, 0.0118353, 0.00724579,
0.00432325, 0.00251336, 0.00142381, 0.000785725, 0.000422669, 0.000221358, 0.000112692, 0.0000561223,
0.0000272637, 0.0000128488, 5.87053 × 10-6, 2.55362 × 10-6, 1.17473 × 10-6, 4.83137 × 10-7, 7.09529 × 10-8,
5.41256 × 10-8, 3.21492 × 10-8, 1.68493 × 10-8, 8.13836 × 10-9, 3.69657 × 10-9, 1.59617 × 10-9, 6.59368 × 10-10}

(*ρtab=Table[{ρtab[[i]]-[[1]],ρtab[[i]]-[[2]]/Total[ρtab[[i]]-[[2]]]-, {i,1,Length[ρtab]}]*)
ListLinePlot[ρtab,
PlotRange->All,Frame->True,FrameLabel->{"x","ρ1(x)"},
PlotStyle->{{Thick},{Thick,AbsoluteDashing[{2,3]}(*Dot*)},{Thick,AbsoluteDashing[{5,3]}(*Dash*)},
{Thick,AbsoluteDashing[{8,3]}(*LongDash*)},{Thick,AbsoluteDashing[{2,3,5,3]}(*Dot-Dash*)},
{Thick,AbsoluteDashing[{5,3,8,3]}(*Dash-LongDash*)}},
PlotLegends->Placed[
LineLegend[("c = "<>ToString[#]) &/@("c" /. sample3),
LabelStyle->Directive[14],
LegendLayout->"Column",
LegendFunction->"Frame"],
{{0.95, 0.9}, {1, 1}},
BaseStyle->Directive[14]]
```



**Tabelas numéricas para o ansatz geométrico**

c	En	$\Lambda$	k1	case	nbosons
-4.81	-22.6181	2.40588	4.81	Attractive	3
-4.61	-20.7325	2.35728	4.61	Attractive	3
-4.41	-18.9267	2.31202	4.41	Attractive	3
-4.21	-17.2006	2.26557	4.21	Attractive	3
-4.01	-15.5542	2.2178	4.01	Attractive	3
-3.81	-13.9874	2.16911	3.81	Attractive	3
-3.61	-12.5001	2.11766	3.61	Attractive	3
-3.41	-11.0923	2.06374	3.41	Attractive	3
-3.21	-9.76366	2.00688	3.21	Attractive	3
-3.01	-8.51412	1.94732	3.01	Attractive	3
-2.81	-7.34335	1.88383	2.81	Attractive	3
-2.61	-6.25098	1.81688	2.61	Attractive	3
-2.41	-5.23649	1.7456	2.41	Attractive	3
-2.21	-4.29916	1.67017	2.21	Attractive	3
-2.01	-3.43797	1.58938	2.01	Attractive	3
-1.81	-2.65159	1.50334	1.81	Attractive	3
-1.61	-1.93825	1.41122	1.61	Attractive	3
-1.41	-1.2958	1.3128	1.41	Attractive	3
-1.21	-0.72172	1.20568	1.21	Attractive	3
-1.01	-0.213258	1.08838	1.01	Attractive	3
-0.81	0.232615	0.955596	0.81	Attractive	3
-0.61	0.61958	0.799552	0.61	Attractive	3
-0.41	0.953019	0.606054	0.41	Attractive	3
-0.21	1.24199	0.353725	0.21	Attractive	3
-0.01	1.5012	0.0191791	0.01	Attractive	3
0.01	1.51194	0.650901	0.987103	Repulsive	3
0.05	1.55897	0.941797	0.992908	Repulsive	3
0.09	1.60483	1.07336	1.00581	Repulsive	3
0.4	1.9234	1.4903	1.11439	Repulsive	3
0.8	2.255	1.73204	1.22299	Repulsive	3
1.2	2.5198	1.88746	1.30194	Repulsive	3
1.6	2.73523	2.00637	1.36023	Repulsive	3
2.	2.91328	2.10219	1.40461	Repulsive	3
2.4	3.06242	2.18096	1.43961	Repulsive	3
2.8	3.18878	2.25122	1.46628	Repulsive	3
3.2	3.29691	2.31	1.48842	Repulsive	3
3.6	3.39025	2.36125	1.50663	Repulsive	3
4.	3.47147	2.40604	1.52184	Repulsive	3
4.4	3.54267	2.44591	1.53446	Repulsive	3
4.8	3.60548	2.48259	1.54469	Repulsive	3
6.	3.7557	2.56902	1.56857	Repulsive	3
8.	3.92369	2.66751	1.5929	Repulsive	3
10.	4.03343	2.73173	1.6073	Repulsive	3
12.	4.11033	2.77603	1.61709	Repulsive	3
14.	4.16706	2.81075	1.62362	Repulsive	3
16.	4.21058	2.83577	1.62883	Repulsive	3
18.	4.24497	2.85703	1.63254	Repulsive	3
20.	4.27283	2.87357	1.63564	Repulsive	3

# Apêndice F

## Trabalhos Publicados

# Referências Bibliográficas

- [1] H. Bethe. *Zeitschrift für Physik A* **71**, 205 (1931)
- [2] C. N. Yang. *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1312 (1967)
- [3] M. Gaudin. *Phys. Lett. A* **24**, 55 (1967)
- [4] B. Sutherland. *Phys. Rev. Lett.* **19**, 103 (1967)
- [5] R. J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, 1982)
- [6] L. D. Faddeev. *Int. J. Mod. Phys. A* **10**, 1845 (1995)
- [7] M. Takahashi. *Thermodynamics of One Dimensional Solvable Models* (Cambridge University Press, 1999)
- [8] V. Bazhnov, S. Lukyanov and A. B. Zamolodchikov. *Commun. Math. Phys.* **177**, 381 (1996)
- [9] E. H. Lieb and W. Liniger. *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963)
- [10] F. H. L. Essler *et al.* *The One-Dimensional Hubbard Model* (Cambridge University Press, 2005)
- [11] C. Kohstall, M. Zaccanti, M. Jag, A. Trenkwalder, P. Massignan, G. M. Bruun, F. Schreck and R. Grimm. *Nature* **485**, 615-618 (2012)
- [12] E. Cornell. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* **101**, 419-434 (1996)
- [13] J. R. Anglin and W. Ketterle. *Nature* **416**, 211 (2002)
- [14] M. H. Anderson *et al.* *Science* **269**, 198 (1995)
- [15] C. C. Bradley *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **75**, 9 (1995)



- [16] K. B. Davies *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **75**, 22 (1995)
- [17] B. De Marco, D. S. Jin. *Science* **10**, 285 (1999)
- [18] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn and D. S. Jin. *Nature* **424**, 47 (2003)
- [19] M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, A. Schirotzek and W. Ketterle. *Nature* **442**, 54 (2006)
- [20] K.E. Strecker, G.B. Partridge, A.G. Truscott e R.G. Hulet. *Nature* **417**, 150 (2002)
- [21] S.L. Cornish, S.T. Thompson and C.E. Wieman. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 170401 (2006).
- [22] M. Greiner, C.A. Regal and D.S. Jin. *Nature* **426**, 537 (2003)
- [23] M.W. Zwierleinn, C.A. Stan, C.H. Schunck, S.M.F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic and W. Ketterle. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 250401 (2003).
- [24] I. Bloch. *Nature Physics* **1**, 23-30 (2005).
- [25] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini and B. E. Granger. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 3 (2004)
- [26] M.Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W.Hänsch, Immanuel Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [27] M. Greiner, Cindy A. Regal, Deborah S. Jin. *Nature* **426**, 537 (2003).
- [28] Guan X. W., Batchelor M. T., Lee C. and Zhou H-Q. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 200401 (2008)
- [29] Fulde P. and Ferrell R. A. *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964)  
Larkin A. I. and Ovchinnikov Yu N. *Sov. Phys.—JETP* **20**, 762 (1965)
- [30] Ottenstein T. B., Lompe T., Kohnen M., Wenz A. N. and Jochim S. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 203202 (2008)
- [31] T. Kinoshita, T. Wenger and D. S. Weiss. *Science* **305**, 1125 (2004)
- [32] Haller et al, *Science* **325**, 1224 (2009)
- [33] Y. Liao, A. Rittner, T. Paprotta, W. Li, G. Patridge, R. Hulet, S. Baur and E. Mueller. *Nature* **467**, 567 (2010)
- [34] P. Wicke, S. Whitlock and N. J. van Druten; *arXiv: 1010.4545*

- [35] Gao Xianlong, Marco Polini, M.P. Tosi, Vivaldo L. Campo, Jr., Klaus Capelle and Marcos Rigol. *arXiv: cond-mat/0403540v2*
- [36] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, S. Jochim. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 075303(2012)
- [37] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz, S. Jochim. *Science* **332**, 6027 (2011)
- [38] D. Blume. *Rep. Prog. Phys.* **75**, 046401 (2012).
- [39] T. Busch, B.-G. Englert, K. Rzazewski, and M. Wilkens. *Found. Phys.* **28**, 549 (1998)
- [40] J.-S. He, A. Foerster, X. W. Guan and M. T. Batchelor. *New J. Phys.* **11**, 073009 (2009)
- [41] S. Jochim private communication
- [42] B. Sutherland, *Beautiful Models* (World Scientific, 2004).
- [43] I. Brouzos, P. Schmelcher. *Phys. Rev. Lett.***108**, 045301 (2012).
- [44] David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall,1994)
- [45] Félix Werner, *Thèse de Doctorat, Université de Paris VI* (2008)
- [46] B. Sutherland. *Phys. Rev. Lett.* **20**, 98 (1968)
- [47] M. T. Batchelor. *Physics Today* **60** 36 (2007)
- [48] X. W. Guan, M. T. Batchelor, C. Lee and M. Bortz. *Phys. Rev. B* **76**, 085120 (2007)
- [49] Z. Idziaszek and T. Calarco. *Phys. Rev. A* **74**, 022712 (2006)
- [50] E.L. Bolda, E. Tiesinga and P.S. Julienne. *Phys. Rev. A* **66** , 013403 (2002)
- [51] E.L. Bolda, E. Tiesinga and P.S. Julienne. *Phys. Rev. A* **68** , 032702 (2003)
- [52] Z. Idziaszek and T. Calarco. *Phys. Rev. A* **71**, 050701(R) (2005)
- [53] J. Viana-Gomes and N. M. R. Peres. *Eur. J. Phys.* **32**, 1377 (2011)
- [54] J. Goold and T. Busch. *Phys. Rev. A* **77**, 063601 (2008)
- [55] Y. Lee, X. W. Guan and M. T. Batchelor. *J. Phys. A* **10**, DOI: 10.1088/1751-8113/44/16/165002

- [56] Ionannis Brouzos, *Tese de Doutorado, Universidade de Hamburgo* (2012)
- [57] I. Brouzos and A. Foerster. *Phys. Rev. A* **89**, 053623 (2014)
- [58] N. Oelkers, M. T. Batchelor, M. Bortz and X. W. Guan. *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 1073 (2006)