

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Tese de Doutorado

Modelos exatamente solúveis para gases ultrafrios

Aluno: Carlos Claiton Noschang Kuhn

Orientadora: Angela Foerster

Este trabalho é dedicado

à minha esposa.

Agradecimentos

- ★ À orientadora Angela Foerster, pela dedicação demonstrada e pelo estímulo constante oferecido e, acima de tudo, pela amizade durante este período.
- ★ Aos colaboradores: X.W. Guan, Murray T. Batchelor e Nicholas Robins, que tiveram uma contribuição muito importante neste trabalho, pela hospitalidade durante o ano que estive na Universidade Nacional Australiana.
- ★ À minha esposa: Bárbara Caroline Colling Kuhn que foi compreensiva em todos momentos que me dediquei a este trabalho.
- ★ Ao Hospital de Aeronáutica de Canoas, em especial ao Sr. Cel. Méd. João Carlos Rodrigues de Azeredo, que deu todo o apoio possível a realização deste trabalho.
- ★ Aos professores e funcionários do IF, que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.
- ★ Ao Centro Nacional de Pesquisa e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior , pelo incentivo a pesquisa.

Muito Obrigado.

Resumo

Modelos exatamente solúveis para gases de férmions e bósons ultrafrios são estudados via o método do ansatz de Bethe termodinâmico. Resultados analíticos e numéricos são obtidos para o gás de Fermi de duas componentes com população de férmions não balanceada no regime atrativo em uma dimensão. Para o modelo de três componentes, soluções numéricas das equações do ansatz de Bethe termodinâmico confirmam que as expressões analíticas para os campos críticos e os diagramas de fases são muito precisas no regime de acoplamento forte. Para o regime de acoplamento fraco, derivamos as expressões analíticas para os campos críticos e os diagramas de fases e encontramos uma concordância muito boa entre os resultados analíticos e numéricos. Também verificamos que a fase triônica é suprimida para o regime de acoplamento fraco. Através de um estudo numérico obtivemos os diagramas de fase em regimes intermediários, e mostramos que a transição entre os regimes forte e fraco ocorre de forma suave ao variar o parâmetro de acoplamento. Apresentamos também um estudo detalhado para o gás de bósons com três componentes, obtendo expressões analíticas para quantidades físicas como densidade de partículas, compressibilidade e magnetização. A criticalidade quântica do modelo também foi investigada.

Abstract

Exactly solvable models of ultracold Fermi and Bose gases are examined via the thermodynamic Bethe Ansatz method. Analytical and numerical results are obtained for the two-component one-dimensional attractive Fermi gas with population imbalance. For the three-component model, numerical solution of the thermodynamic Bethe ansatz equations confirm that the analytical expressions for the critical fields and the resulting phase diagrams at zero temperature are highly accurate in the strong coupling regime. For the weak coupling regime we derive the analytical expressions for the critical fields and the phase diagrams. Interestingly, in the weak regime the trionic phase is suppressed. By means of a numerical study we obtain the phase diagrams at intermediate coupling regimes, showing that the crossover from strong to weak regimes occurs smoothly by varying the coupling parameter. We also present a detailed study of the three component Bose gas and obtain analytical expressions for physical quantities, such as the density of particles, compressibility and magnetisation. The quantum criticality of the model is also investigated.

Sumário

1. Introdução	3
2. Gás de Fermi com duas componentes	13
2.1 O Modelo	14
2.2 Estado fundamental	15
2.3 Formalismo do ansatz de Bethe termodinâmico	16
2.4 Diagrama de fases para o regime de acoplamento forte a $T = 0$	18
2.5 Diagrama de fases para o regime de acoplamento fraco a $T = 0$	21
2.6 ABT para baixas temperaturas	23
2.7 Conclusão	25
3. Gás de Fermi com três componentes	27
3.1 O Modelo	28
3.2 Estado fundamental	29
3.3 Formalismo do ansatz de Bethe termodinâmico	31
3.4 Diagrama de fases para o regime de acoplamento forte	34
3.5 Diagrama de fases para o regime de acoplamento fraco	36
3.6 Regime intermediário	38
3.7 Conclusão	39
4. Gás de bósons com três componentes	43
4.1 O Modelo	44
4.2 Estado fundamental	45
4.3 Formalismo do ansatz de Bethe termodinâmico	47

4.4	Diagrama de fases para $T = 0$	48
4.5	Equação de estado	52
4.5.1	Baixas temperaturas	52
4.5.2	Função polilogarítmica	54
4.6	Criticalidade quântica	55
4.6.1	Análise utilizando o potencial químico μ	58
4.6.2	Análise utilizando o campo magnético externo	62
4.7	Potencial harmônico e ADL	65
4.8	Conclusão	67
5.	Desenvolvimento Experimental	71
5.1	Introdução	72
5.2	Sistema de vácuo	72
5.3	Armadilhas ópticas magnéticas	74
5.3.1	Evaporação na armadilha magnética	75
5.4	Armadilha óptica dipolar	76
5.4.1	Evaporação na armadilha óptica	77
5.5	Redes em gases ultrafrios	78
5.5.1	Configuração dos feixes de laser	83
5.6	Conclusão	83
6.	Conclusões e perspectivas	85
6.1	Conclusão e perspectivas	86
6.2	Publicações	88
Referências		89

Capítulo 1

Introdução

Nos últimos anos, gases de átomos ultrafrios têm despertado grande interesse por suas diversas aplicações e por possibilitar a investigação de uma nova classe de sistemas quânticos. Quando as partículas desses gases são bôsons, ou seja, pertencem ao conjunto de partículas com “spin” inteiro, elas podem ocupar o mesmo estado quântico. Quando temos um gás composto por partículas bosônicas podemos observar o fenômeno conhecido como Condensação de Bose-Einstein (CBE). No lado esquerdo da Fig. 1.1 apresentamos um diagrama esquemático mostrando a formação de um CBE em uma armadilha feita por um potencial harmônico. O fenômeno da condensação de bôsons foi previsto teoricamente em 1924 por Albert Einstein [1, 2]. Essa descoberta surpreendente é uma consequência da estatística de Bose [3]. Posteriormente, este fenômeno receberia o nome de Condensados de Bose-Einstein em homenagem a estes dois cientistas. Desde a previsão teórica até a realização experimental em 1995, obtida por [4–6] usando vapores de átomos do grupo dos metais alcalinos ^{87}Rb , ^7Li e ^{23}Na , foram necessários muitos anos de estudo e aprimoramento das técnicas utilizadas nos laboratórios.

Por outro lado, quando as partículas possuem “spin” semi-inteiros são denominadas de férmons. Essas partículas respondem ao princípio de exclusão de Pauli que diz que nunca dois férmons idênticos podem ocupar o mesmo estado quântico. O lado direito da Fig. 1.1 mostra um gás de férmons com duas componentes, neste caso temos férmons com “spin” para cima e com “spin” para baixo, onde os férmons não podem ocupar o mesmo estado quântico, ou seja, só é possível ter dois férmons no mesmo nível de energia quando esses possuem “spins” diferentes. Quando se preenche todos os estados quânticos possíveis até o último nível de energia, obtém-se um gás de Fermi degenerado. A esse nível denominamos como nível de Fermi e sua energia associada recebe o nome de Energia de Fermi.

O primeiro gás de Fermi degenerado foi obtido em 1999 [8] utilizando átomos de ^{40}K . Este mesmo grupo, aprimorando as técnicas experimentais, obteve o primeiro condensado molecular em um gás de férmons degenerado ultrafrio em 2003 utilizando-se da ressonância de Feshbach [9]. Posteriormente a condensação de pares fermiônicos foi detectada [10] e considerada uma fase superfluída [11]. Teoricamente, podemos pensar nos condensados fermiônicos como sendo formados pela condensação dos chamados pares de Cooper da teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS). Estes pares são formados por uma ligação fraca de

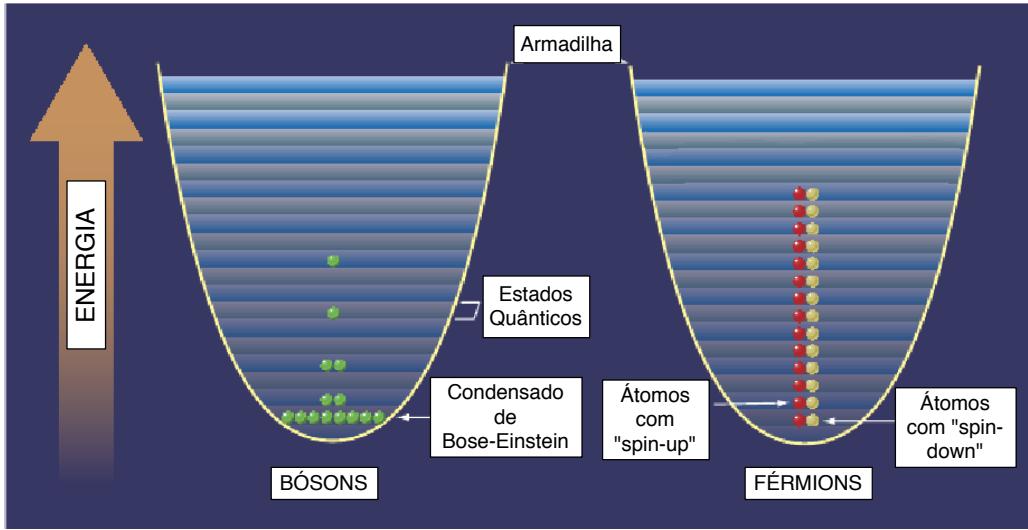


Fig. 1.1: Diagrama mostrando a diferença entre partículas bosônicas e fermiônicas. À medida que a temperatura diminui, os bósons tendem a ocupar o mesmo estado quântico enquanto os férmiões tendem a preencher os estados de mais baixa energia de acordo com o Princípio de Pauli. Figura editada de [7]

dois férmiões por efeito coletivo. A Fig. 1.2 ilustra a formação do primeiro condensado fermiônico utilizando um gás de férmiões degenerado.

Neste contexto, uma questão importante que surgiu foi sobre a possibilidade de ainda termos a superfluidez em um gás de Fermi polarizado. Dizemos que um gás de férmiões é polarizado quando o número de férmiões em determinado estado é maior que o do outro estado possível. O lado direito da Fig. 1.3, por exemplo, nos mostra um caso em que a população de férmiões com o “spin” para cima (N_{\uparrow}) é superior a população de férmiões com “spin” para baixo (N_{\downarrow}) fazendo com que a polarização, definida por $P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}$, seja diferente de zero. Em princípio, a superfluidez pode ainda persistir neste caso, e para explicar isso, diversas teorias, com fases exóticas e pareamentos não usuais foram propostas. Uma destas fases exóticas é conhecida como fase FFLO, em homenagem a seus criadores Fulde, Ferrel, Larkin e Ovchinnikov [12]. A idéia básica aqui é que ocorre a formação de pares com momento finito.

Diversos grupos experimentais, como por exemplo o grupo do Prof. Hulet [13, 14] e do

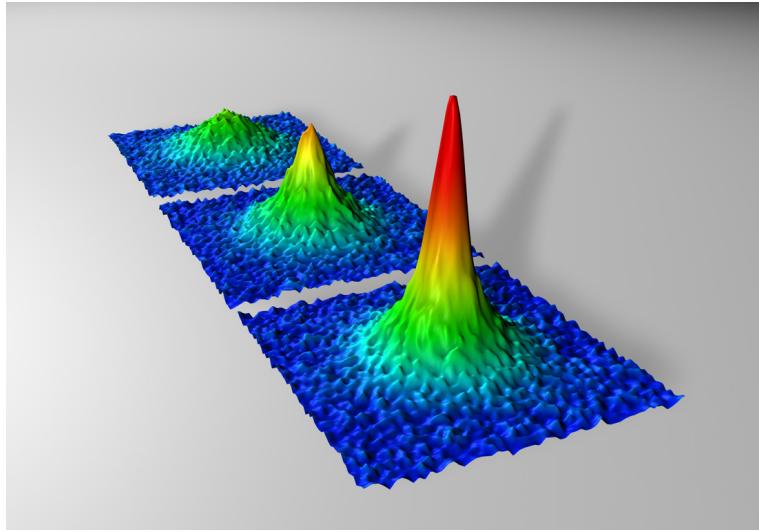


Fig. 1.2: Imagens de “tempo de vôo” mostrando a formação de um condensado fermiônico.
Figura extraída de [10].

Prof. Ketterle [15], têm procurado esta nova fase FFLO utilizando gases de férmiôns degenerados ultrafrios com polarização diferente de zero. O resultado básico dos experimentos em três dimensões (3D) foi a observação de duas fases: uma fase superfluida totalmente pareada do tipo BCS e uma fase totalmente polarizada. Assim, em 3D, a fase FFLO não foi observada experimentalmente.

Por outro lado, experimentos em uma dimensão (1D) têm sido realizados com gases de Fermi polarizados [16]. Na obtenção dos tubos unidimensionais, normalmente são utilizados dois feixes de luz não interagentes cruzados formando um ângulo de 90° , onde cada feixe é refletido 180° , formando assim uma onda estacionária com a metade do comprimento de onda do feixe de luz. Esse arranjo experimental faz com que os férmiôns sejam confinados em tubos com tunelamento desprezível entre si. A figura 1.4 ilustra a obtenção destes tubos e a disposição das partículas no interior de cada tubo. Maiores detalhes experimentais podem ser encontrados em [16]. Esse experimento tem como resultado básico a observação de três fases: uma fase parcialmente polarizada tipo FFLO, uma fase completamente pareada tipo BCS e uma fase totalmente polarizada.

Estes resultados estão de acordo com as previsões teóricas onde se utiliza o método do ansatz de Bethe, em que a fase parcialmente polarizada encontrada pode ser considerada

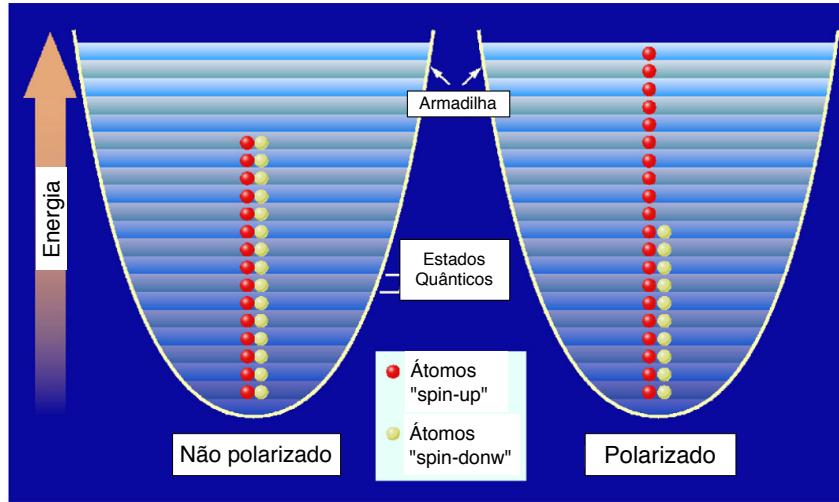


Fig. 1.3: Diagrama exemplificando a diferença entre um gás de Fermi não polarizado (à esquerda), onde o número de férmions com spin para cima é igual ao número de férmions com spin para baixo, de um gás de Fermi polarizado (à direita), onde o número de férmions com spin para cima é superior ao número de férmions com spin para baixo. Figura extraída de [7].

como o análogo 1D do estado FFLO [16]. Este estado ocupa uma fração considerável do diagrama de fase, como mostrado na Figura 2.2 desta tese.

Devido ao sucesso obtido nos experimentos recentes envolvendo o gás de Fermi de duas componentes em 1D, os pesquisadores estão investigando agora gases de férmions com três componentes, o que possibilita o estudo de diferentes fases [17–21]. Um dos objetivos destes experimentos é verificar se é possível unir três espécies atômicas fermiônicas distintas, formando assim o que está sendo chamado como “trion” ou fase triônica. Em particular, a observação direta de um “trion” utilizando os três níveis de energia mais baixos do átomo de ${}^6\text{Li}$ foi realizada por diferentes grupos [20, 22]. A existência dessa fase é previda pelo modelo teórico de um gás de Fermi de três componentes, o que será visto em detalhes neste trabalho.

Por outro lado a realização de experimentos utilizando-se bósons confinados em tubos

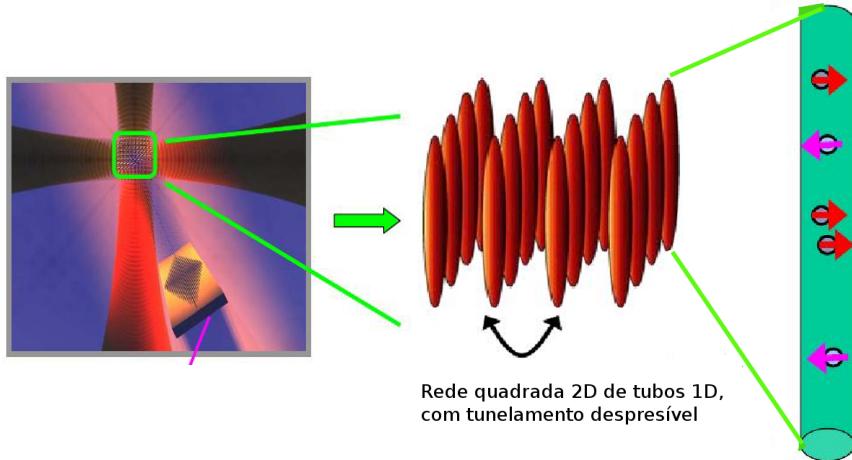


Fig. 1.4: Diagrama ilustrando a formação das redes 2D para obtenção dos tubos unidimensionais de um gás de fermions com duas componentes.

unidimensionais também tem sido aprimorada e vem sendo de grande interesse na comunidade científica. Apenas para citar alguns exemplos, foram criados CBE em tubos 1D utilizando átomos de ^{87}Rb pelo grupo do Weiss [23] e átomos de Cs pelo grupo do Haller [24]. Neste contexto, cabe ressaltar também a realização experimental em 1D do gás de Tonks-Girardeau [25, 26] por Paredes e colaboradores [27] (ver também [23]). Posteriormente, gases de bósons com estrutura hiperfina (duas componentes) foram também realizados experimentalmente em tubos 1D pelo grupo do Professor van Druten [28]. Neste caso, resultados experimentais como perfis de densidade e dinâmica foram explicados pelo ansatz de Bethe [29]. Neste cenário, o próximo passo seria a realização experimental de gases de bósons com três componentes em tubos unidimensionais. Para estes sistemas, já existem previsões teóricas para diagramas de fases e perfis de densidades [30–33], estudados através do Ansatz de Bethe Termodinâmico (ABT), discutidos nos capítulo 4.

Do ponto de vista teórico, a busca por modelos matemáticos que descrevam e sirvam como guias para os experimentos realizados com gases ultrafrios obtidos nos laboratórios está cada vez maior. Um destes métodos é o ansatz de Bethe, criado por Hans Bethe em 1931 para encontrar os autovalores e autovetores do Hamiltoniano do modelo de Heisenberg unidimensional [34]. Desde então, o método tem sido aprimorado e generalizado para diver-

sos outros modelos integráveis. Entre estes, os modelos com interação do tipo δ vêm tendo um grande destaque e são o principal assunto desta tese. Em particular, iremos estudar diferentes aspectos e propriedades físicas dos seguintes modelos exatamente solúveis:

- Gás de Fermi com duas componentes;
- Gás de Fermi com três componentes;
- Gás de bôsons com três componentes.

No capítulo 2 vamos estudar o modelo exatamente solúvel do gás de Fermi de duas componentes e interação δ , descrito pelo Hamiltoniano [43, 44] :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) - \frac{1}{2} H(N_\uparrow - N_\downarrow)$$

Acima o primeiro termo é associado a energia cinética das partículas, o segundo corresponde à interação entre as partículas, onde g_{1D} é a constante de acoplamento em 1D. O sistema pode variar de fortemente atrativo ($g_{1D} \rightarrow -\infty$) a fortemente repulsivo ($g_{1D} \rightarrow +\infty$). Experimentalmente este valor é controlado via ressonância de Feshbach. Pare esse modelo iremos nos concentrar no regime atrativo, uma vez que este caso é de interesse experimental. O último termo corresponde a energia de Zeeman, sendo H o campo magnético externo aplicado ao sistema e $N_\uparrow(N_\downarrow)$ o número de férmons com “spin” para cima (baixo). Este Hamiltoniano descreve N férmons de massa m com duas componentes, isto é, com “spin” para cima e para baixo, com interação do tipo delta em uma linha unidimensional de comprimento L . Estudaremos os diagramas de fases deste modelo nos regimes de acoplamento forte e fraco através do ABT [35–37].

Posteriormente no capítulo 3, estenderemos as técnicas matemáticas aqui utilizadas para o modelo exatamente solúvel do gás de Fermi com três componentes em 1D, também com interação do tipo delta [38]. O modelo é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) + E_z \quad (1.1)$$

que tem uma interpretação semelhante ao caso anterior, mas agora existem três possíveis estados hiperfinos para os férmons, que podem ser acessados por dois campos externos contidos no termo de Zeeman E_z (maiores detalhes no capítulo 3). O diagrama de fases e os campos críticos do modelo, no regime de acoplamento forte, foram obtidos em [39]. Em particular, mostrou-se que o diagrama de fases neste regime de acoplamento forte é muito rico, exibindo novas fases, como a fase triônica. Esta fase é definida como um estado ligado de três férmons [17,19,40]. Neste capítulo nós vamos resolver numericamente as equações do ABT para este modelo, confirmando os diagramas obtidos em [39]. Também vamos mostrar como as fronteiras que separam as diferentes fases se deformam ao variar o parâmetro de acoplamento g_{1D} do regime fortemente acoplado ao regime fracamente acoplado [38]. Também vamos obter analiticamente o diagrama de fases para o caso de acoplamento fraco e mostrar que a fase triônica desaparece neste regime.

No capítulo 4 estudaremos um modelo que descreve um gás de bósons de massa m com “spin-1 que podem ser encontrados em três estados hiperfinos diferentes, confinados em tubos de comprimentos L , descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i < j} [c_0 + c_2 F_i \cdot F_j] \delta(x_i - x_j) + E_z.$$

Acima, o primeiro termo é associado a energia cinética das partículas. O segundo e terceiro termos correspondem a uma interação do tipo δ entre os bósons e a uma interação de troca de “spin”, respectivamente, onde F_i são os operadores spin-1 e c_0 e c_2 são os parâmetros de interação em 1D. Para o caso $c_0 = c_2 = c$, foi mostrado em [30] que o modelo é exatamente solúvel pelo método do ansatz de Bethe. Para esse modelo, teremos como objetivo apresentar o diagrama de fases e estudar a criticalidade quântica no regime de temperaturas finitas nas redondezas dos pontos críticos [41], utilizando o ABT. Iremos também considerar o modelo numa armadilha harmônica através da Aproximação de Densidade Local (ADL) [42] acoplada ao ABT.

Para complementar a tese, vamos apresentar também alguns aspectos relevantes no contexto de experimentos envolvendo átomos ultrafrios em tubos unidimensionais no capítulo 5.

No capítulo 6 apresentaremos as conclusões e perspectivas do trabalho.

Parte dos resultados obtidos nos capítulos dois, três, quatro e cinco são originais e constituem a contribuição do autor para a área.

Capítulo 2

Gás de Fermi com duas componentes

2.1 O Modelo

Nós consideramos um sistema de N férmons com spin-1/2 e massa m que estão alocados em uma linha de comprimento L , com condições de contorno periódicas. O Hamiltoniano pode ser escrito como [43, 44]

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) - \frac{1}{2} \mu_B H (N_\uparrow - N_\downarrow) \quad (2.1)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano está associado a energia cinética entre os férmons. O segundo termo corresponde a interação entre os férmons, que é uma interação de contato tipo δ . A interação de acoplamento g_{1D} pode variar desde fortemente atrativa ($g_{1D} \rightarrow -\infty$) até fortemente repulsiva ($g_{1D} \rightarrow +\infty$). Nesta tese vamos nos concentrar no caso atrativo apenas, uma vez que este caso é de interesse experimental. Em termos de notação, utilizaremos também as variáveis $c = mg_{1D}/\hbar^2$ e $\gamma = c/n$, onde $n = N/L$ é a densidade linear, para denotar a interação de acoplamento entre componentes.

O último termo denota a energia de Zeeman, onde N_\uparrow (N_\downarrow) é o número de férmons com spin para cima (número de férmons com spin para baixo), determinado pelo momento magnético μ_S e o campo magnético H .

O Hamiltoniano (2.1), que exibe uma simetria $SU(2)$ na ausência de campo externo, foi resolvido nos anos sessenta por Yang [43] e Gaudin [44] através do ansatz de Bethe, que consiste essencialmente em considerar a função de onda do sistema como uma combinação de ondas planas do tipo

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{P,Q} A_{Q_1, \dots, Q_N}(P|Q) \exp(i \sum_j k_{P_j} x_{Q_j}) \quad (2.2)$$

onde P e Q são os índices de permutação de momento e posição respectivamente e $A_{Q_1, \dots, Q_N}(P|Q)$ são coeficientes a serem determinados através de condições físicas como simetria, periodicidade, entre outros (maiores informações podem ser encontradas em [43, 48]). Atuando com o Hamiltoniano (2.1) na função de onda (2.2) obtem-se o espectro de energias do modelo, que é dado em termos dos quase-momentos $\{k_i\}$ dos férmons através de

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N k_j^2, \quad (2.3)$$

satisfazendo o seguinte conjunto de equação acopladas do ansatz de Bethe (EAB).

$$\begin{aligned} \exp(i k_j L) &= \prod_{\ell=1}^M \frac{k_j - \Lambda_\ell + i c/2}{k_j - \Lambda_\ell - i c/2}, \\ \prod_{\ell=1}^N \frac{\Lambda_\alpha - k_\ell + i c/2}{\Lambda_\alpha - k_\ell - i c/2} &= - \prod_{\beta=1}^M \frac{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + i c}{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - i c} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Aqui $j = 1, \dots, N$, $\alpha = 1, \dots, M$, sendo M o número de férmons com spin para baixo. Acima $\{\Lambda_\alpha\}$ são as variáveis associadas aos graus de liberdade internos de spin do sistema. Assim, cada conjunto $\{k_j\}$ e $\{\Lambda_\alpha\}$, soluções das EAB acima, parametriza um autovetor do modelo com energia (2.3). As soluções das EAB nos dão informações sobre o estado fundamental e as excitações elementares do Hamiltoniano (2.1). Por simplicidade usaremos $\hbar = 2m = \mu_B = 1$ em nossas análises.

2.2 Estado fundamental

A distribuição das raízes das EAB (2.4) no plano complexo para o estado fundamental foi estudada recentemente em [45, 46]. Basicamente, mostrou-se que a configuração dos quase-momentos $\{k\}$ no plano complexo para o estado fundamental envolve estados ligados (férmons pareados ou pares de Cooper) e férmons não-pareados. Um exemplo típico é apresentado na Fig. 2.1. Este tipo de configuração irá originar, no limite termodinâmico, densidades de férmons pareados e não-pareados.

No regime de acoplamento forte, isto é, $L|c| \gg 1$, a parte imaginária dos quase-momentos para os férmons pareados é proporcional à $c/2$. Sendo assim os quase-momentos para os férmons pareados assumem a forma $k_j = \Lambda_j \pm \frac{ic}{2}$. Neste regime, a energia de ligação dos pares é $\epsilon_b = \hbar^2 n^2 \gamma^2 / 4m$. Utilizando esta configuração para as raízes das EAB e substituindo na expressão (2.3), encontramos a seguinte expressão para a energia do estado fundamental por unidade de comprimento [45].

$$\frac{E}{L} \approx \frac{\hbar^2 n^3}{2m} \left\{ -\frac{(1-P)\gamma^2}{4} + \frac{P^3 \pi^2}{3} \left[1 + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} \right] + \frac{\pi^2 (1-P)^3}{48} \left[1 + \frac{(1-P)}{|\gamma|} + \frac{4P}{|\gamma|} \right] \right\} \quad (2.5)$$

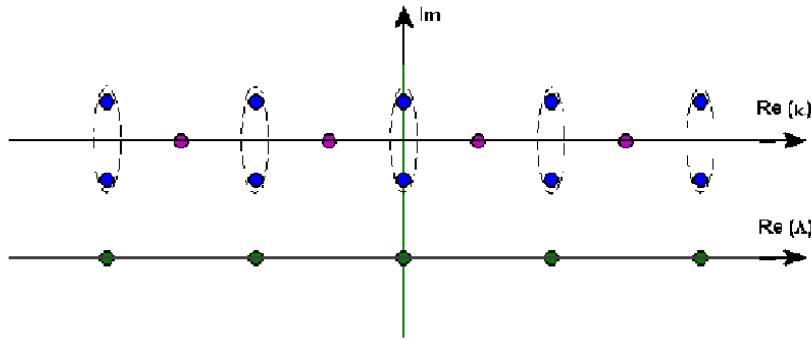


Fig. 2.1: Distribuição das raízes das EAB no plano complexo para um sistema com $N = 14$ e $M = 5$. Podemos observar a existência de $N - 2M$ férmons não-pareados e de $2M$ férmons pareados.

onde $P = (N_\uparrow - N_\downarrow)/N = (N - 2M)/N$ é a polarização.

No regime de acoplamento fraco, isto é, $L|c| \ll 1$, a parte imaginária dos quase-momentos para os férmons pareados é proporcional à $\sqrt{|c|/L}$. Neste regime, a energia de ligação dos pares é $\epsilon_b = \hbar^2 n |\gamma| / mL$. Usando esta configuração para as raízes EAB e substituindo na expressão (2.3) a energia do estado fundamental é dada em unidades de comprimento por (ver [45] para maiores detalhes)

$$\frac{E}{L} \approx \frac{\hbar^2 n^3}{2m} \left(-\frac{|\gamma|}{2}(1 - P^2) + \frac{\pi^2}{12} + \frac{\pi^2}{4} P^2 \right) \quad (2.6)$$

Podemos observar que a energia de ligação dos pares é proporcional à γ^2 no caso fortemente atrativo e, é proporcional à $|\gamma|$ no caso fracamente atrativo.

Estas expressões de energia para o estado fundamental serão utilizadas posteriormente na construção dos diagramas de fases do modelo.

2.3 Formalismo do ansatz de Bethe termodinâmico

O ansatz de Bethe termodinâmico (ABT) é um método potente e elegante que permite estudar as propriedades termodinâmicas e as transições de fases quânticas em sistemas integráveis em 1D. Em particular, também é um método muito eficiente para se determinar

o diagrama de fases a temperatura zero, que é o nosso objetivo para este modelo. Este método foi originalmente proposto por Yang e Yang [47] para um gás de bósons, tendo recebido importantes contribuições por Takahashi e outros [48–50]. A idéia básica do método é que no limite termodinâmico, isto é, $N, L \rightarrow \infty$ com N/L finito, nós podemos considerar uma distribuição contínua para as raízes das EAB (2.4). O estado de equilíbrio pode ser obtido pela condição de minimização da energia livre de Gibbs G ,

$$\frac{G}{L} = \frac{E}{L} - Hm^z - \mu n - Ts, \quad (2.7)$$

onde m^z é a magnetização por unidade de comprimento, μ é o potencial químico, T a temperatura e s é a entropia por unidade de comprimento do sistema [51].

Este procedimento dá origem a um conjunto de equações não lineares acopladas, as equações do ABT, para as variáveis ϵ^b , ϵ^u , que se originam das densidades de férmons pareados e não-pareados, respectivamente,

$$\begin{aligned} \epsilon^b(k) &= 2(k^2 - \mu - \frac{1}{4}c^2) + Ta_2 * \ln(1 + e^{-\epsilon^b(k)/T}) + Ta_1 * \ln(1 + e^{-\epsilon^u(k)/T}), \\ \epsilon^u(k) &= (k^2 - \mu - \frac{1}{2}H) + Ta_1 * \ln(1 + e^{-\epsilon^b(k)/T}) - T \sum_{m=1}^{\infty} a_n * \ln(1 + \eta_n^{-1}(k)), \\ \ln(\eta_n(\lambda)) &= \frac{nH}{T} + a_n * \ln(1 + e^{-\epsilon^u(k)/T}) + \sum_{m=1}^{\infty} T_{nm} * \ln(1 + \eta_m^{-1}(\lambda)), \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde temos que “*” é a convolução $(f * g)(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda - \lambda')g(\lambda')d\lambda'$ e a função η_n está relacionada as densidades de “n-strings” na hipótese de Takahashi (ver [48] para maiores detalhes técnicos). A função $T_{nm}(\lambda)$ é dada por [48]

$$T_{nm}(k) = \begin{cases} a_{|n-m|}(k) + 2a_{|n-m|+2}(k) + 2a_{|n-m|+4}(k) + \dots \\ + 2a_{n+m-2}(k) + a_{n+m}(k) & \text{para } n \neq m, \\ 2a_2(k) + 2a_4(k) + \dots + 2a_{2n-2}(k) + a_{2n}(k) & \text{para } n = m, \end{cases} \quad (2.9)$$

onde

$$a_n(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{n|c|}{(nc/2)^2 + x^2} \quad (2.10)$$

No limite $T \rightarrow 0$ as equações do ABT acima podem ser escritas como (ver [48–50] para mais detalhes)

$$\begin{aligned}\epsilon^b(\Lambda) &= 2(\Lambda^2 - \mu - \frac{1}{4}c^2) - \int_{-B}^B a_2(\Lambda - \Lambda')\epsilon^b(\Lambda')d\Lambda' \\ &\quad - \int_{-Q}^Q a_1(\Lambda - k)\epsilon^u(k)dk, \\ \epsilon^u(k) &= (k^2 - \mu - \frac{1}{2}H) - \int_{-B}^B a_1(k - \Lambda)\epsilon^b(\Lambda)d\Lambda\end{aligned}\tag{2.11}$$

Os limites de integração B e Q caracterizam espécies de “superfícies de Fermi” dos pares ligados e dos férmiões não-pareados, respectivamente e são determinadas usando as condições $\epsilon^b(\pm B) = 0$ e $\epsilon^u(\pm Q) = 0$. A energia livre de Gibbs (ver [48] para maiores explicações) pode ser escrita em termos das variáveis ϵ^b e ϵ^u como

$$\frac{G(\mu, H)}{L} = \frac{1}{\pi} \int_{-B}^B \epsilon^b(\Lambda)d\Lambda + \frac{1}{2\pi} \int_{-Q}^Q \epsilon^u(k)dk,\tag{2.12}$$

a partir das quais, quantidades físicas de interesse, como a densidade de férmiões e a magnetização são obtidas através das relações

$$-\frac{\partial G/L}{\partial \mu} = n, \quad -\frac{\partial G/L}{\partial H} = m^z.\tag{2.13}$$

Este conjunto de equações pode ser resolvido analiticamente em alguns limites especiais, como os regimes de acoplamento forte e fraco [35, 36]. Estas esquações também podem ser resolvidas numericamente para determinar o diagrama de fases do modelo a temperatura zero para qualquer valor de acoplamento.

2.4 Diagrama de fases para o regime de acoplamento forte a $T = 0$

O conjunto de equações (2.11), (2.10), (2.12) e (2.13) foi resolvido em [35, 36] para o caso de acoplamento forte, utilizando expansões para valores pequenos de $1/|c|$ e métodos iterativos.

Aqui, utilizamos um método alternativo de obter o diagrama de fases e os campos críticos do modelo utilizando a energia do estado fundamental (2.5) obtida resolvendo as EAB. Para obter a forma explícita do campo magnético em termos da polarização, da densidade e do acoplamento, nós consideramos a expressão

$$\frac{E}{L} = \mu n + \frac{G}{L} + Hm^z, \quad (2.14)$$

com a energia (2.5) derivada através das EAB discretas (2.4) no regime de acoplamento forte. Então o campo H pode ser determinado através da relação

$$H = \frac{\partial E/L}{\partial m^z}, \quad (2.15)$$

Nós encontramos

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left\{ \frac{\gamma^2}{2} + 2P^2 \pi^2 \left[1 + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} \right] - \frac{8\pi^2 P^3}{3|\gamma|} \right\} \\ &- \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left\{ \frac{\pi^2(1-P)^2}{8} \left[1 + \frac{(1-P)}{|\gamma|} + \frac{4P}{|\gamma|} \right] - \frac{\pi^2(1-P)^3}{8|\gamma|} \right\}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Esta equação determina o diagrama de fases e os campos críticos ativados pelo campo H . Os valores críticos dos campo externos são dados por

$$\begin{aligned} H_{c1} &= \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left\{ \frac{\gamma^2}{2} - \frac{\pi^2}{8} \right\} \\ H_{c2} &= \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left\{ \frac{\gamma^2}{2} + 2\pi^2 \left(1 - \frac{4}{3|\gamma|} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Estes resultados para H_{c1} e H_{c2} são obtidos da eq. (2.16) usando para a polarização os valores $P = 0$ e $P = 1$, respectivamente, e coincidem com os campos críticos obtidos em [35, 36]. Estes campos críticos podem ser fisicamente interpretados como separando três fases quânticas distintas: (i) para $H < H_{c1}$, pares ligados populam o estado fundamental, (ii) para $H > H_{c2}$ temos a ocorrência de uma fase completamente ferromagnética, e (iii) para valores intermediários $H_{c1} < H < H_{c2}$, uma fase mista onde férmons pareados e não-pareados ocorre.

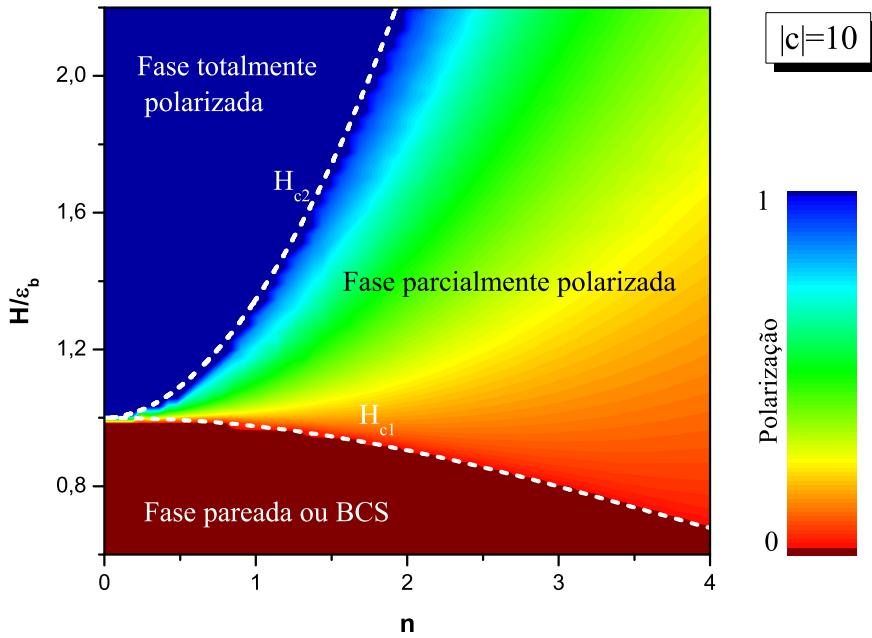


Fig. 2.2: Campo H/ϵ_b vs a densidade n para o caso de interação forte $|c| = 10$ para diferentes valores de polarização (em cores).

A Figura 2.2 mostra o diagrama de fases no plano $n - H$ para um valor particular $|c| = 10$. As linhas tracejadas são graficadas das equações (2.17). As fases coloridas são obtidas por integração numérica das equações (2.11). Podemos observar que os resultados analíticos coincidem com as fronteiras dos resultados numéricos.

Aqui fica claro que o sistema exibe três fases quânticas: uma fase totalmente pareada com polarização zero, conhecida como BCS; uma fase totalmente polarizada, com polarização $P = 1$, conhecida como fase normal; e uma fase mista ou parcialmente polarizada, composta de pares tipo BCS e férmons não-pareados. A fase mista pode ser considerada como um análogo 1D da fase FFLO [52–55]. A Fig. 2.3 mostra um esquema das três fases encontradas utilizando o ansatz de Bethe para o gás de Fermi de duas componentes em 1D. Assim, este modelo integrável prevê três fases distintas, uma fase BCS, uma fase FFLO e uma fase normal.

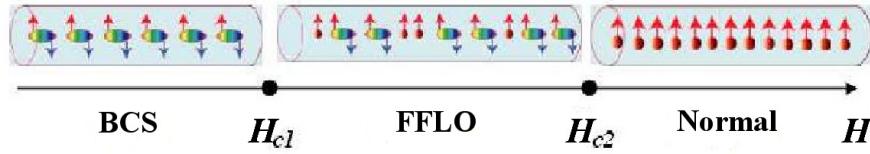


Fig. 2.3: Diagrama esquemático mostrando as possíveis fases do gás de fermions com duas componentes: a fase BCS, onde o estado fundamental é formado por fermions pareados ou pares de Cooper; a fase FFLO, onde temos uma mistura entre pares de Cooper e fermions não pareados; e a fase normal, também conhecida como totalmente polarizada.

Essas previsões foram recentemente verificadas por observações experimentais feitas pelo grupo do Prof. R. Hulet [16] em átomos de 6Li em uma configuração de tubos 1D.

2.5 Diagrama de fases para o regime de acoplamento fraco a $T = 0$

Neste regime nós empregamos as mesmas técnicas do caso anterior para extrair a expressão entre o campo magnético, a polarização, a densidade e o acoplamento. Usando as equações (2.6) e (2.15) nós encontramos

$$H = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} (\pi^2 P + 2|\gamma|P) \quad (2.18)$$

Esta equação (2.18) determina completamente o diagrama de fases e o campo crítico, dado por

$$H_c = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \{ \pi^2 + 2|\gamma| \} \quad (2.19)$$

A Figura 2.4 mostra o diagrama de fases no plano $n - H$ para um valor particular $|c| = 1$. A linha tracejada é graficada da equação (2.19). As fases coloridas são obtidas por integração numérica das equações (2.11). Os resultados analíticos coincidem com as fronteiras dos resultados numéricos.

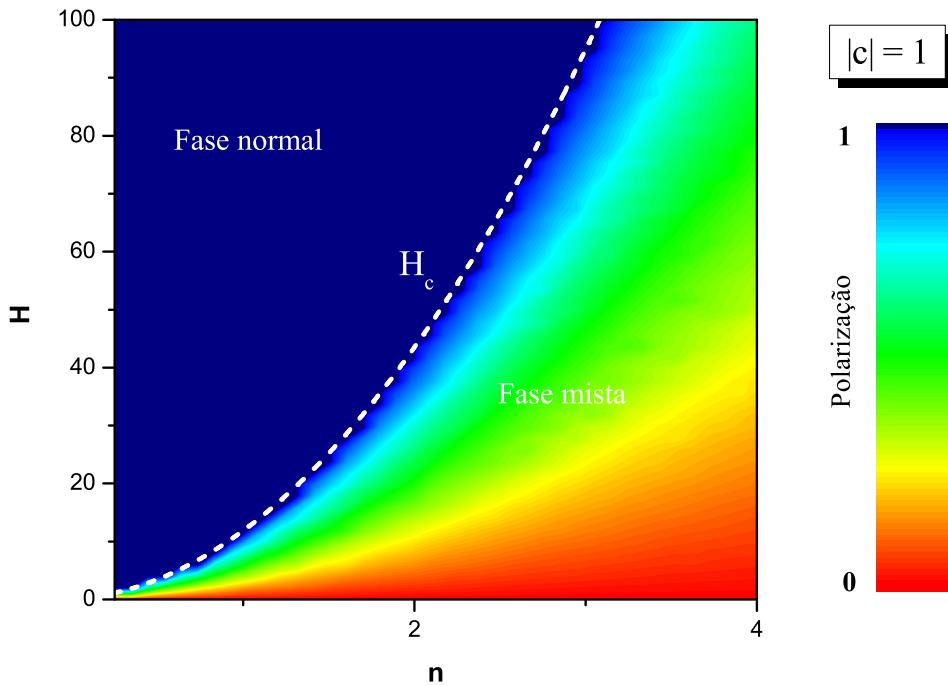


Fig. 2.4: Diagrama de fase para o valor de acoplamento fraco $|c| = 1$.

Agora no regime de acoplamento fraco existem somente duas fases diferentes: a fase mista onde coexistem férmiões pareados tipo BCS e férmiões não-pareados e a fase normal ou ferromagnética. A fase totalmente pareada para o estado fundamental somente ocorre na ausência de campo externo. Quando $H \geq H_c$ a fase totalmente polarizada, $P = 1$ ocorre. Pares e férmiões não-pareados coexistem na região $0 < H < H_c$, como podemos ver na Figura 2.4. Em comparação ao caso anterior de acoplamento forte, nós podemos observar o desaparecimento da fase puramente pareada na presença do campo. Isto ocorre porque a fase BCS é instável frente a flutuações quânticas.

2.6 ABT para baixas temperaturas

Para resolver o conjunto de equações do ansatz de Bethe termodinâmico (2.8) para temperaturas finitas, nós podemos fazer uma expansão em termos de funções polilogaritímicas [56]. Esta aproximação pode ser aplicada para problemas de muitos corpos em uma dimensão tanto em regimes atrativos quanto repulsivos.

Para $H \gg k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann, nós podemos ignorar pequenas correções exponenciais das flutuações de “spin”, levando em considerações somente termos até ordem de $1/\gamma^2$ nas equações (2.8), resultando em

$$\begin{aligned}\epsilon^b(k) &\approx 2k^2 - 2 \left[\mu + \frac{1}{4}c^2 - \frac{1}{2|c|}(p^b(T, H) + 4p^u(T, H)) \right] \\ \epsilon^u(k) &\approx k^2 - \mu - T \ln \left(2 \cosh \left(\frac{H}{2T} \right) \right) + \frac{2}{|c|}p^b(T, H) + \frac{J}{4}(1 - B^2) - \frac{3J^2}{32k_B T}(1 - B^4)\end{aligned}\quad (2.20)$$

onde nós denotamos $B = \tanh(H/2T)$ e $J = (2/|c|)p^u(T, H)$, sendo p^u e p^b as pressões para partículas não ligadas e pares respectivamente. Resolvendo por integração por partes se obtém as pressões

$$\begin{aligned}p^b(T, H) &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi^2 \hbar^2 / 2m}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{1 + e^{(\epsilon - A^b(T, H))/k_B T}}, \\ p^u(T, H) &= \frac{1}{\sqrt{\pi^2 \hbar^2 / 2m}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{1 + e^{(\epsilon - A^u(T, H))/k_B T}}.\end{aligned}\quad (2.21)$$

As integrais em (2.21) podem ser explicitamente calculadas usando a expansão de Sommerfeld para baixas temperaturas. Aqui nós estamos supondo que existem pares de férmons com um potencial de corte $A^b(T, H)/2$ e férmons não pareados com potencial de corte $A^u(T, H)$:

$$\begin{aligned}A^b(k) &= 2 \left[\mu + \frac{1}{4}c^2 - \frac{1}{2|c|}(p^b(T, H) + 4p^u(T, H)) \right] \\ A^u(k) &= \mu + T \ln \left(2 \cosh \left(\frac{H}{2T} \right) \right) - \frac{2}{|c|}p^b(T, H) - \frac{J}{4}(1 - B^2) + \frac{3J^2}{32k_B T}(1 - B^4).\end{aligned}\quad (2.22)$$

Usando as relações termodinâmicas $-\partial G(\mu, H)/\partial \mu = n$ e $-\partial G(\mu, H)/\partial H = m_z = nP/2$, sendo no potencial de Gibbs $G = p = p^u + p^b$, depois de muitas iterações das equações (2.21) e (2.22), nós obtemos a energia livre de Helmholtz, dada por

$$\begin{aligned} F(T, H) &\approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n^3 P^3}{6m} \left[1 - \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^u} \right)^2 + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} \left(1 + \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^u} \right)^2 \right) \right] \\ &+ \frac{\hbar^2 \pi^2 n^3 (1-P)^3}{48} \left[1 - \frac{\pi^2}{16} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^b} \right)^2 + \left(\frac{(1-P)}{|\gamma|} + \frac{4P}{|\gamma|} \right) \left(1 + \frac{\pi^2}{16} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^b} \right)^2 \right) \right] \\ &- \frac{1}{2} n P H - \frac{\hbar^2}{2m} n (1-P) \frac{c^2}{4}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde temos que $\mu_0^u = \hbar^2 \pi^2 n^2 P^2 / 2m$ e $\mu_0^b = \hbar^2 \pi^2 n^2 (1-P)^2 / 32m$. Nós podemos checar que a energia livre de Helmholtz no limite $T \rightarrow 0$ se reduz à energia do estado fundamental (2.5).

Para baixas temperaturas, i. e., $k_B T \ll E_F$, onde E_F é a energia de Fermi, podemos considerar que as flutuações de spin estão “congeladas” para valores dos campos magnéticos suficientemente altos. Com isso, podemos desprezar a contribuição da última eq. em (2.8), e podemos escrever a energia livre de Helmholtz como

$$F(T, H) = E_0(H) - \frac{\pi C k_B^2 T^2}{6\hbar} \left(\frac{1}{v_b} + \frac{1}{v_u} \right), \quad (2.24)$$

que pertence a mesma classe de universalidade dos modelos Gaussianos com carga central $C = 1$ [58]. Na equação acima $E_0(H)$ é dado pela equação (2.5). Assim a velocidade de grupo para férmons ligados e não ligados são dadas, respectivamente por

$$v_b \approx \frac{v_F(1-P)}{4} \left(1 + \frac{(1-P)}{|\gamma|} + \frac{4P}{|\gamma|} \right), \quad (2.25)$$

$$v_u \approx v_F P \left(1 + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} \right). \quad (2.26)$$

Aqui temos que a velocidade de Fermi é $v_F = \hbar \pi n / m$. Esse conjunto de equações nos indica que a física de baixas energias para o gás de férmons fortemente atrativo pode ser descrito pelo modelo do líquido de Tomonaga-Luttinger [57].

2.7 Conclusão

Fizemos uma revisão geral do modelo do gás de Fermi de duas componentes para o caso atrativo, onde obtivemos os diagramas de fase tanto para o regime fracamente atrativo quanto para o fortemente atrativo utilizando a integração numérica das equações do ABT e a resolução analítica pela utilização de potenciais termodinâmicos e das energias do estado fundamental, obtidas resolvendo as EAB. Resultados para temperaturas finitas foram apresentados, onde se mostrou que para baixas temperaturas, o modelo pode ser descrito como um líquido de Tomonaga-Luttinger.

No próximo capítulo vamos estender as técnicas utilizadas para o caso do gás de Fermi de três componentes. Parte dos resultados apresentados neste capítulo foram publicados em [37].

Capítulo 3

Gás de Fermi com três componentes

3.1 O Modelo

Nós consideramos novamente um sistema fermiônico com interação delta de N férmons com igual massa m , agora podendo ocupar três possíveis estados quânticos hiperfinos ($|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$), que estão alocados em uma linha de comprimento L com condições de contorno periódicas. O Hamiltoniano pode ser escrito como [61]

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) + \sum_{i=1}^3 N^i \epsilon_Z^i(\mu_S^i, B) \quad (3.1)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano está associado à energia cinética entre os férmons. O segundo termo corresponde à interação entre os férmons. A interação de contato g_{1D} permanece a mesma entre férmons em diferentes estados hiperfinos e preserva o spin em cada estado, isto é, o número de férmons em cada estado é conservado. Esta constante de acoplamento inter-componentes também pode ser escrita como $c = mg_{1D}/\hbar^2$. ou $\gamma = c/n$ onde definimos a densidade linear $n = N/L$ [62]. O modelo é atrativo quando $g_{1D} < 0$ e repulsivo quando $g_{1D} > 0$.

O último termo denota a energia de Zeeman, onde N^i é o número de férmons no estado $|i\rangle$ com energia de Zeeman ϵ_Z^i determinado pelo momento magnético μ_S^i e o campo magnético B . Por conveniência o termo da energia de Zeeman pode ser escrito como $-H_1(N^1 - N^2) - H_2(N^2 - N^3) + N\bar{\epsilon}$, onde a separação de Zeeman é espaçada em três níveis hiperfinos que podem ser especificados por dois parâmetros independentes $H_1 = \bar{\epsilon} - \epsilon_Z^1(\mu_S^1, B)$ e $H_2 = \epsilon_Z^3(\mu_S^3, B) - \bar{\epsilon}$, com $\bar{\epsilon} = \sum_{\sigma=1}^3 \epsilon_Z^\sigma(\mu_S^\sigma, B)/3$ a média da energia de Zeeman [39]. Desta forma podemos escrever o Hamiltoniano (3.1) de maneira mais clara, que facilitará a notação e o método que iremos aplicar [39]

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) - \sum_{i=0}^2 N_i H_i. \quad (3.2)$$

Acima N_i , $i = 1, 2$ e 3 são os números de férmons não-ligados, férmons pareados ou estados ligados de dois férmons diferentes, e trions ou estados ligados de três férmons distintos, respectivamente. O termo $H_0 = \sum_{i=1}^3 \epsilon_Z^i/3$ pode ser desprezado, porque $N_0 = N$ é constante [39]. Novamente iremos focar no caso atrativo, porque este é o regime que

está sendo considerado experimentalmente. Embora essas condições possam parecer um pouco restritivas, é possível manipular o comprimento do espalhamento entre átomos em diferentes níveis para formar aproximadamente gases de Fermi degenerados descritos pelo Hamiltoniano (3.2) via ressonâncias de Feshbach. [18,19,63,64]. Consequentemente o modelo ainda captura os aspectos físicos essenciais na discussão das diversas fases em gases de Fermi ultrafrios com três componentes. Por simplicidade, nós iremos trabalhar em unidades de $\hbar^2/2m$.

O Hamiltoniano (3.1) exibe uma simetria $SU(3)$ na ausência de campos externos e foi resolvido por meio do ansatz de Bethe [61, 65]. O espectro de energias é dado em termos dos quase-momentos $\{k_i\}$ dos férmiões através de

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N k_j^2, \quad (3.3)$$

satisfazendo o seguinte conjunto de equações acopladas do ansatz de Bethe (EAB) [61, 65]

$$\begin{aligned} \exp(i k_j L) &= \prod_{\ell=1}^{M_1} e_1(k_j - \Lambda_\ell) \\ \prod_{\ell=1}^N e_1(\Lambda_\alpha - k_\ell) &= - \prod_{\beta=1}^{M_1} e_2(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta) \prod_{\ell=1}^{M_2} e_{-1}(\Lambda_\alpha - \lambda_\ell) \\ \prod_{\ell=1}^{M_1} e_1(\lambda_m - \Lambda_\ell) &= - \prod_{\ell=1}^{M_2} e_2(\lambda_m - \lambda_\ell) \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde $e_n(x) = (x + inc/2)/(x - inc/2)$. Aqui $j = 1, \dots, N$, $\alpha = 1, \dots, M_1$, $m = 1, \dots, M_2$, com números quânticos $M_1 = N_2 + 2N_3$ e $M_2 = N_3$, sendo N_1 o número de férmiões não-ligados, N_2 o número de férmiões pareados e N_3 o números de trions. Os parâmetros $\{\Lambda_\alpha, \lambda_m\}$ estão relacionados aos graus de liberdade internos de spin.

3.2 Estado fundamental

A distribuição das raízes das EAB (3.4) no plano complexo para o estado fundamental foi estudada recentemente em [39]. Basicamente, mostrou-se que a configuração dos quase-momentos $\{k\}$ no plano complexo para o estado fundamental envolve estados ligados de dois

férmions (férmons pareados ou pares de Cooper) ou de três férmons (trions) e férmons não-ligados. Um exemplo típico é apresentado na Fig. 3.1.

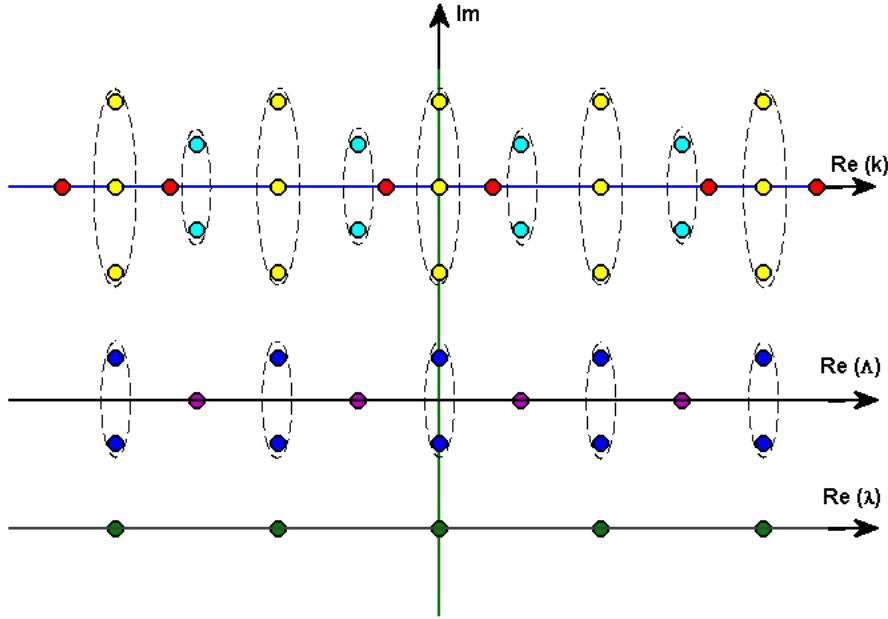


Fig. 3.1: Configuração esquemática dos quase-momentos k , graus de liberdade de spin Λ e λ , soluções das EAB no plano complexo para um exemplo: $N = 29$ com $N_1 = 6$, $N_2 = 4$ e $N_3 = 5$ a temperatura zero. Figura extraída de [39].

Este tipo de configuração irá originar, no limite termodinâmico, densidades de férmons não-ligados, pareados e trions. A simetria $SU(3)$ carrega dois tipos de férmons ligados: trions e pares. Em princípio, números diferentes de férmons não-ligados, pareados e trions podem ser escolhidos para preencher o estado fundamental através de ajuste dos parâmetros H_1 e H_2 .

No regime de acoplamento forte, isto é, $L|c| \gg 1$, a parte imaginária dos estados ligados se torna igualmente espaçada. O estado triônico tem a forma $\{k_j = \lambda_j \pm i|c|, \lambda_j\}$ e para os pares ligados assume $k_r = \Lambda_r \pm i|c|/2$, análogo ao caso anterior. Neste regime, a energia de ligação dos pares é $\epsilon_b = \hbar^2 c^2 / 4m$ e a energia de ligação dos trions é $\epsilon_t = \hbar^2 c^2 / m$ [39]. Substituindo estes padrões de raízes em (3.3), nós explicitamente encontramos a energia do

estado fundamental no regime fortemente atrativo [39]

$$\begin{aligned} \frac{E}{L} \approx & \frac{\pi^2 n_1^3}{3} \left(1 + \frac{8n_2 + 4n_3}{|c|} \right) - \frac{n_2 c^2}{2} \\ & + \frac{\pi^2 n_2^3}{6} \left(1 + \frac{12n_1 + 6n_2 + 16n_3}{3|c|} \right) - 2n_3 c^2 \\ & + \frac{\pi^2 n_3^3}{9} \left(1 + \frac{12n_1 + 32n_2 + 18n_3}{9|c|} \right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Aqui $n_a = N_a/L$ com $a = 1, 2, 3$ é a densidade de férmons não-ligados, pareados e trions, respectivamente. Este sistema pode ser considerado como uma mistura de férmons não-ligados, pares BCS e três férmons ligados, comportando-se basicamente como partículas com diferentes assinaturas estatísticas [35], sendo que para a interação fortemente atrativa, os trions são estáveis.

No regime de acoplamento fraco, isto é, $L|c| \ll 1$, a parte imaginária iy dos estados com férmons ligados são as raízes do polinômio de Hermite H_k de graus k . Especificamente, $H_k(\frac{L}{2|c|}y) = 0$, com $k = 2, 3$ para um par ligado e trions, respectivamente [66]. O polinômio de Hermite é obtido através da relação de recorrência $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$. Neste regime, a energia de ligação dos pares BCS é $\epsilon_b = \hbar^2 |c| / mL$ e a energia de ligação dos trions é $\epsilon_t = 3\hbar^2 |c| / mL$. Usando esta configuração para as raízes das EAB (3.4) e substituindo na expressão (3.3), a energia do estado fundamental é dada em unidades de comprimento por

$$\begin{aligned} \frac{E}{L} \approx & \frac{\pi^2}{3} (n_1^3 + 2n_2^3 + 3n_3^3) \\ & + \pi^2 (n_1(n_2 + n_3)(n_1 + n_2 + n_3) + 2n_2n_3(n_2 + n_3)) \\ & - 2|c|(n_1n_2 + 2n_1n_3 + 4n_2n_3 + n_2^2 + 3n_3^2). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Estas expressões de energia para o estado fundamental serão utilizadas posteriormente na construção dos diagramas de fases do modelo. Para a interação fracamente atrativa, o estado triônico é instável frente a flutuações quânticas. Isto torna-se aparente nos diagramas de fases apresentados nas figuras. 3.4 e 3.5 nas próximas seções.

3.3 Formalismo do ansatz de Bethe termodinâmico

Pelo ABT, o estado de equilíbrio pode ser obtido pela condição de minimização da energia livre de Gibbs [39, 48, 49, 51].

$$\frac{G}{L} = \frac{E}{L} + n_1 H_1 + n_2 H_2 - \mu n - T s \quad (3.7)$$

em termos da energia por unidade de comprimento E/L , dos campos externos H_1 e H_2 , potencial químico μ e entropia s . No limite termodinâmico a energia livre de Gibbs pode ser expressa em termos das densidades de partículas para férmiões não-ligados, pareados e trions. Assim a minimização da energia livre de Gibbs leva ao conjunto de equações integrais não lineares, conhecidas como equações do Ansatz de Bethe Termodinâmico (ABT), que no limite $T \rightarrow 0$ fornecem

$$\begin{aligned} \epsilon^{(3)}(\lambda) &= 3\lambda^2 - 2c^2 - 3\mu - a_2 * \epsilon^{(1)}(\lambda) \\ &\quad - [a_1 + a_3] * \epsilon^{(2)}(\lambda) - [a_2 + a_4] * \epsilon^{(3)}(\lambda) \\ \epsilon^{(2)}(\Lambda) &= 2\Lambda^2 - 2\mu - \frac{c^2}{2} - H_2 - a_1 * \epsilon^{(1)}(\Lambda) \\ &\quad - a_2 * \epsilon^{(2)}(\Lambda) - [a_1 + a_3] * \epsilon^{(3)}(\Lambda) \\ \epsilon^{(1)}(k) &= k^2 - \mu - H_1 - a_1 * \epsilon^{(2)}(k) - a_2 * \epsilon^{(3)}(k). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Aqui a função $a_j(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{j|c|}{(jc/2)^2 + x^2}$; $\epsilon^{(1)}$, $\epsilon^{(2)}$ e $\epsilon^{(3)}$ são as variáveis que se originam das densidades de férmiões não-ligados, férmiões pareados e trions, respectivamente. O símbolo “ $*$ ” significa $a_j * \epsilon^{(a)}(x) = \int_{-Q_a}^{+Q_a} a_j(x-y) \epsilon^{(a)}(y) dy$. Os limites de integração Q_a caracterizam a “superfície de Fermi” em $\epsilon^{(a)}(\pm Q_a) = 0$. Na temperatura zero a energia livre de Gibbs por unidade de comprimento pode ser escrita em termos das variáveis $\epsilon^{(a)}$ com $a = 1, 2$ e 3 como

$$\frac{G}{L} = \sum_{a=1}^3 \frac{a}{2\pi} \int_{-Q_a}^{+Q_a} \epsilon^{(a)}(x) dx \quad (3.9)$$

a partir das quais, quantidades físicas de interesse são obtidas através das relações

$$-\frac{\partial G/L}{\partial \mu} = n, \quad -\frac{\partial G/L}{\partial H_1} = n_1, \quad -\frac{\partial G/L}{\partial H_2} = n_2. \quad (3.10)$$

Este conjunto de equações pode ser resolvido analiticamente em alguns limites especiais. Aqui nós resolvemos numericamente estas equações para determinar o diagrama de fases

para o modelo para qualquer valor de acoplamento. Basicamente, para cada valor dos limites de integração Q_a , $a = 1, 2, 3$, as equações (3.8) são convertidas em uma única equação matricial finita que pode ser resolvida usando a condição $\epsilon^{(a)}(\pm Q_a) = 0$ para obter os níveis de energia, os campos e os potenciais químicos. Então a energia livre de Gibbs é obtida e a partir dela se calcula a polarização e as densidades. Cada fase pode ser devidamente identificada ao separar a entrada em conjuntos distintos contendo diferentes combinações de limites de integração nulos/não-nulos. Por exemplo, na fase puramente não-ligada, nós temos $\{Q_2 = Q_3 = 0, Q_1 \neq 0\}$, na fase mista composta por férmiuns não-ligados e pares ligados $\{Q_3 = 0, Q_1 \neq 0, Q_2 \neq 0\}$, e assim por diante. Existem sete diferentes combinações e consequentemente, sete diferentes fases, que são computadas e os resultados coletados geram o diagrama de fases do modelo.

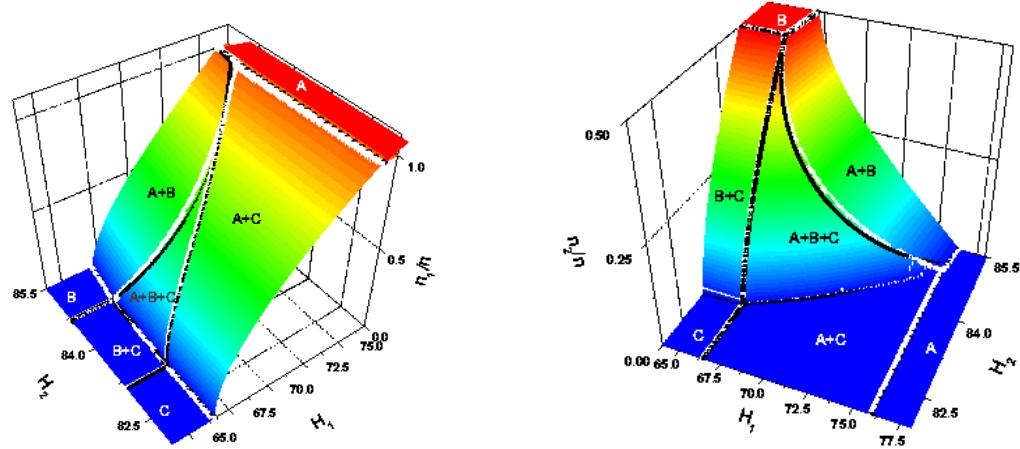


Fig. 3.2: À esquerda (direita) temos o diagrama de fase mostrando a densidade n_1/n (n_2/n) versus os campos H_1 e H_2 para interação forte com $|c| = 10$ e $n = 1$. Existem três fases puras: uma fase de férmiuns não-pareados A, uma fase de pares B e uma fase de trions C e quatro diferentes misturas destes estados. A linha preta foi graficada para os resultados analíticos enquanto as linhas pontilhadas brancas correspondem as soluções numéricas das equações do ABT. Os limites das transições de fase numéricas coincidem bem com os resultados analíticos.

3.4 Diagrama de fases para o regime de acoplamento forte

Para obter a forma explícita dos campos em termos da polarização nós consideramos a energia

$$E/L = \mu n + G/L + n_1 H_1 + n_2 H_2 \quad (3.11)$$

utilizando para o estado fundamental, a energia (3.5) derivada via solução das EAB discretas (3.4) no regime de acoplamento forte. Então os campos H_1 e H_2 são determinados através das relações

$$H_1 = \frac{\partial E/L}{\partial n_1}, \quad H_2 = \frac{\partial E/L}{\partial n_2} \quad (3.12)$$

juntamente com a restrição

$$n = n_1 + 2n_2 + 3n_3. \quad (3.13)$$

Nós encontramos

$$\begin{aligned} H_1 &= \pi^2 n_1^2 \left(1 - \frac{4n_1}{9|c|} + \frac{8n_2}{|c|} + \frac{4n_3}{|c|} \right) + \frac{10\pi^2 n_2^3}{27|c|} \\ &\quad - \frac{\pi^2 n_3^2}{9} \left(1 + \frac{4n_1}{3|c|} + \frac{32n_2}{9|c|} + \frac{4n_3}{3|c|} \right) + \frac{2c^2}{3}. \\ H_2 &= \frac{\pi^2 n_2^2}{2} \left(1 + \frac{4n_1}{|c|} + \frac{40n_2}{27|c|} + \frac{16n_3}{3|c|} \right) + \frac{16\pi^2 n_1^3}{9|c|} \\ &\quad - \frac{2\pi^2 n_3^2}{9} \left(1 + \frac{4n_1}{3|c|} + \frac{32n_2}{9|c|} + \frac{8n_3}{9|c|} \right) + \frac{5c^2}{6} \end{aligned} \quad (3.14)$$

em unidades de $\hbar^2/2m$. Estas equações determinam o diagrama de fases e os campos críticos ativado pelos campos H_1 e H_2 .

A Figura 3.2 mostra as densidade n_1/n e n_2/n em termos de H_1 e H_2 . Existem três fases puras: uma fase de férmions não-ligados A , uma fase puramente pareada B e uma fase triônica C e quatro diferentes combinações destes estados. Uma boa concordância é observada entre as previsões analíticas obtidas das equações (3.14) representada por linhas pretas

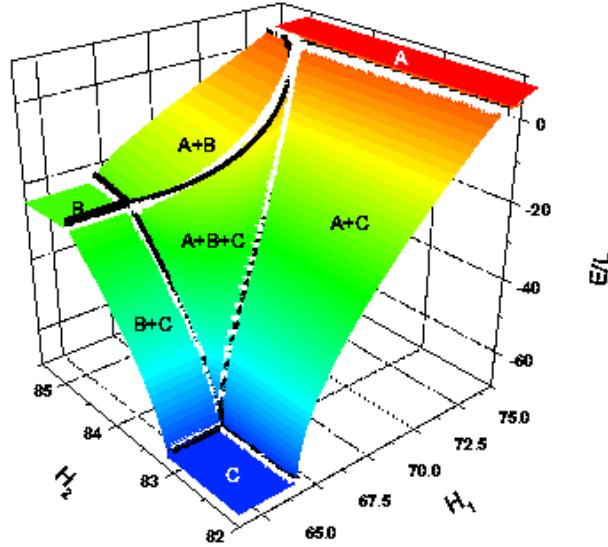


Fig. 3.3: Energia do estado fundamental vs campos externos H_1 e H_2 para interação forte $|c| = 10$ e $n = 1$. Uma boa concordância foi encontrada entre os resultados analíticos (3.14) representados por linhas pretas e a solução numérica obtida pela integração das equações do ABT, representada por pontos brancos.

e as soluções obtidas pela integração numérica das equações do ABT (3.8), representadas por pontos brancos.

A energia do estado fundamental versus os campos H_1 e H_2 pode ser determinada pela Eq. (3.5) com as densidades n_1 e n_2 obtidas de (3.14). A Figura 3.3 mostra a superfície de energia para todas as fases possíveis mostradas na Figura 3.2. Esta figura demonstra a interação entre estados fundamentais físicos. Para certos valores de H_1 e H_2 , uma mistura de férmons não-pareados, pares BCS e trions ($A + B + C$) populam o estado fundamental.

Para valores pequenos de H_1 , uma transição do estado triônico para uma mistura de trions e pares ocorre quando H_2 excede o menor valor crítico H_2^{c1} . Quando H_2 é maior que o valor crítico H_2^{c2} , uma fase puramente pareada com simetria $SU(2)$ ocorre. Trions e BCS coexistem quando $H_2^{c1} < H_2 < H_2^{c2}$. Estes campos críticos, derivados das equações (3.14), são dadas por

$$\begin{aligned} H_2^{c1} &\approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(\frac{5\gamma^2}{6} - \frac{2\pi^2}{81} \left(1 + \frac{8}{27|\gamma|} \right) \right) \\ H_2^{c2} &\approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(\frac{5\gamma^2}{6} + \frac{\pi^2}{8} \left(1 + \frac{20}{27|\gamma|} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.15)$$

A transição de fase $B \rightarrow A + B \rightarrow A$ induzida pelo aumento do H_1 é remanescente do sistema de duas componentes, estudada no capítulo anterior. A fase mista contendo pares BCS e férmions não-ligados pode ser pensada como o análoga à fase FFLO em uma dimensão.

Para valores pequenos de H_2 , a transição de fase do estado triônico para a mistura de trions e férmions não-ligados ocorre. Usando a equação (3.14), nós encontramos que o estado triônico com polarização zero $n_1/n = 0$ forma o estado fundamental quando $H < H_1^{c1}$, onde

$$H_1^{c1} \approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(\frac{2\gamma^2}{3} - \frac{\pi^2}{81} \left(1 + \frac{4}{9|\gamma|} \right) \right) \quad (3.16)$$

Para $H_1 > H_1^{c2}$, dado por

$$H_1^{c2} \approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(\frac{2\gamma^2}{3} + \pi^2 \left(1 - \frac{4}{9|\gamma|} \right) \right) \quad (3.17)$$

todos os trions são quebrados e o estado torna-se um líquido de Fermi normal. Trions e férmions não-pareados coexistem na região intermediária $H_1^{c1} < H_1 < H_1^{c2}$.

3.5 Diagrama de fases para o regime de acoplamento fraco

Neste regime nós empregamos as mesmas técnicas aplicadas no caso anterior para extrair as expressões entre os campos e as polarizações. Usando as equações (3.6), (3.12) e (3.13)

nós encontramos

$$\begin{aligned}
 H_1 &= \frac{\pi^2}{3}(2n_1^2 + n_2^2 + 4n_1n_2 + 4n_1n_3 + 2n_2n_3) \\
 &\quad + \frac{2|c|}{3}(2n_1 + n_2). \\
 H_2 &= \frac{\pi^2}{3}(n_1^2 + 2n_2^2 + 2n_1n_2 + 2n_1n_3 + 4n_2n_3) \\
 &\quad + \frac{2|c|}{3}(2n_2 + n_1).
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Estas equações, juntamente com a relação $H_1 - H_2/2$ remanescente do sistema de férmons de duas componentes, determinam completamente o diagrama de fases e os campos críticos ativados pelos campos externos H_1 e H_2 . Estes resultados estão dispostos nas Figuras 3.4 e 3.5. Agora no regime de acoplamento fraco existem somente seis fases diferentes no plano: nós observamos o desaparecimento da fase pura triônica C na presença dos campos, isto é, o estado triônico é instável frente a flutuações quânticas. Este comportamento difere do regime de acoplamento forte, onde a fase C é robusta e o estado triônico popula o estado fundamental para um intervalo considerável dos campos externos. Além disso, a fase onde trions e pares coexistem ($B + C$) reduz significamente comparado ao regime de acoplamento forte. Um resultado interessante é que, em contraste com o regime fracamente atrativo do gás de Fermi de duas componentes, a fase puramente pareada B pode ser sustentada sob certos valores para os campos H_1 e H_2 . Portanto, a fase pareada naturalmente ocorre e é estável. A persistência desta fase é relevante para a investigação da transição de fase entre os pares BCS e o estado FFLO. Todas as transições de fase ocorrem suavemente, como ilustrado nas figuras do diagrama de fases para diferentes valores dos acoplamento cruzando todo o regime. Isto indica que todas as transições de fase nas vizinhanças dos pontos críticos são de segunda ordem. Esta conclusão é consistente com as previsões analíticas [35, 68].

Nós realizamos uma análise similar ao caso anterior para extrair os campos críticos. Devido ao desaparecimento da fase triônica C para valores de campos não nulos, um número menor de campos críticos são encontrados comparado ao caso de acoplamento forte. Para valores pequenos de H_1 temos uma transição de mistura de trions e pares BCS em um estado puramente pareado, quando H_2 excede o valor crítico

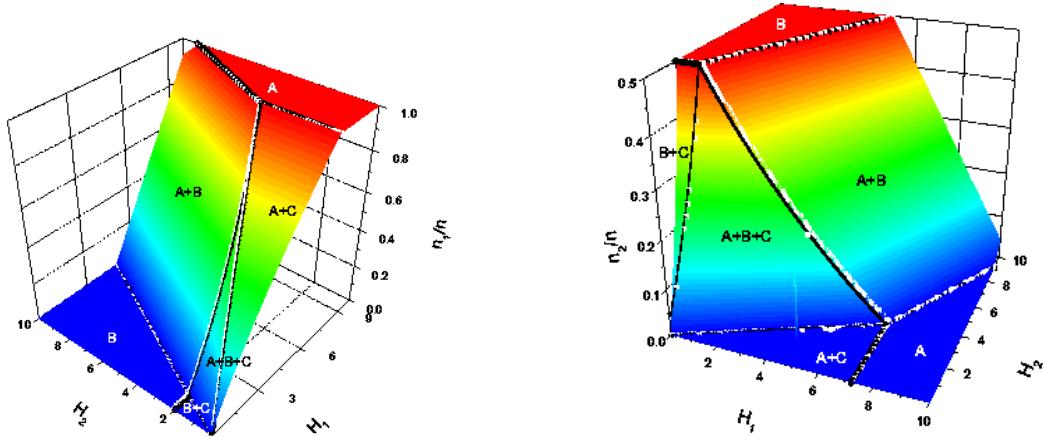


Fig. 3.4: À esquerda (direita) temos o diagrama de fase mostrando a polarização n_1/n (n_2/n) versus os campos H_1 e H_2 para o acoplamento fraco com $|c| = 0.5$ e $n = 1$. A figura revela o desaparecimento da fase puramente triônica C na presença dos campos. As linhas pretas representam os resultados analíticos (3.18) enquanto os pontos brancos correspondem as soluções numéricas das equações do ABT. As transições de fase numéricas coincidem bem com os resultados analíticos.

$$H_2^c \approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(\frac{2\gamma}{3} + \frac{\pi^2}{6} \right) \quad (3.19)$$

Uma transição de uma mistura de trions e férmiões não-ligados em um líquido de Fermi normal ocorre quando H_1 excede o valor crítico

$$H_1^c \approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(\frac{4\gamma}{3} + \frac{2\pi^2}{3} \right) \quad (3.20)$$

A transição de fase $B \rightarrow A + B \rightarrow A$ é remanescente do sistema de duas componentes.

3.6 Regime intermediário

Nesta seção apresentamos os diagramas de fase para alguns valores da constante de acoplamento γ no regime intermediário, através de uma análise numérica das ABT (3.8). As

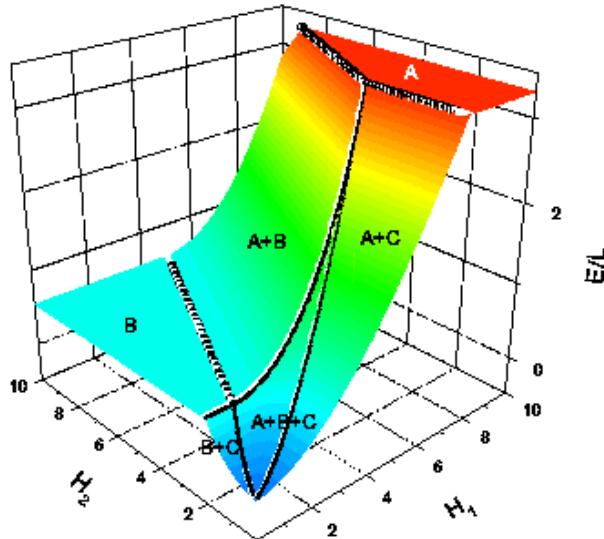


Fig. 3.5: Energia do estado fundamental versus os campos H_1 e H_2 para o regime de interação fraca com $|c| = 0.5$ e $n = 1$. Uma boa concordância é encontrada entre os resultados analíticos (3.18) representados pelas linhas pretas e os resultados numéricos obtidos através da integração das equações do ABT, representados pelos pontos brancos.

fronteiras entre as diferentes fases vão sofrendo modificações suaves ao se variar o valor de γ , como podemos ver nas Figuras 3.6 e 3.7. Nas figuras 3.6 (c) e 3.7 (c) observamos o desaparecimento da fase triônica, indicando que estamos no regime de acoplamento fraco, onde essa fase é instável. Uma análise numérica cuidadosa para valores de γ entre 1 e 0.5 foi realizada, onde detectamos o valor crítico que a fase triônica desaparece totalmente, $\gamma_c \approx 0.6$.

3.7 Conclusão

Nós estudamos o modelo do gás de Fermi de três componentes para o caso atrativo. Nós obtivemos o diagrama de fases e os campos críticos no regime de acoplamento forte utilizando

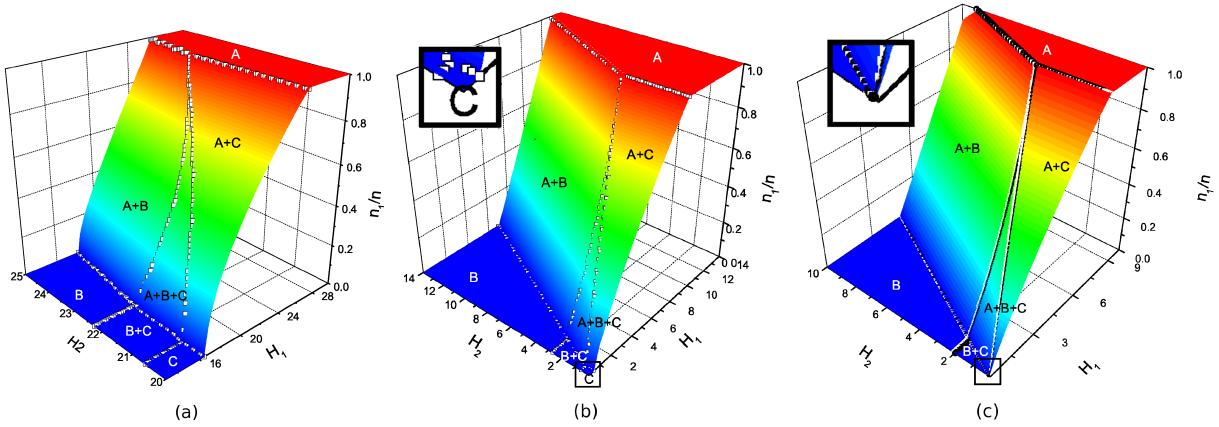


Fig. 3.6: Diagrama de fase mostrando a polarização n_1/n versus os campos magnéticos H_1 e H_2 para diferentes valores (a) $|\gamma| = 5$, (b) $|\gamma| = 1$ e (c) $|\gamma| = 0.5$. Os pontos brancos correspondem a soluções numéricas das equações (3.8). Nos regimes intermediários (a) e (b), a fase puramente triônica reduz suavemente até o seu total desaparecimento no regime de acoplamento fraco (c).

um método alternativo. Nós também derivamos o diagrama de fases e os campos críticos para o caso de acoplamento fraco. Particularmente, nós encontramos que a fase triônica, que ocorre no regime de acoplamento forte para certos valores de campos, é suprimida no regime de acoplamento fraco e determinamos numericamente o valor crítico da constante de acoplamento onde isto ocorre. Entretanto, no regime de acoplamento fraco, a fase puramente pareada pode ser mantida para determinadas escolhas dos campos externos H_1 e H_2 , em contraste ao caso de duas componentes onde essa fase é suprimida. Finalmente, nós confirmamos que as expressões analíticas para as quantidades físicas que resultam nos diagramas de fases são bem precisas nos regimes de acoplamento fraco e forte, através da resolução numérica das equações do ABT. Parte dos resultados apresentados neste capítulo foram publicados em [37, 38].

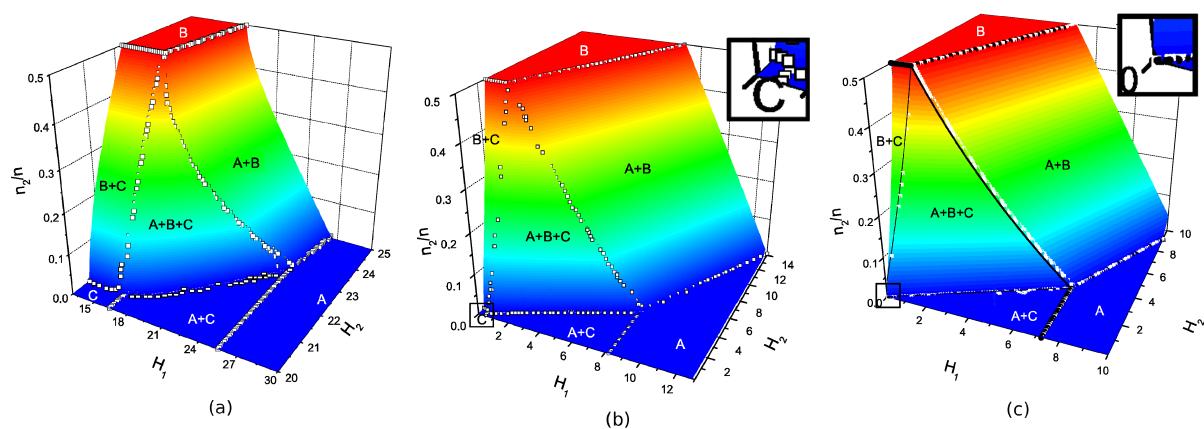


Fig. 3.7: Diagrama de fase mostrando a polarização n_2/n versus os campos magnéticos H_1 e H_2 para diferentes valores (a) $|\gamma| = 5$, (b) $|\gamma| = 1$ e (c) $|\gamma| = 0.5$. Os pontos brancos correspondem a soluções numéricas das equações (3.8). Nos regimes intermediários (a) e (b), a fase puramente triônica reduz suavemente até o seu total desaparecimento no regime de acoplamento fraco (c).

Capítulo 4

Gás de bósons com três componentes

4.1 O Modelo

Aqui nós vamos considerar N partículas bosônicas de massa m e “spin” 1, que podem estar em três estados hiperfinos diferentes, denotados por $|m_F = +1\rangle$, $|m_F = 0\rangle$ e $|m_F = -1\rangle$, confinadas em um tubo unidimensional de comprimento L , com interações entre densidades e troca de “spin” do tipo δ . Este Hamiltoniano foi introduzido por T. L. Ho em [69], e é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i < j} [c_0 + c_2 F_i \cdot F_j] \delta(x_i - x_j) + E_z, \quad (4.1)$$

acima F_i são os operadores “spin-1”, $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3$ e $c_2 = (g_2 - g_0)/3$ são os parâmetros de interação 1D, com $g_F = 4\pi\hbar^2 a_F/m$ sendo a_f o comprimento de espalhamento ($F = 0$, $F = 2$). O último termo denota a energia Zeeman, $E_z = -HF^z$, onde H é o campo magnético externo e F^z é o valor total de “spin” na componente z .

No que segue iremos utilizar unidades de $\hbar^2/2m$. Aqui estaremos interessados no caso antiferromagnético com interação repulsiva. J. Cao e colaboradores mostraram que este modelo é exatamente solúvel quando $c_0 = c_2 = c$ pelo método do ansatz de Bethe [30]. Neste caso, os autovalores de energia são dados em termos dos quase-momentos $\{k_j\}$ das partículas através da expressão $E = \sum_{j=1}^N k_j^2$, obedecendo o conjunto das equações do ansatz de Bethe (EAB) [30]

$$\begin{aligned} \exp(ik_j L) &= \prod_{\ell=1}^N \frac{k_j - k_\ell + 4c'i}{k_j - k_\ell - 4c'i} \prod_{\alpha=1}^M \frac{k_j - \Lambda_\alpha - 2c'i}{k_j - \Lambda_\alpha + 2c'i}, \\ \prod_{\ell=1}^N \frac{\Lambda_\alpha - k_\ell + 2c'i}{\Lambda_\alpha - k_\ell - 2c'i} &= - \prod_{\beta=1}^M \frac{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + 2c'i}{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - 2c'i}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Acima temos $c' = c/4$, $j = 1, \dots, N$, $\alpha = 1, \dots, M$ e $\{\Lambda_\alpha\}$ são os graus de liberdades relacionados aos estados hiperfinos. O número quântico M é uma quantidade conservada, obedecendo a relação $M = N - F^z$. Também é interessante mencionar que este modelo foi investigado por F. Essler em [31].

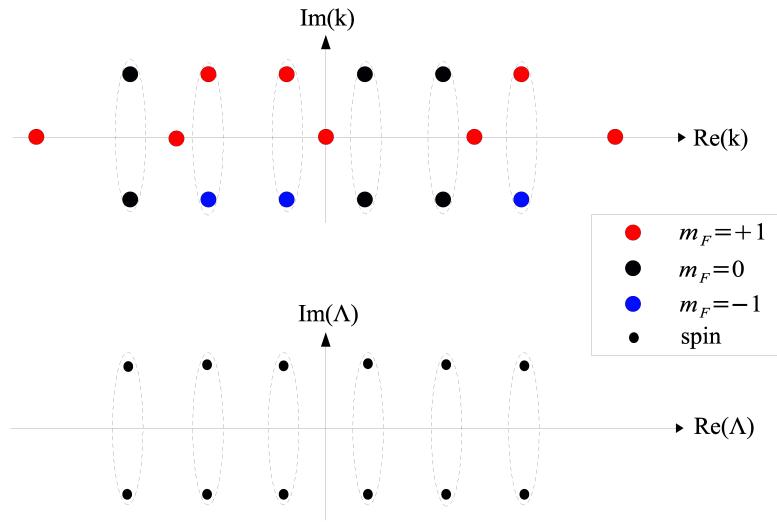


Fig. 4.1: Distribuição das raízes das EAB no plano complexo para um exemplo de um sistema com $N = 17$ e $M = 12$ no estado fundamental. Figura extraída de [32]

4.2 Estado fundamental

A distribuição das raízes das EAB (4.2) no plano complexo para o estado fundamental no caso $c > 0$ foi estudada recentemente em [32]. Basicamente, mostrou-se que a configuração dos quase-momentos $\{k\}$ no plano complexo para o estado fundamental envolve bôsons não-pareados e bôsons pareados ou singlet, que corresponderia a uma combinação de dois bôsons em estados hiperfino $|m_F = +1\rangle$ e $|m_F = -1\rangle$ ou $|m_F = 0\rangle$ e $|m_F = 0\rangle$. Um exemplo típico é apresentado na Fig. 4.1. Este tipo de configuração irá originar, no limite termodinâmico, densidades de bôsons não-pareados e pareados.

Usando essa configuração de raízes, $k_j = \lambda_j \pm ic'$ e $\Lambda_j = \lambda_j \pm ic'$ onde λ_j é real nas EAB (4.2) e usando a definição $E = \sum_j k_j^2$ nós podemos obter a energia do estado fundamental por unidade de comprimento, dada por

$$\begin{aligned} \frac{E}{L} = & \frac{\pi^2 n_1^3}{3} \left(1 + \frac{2(32n_2 - 10n_1)}{5c} + \frac{3(32n_2 - 10n_1)^2}{25c^2} \right) - \frac{n_2 c^2}{8} \\ & + \frac{\pi^2 n_2^3}{6} \left(1 + \frac{2(48n_1 + 5n_2)}{15c} + \frac{3(48n_1 + 5n_2)^2}{225c^2} \right) + O\left(\frac{1}{c^3}\right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

onde n_1 e n_2 são as densidades de bósons não-pareados e pareados, respectivamente e são relacionados com a magnetização, m^z , através das relações $n_1 = nm^z$ e $n_2 = \frac{n}{2}(1-m^z)$, onde $n = N/L$. Da eq. (4.3) nós podemos obter a energia de ligação $\epsilon_b = \frac{\hbar^2 c^2}{2m} \frac{c^2}{8}$. Usando relações termodinâmicas apropriadas, podemos então obter os potenciais químicos para bósons não pareados e pareados através de $\mu_1 = \frac{\partial}{\partial n_1} \left(\frac{E}{L} + \frac{n_2 c^2}{8} \right)$ e $\mu_2 = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial n_1} \left(\frac{E}{L} + \frac{n_2 c^2}{8} \right)$; assim nós obtemos

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \pi^2 n^2 (m^z)^2 \left[\left(1 - \frac{16m^z}{3\gamma} + \frac{32(1-m^z)}{5\gamma} \right) + \frac{3(16(1-m^z) - 10m^z)^2}{25\gamma^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{4m^z(16(1-m^z) - 10m^z)}{5\gamma^2} \right] + \frac{2\pi^2 n^2 (1-m^z)^3}{15\gamma} \\ &\quad + \frac{6\pi^2 n^2 (1-m^z)^3}{225\gamma} \left(48m^z + \frac{5(1-m^z)}{2} \right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \mu_2 &= \pi^2 n^2 (m^z)^2 \left(\frac{32}{15\gamma} + \frac{96(16(1-m^z) - 10m^z)}{75\gamma^2} \right) + \frac{\pi^2 n^2 (1-m^z)^2}{16} \left[1 + \frac{32m^z}{5\gamma} \right. \\ &\quad + \frac{4(1-m^z)}{9\gamma} + \frac{1}{75\gamma^2} \left(48m^z + \frac{5(1-m^z)}{2} \right)^2 \\ &\quad \left. + \frac{(1-m^z)}{45\gamma^2} \left(48m^z + \frac{5(1-m^z)}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

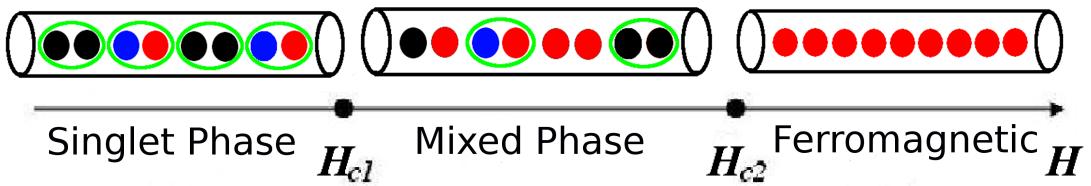


Fig. 4.2: Diagrama esquemático mostrando o comportamento do sistema conforme a variação do campo magnético externo. Os círculos pretos representam bósons no estado hiperfino $|m_F = 0\rangle$, os azuis correspondem a bósons com $|m_F = -1\rangle$ e os vermelhos a bósons com $|m_F = +1\rangle$. O sistema pode estar em três fases diferentes, a fase singlet, a mista e a ferromagnética.

Usando a relação entre os potenciais químicos e o campo externo $H = \mu_1 - \mu_2 + \frac{\epsilon_b}{2}$ nós

podemos obter os valores críticos para os campos, que ocorrem quando $m^z = 0$, onde temos todo o sistema no estado singlet, e quando $m^z = 1$ que ocorre quando o gás esta na fase ferromagnética, isto é, todos os bôsons encontram-se no estado hiperfino $|m_F = +1\rangle$. Os campos críticos são dados, respectivamente, por

$$H_{c1} = \frac{\epsilon_b}{2} - \frac{\pi^2 n^2}{16} \left(1 - \frac{76}{45\gamma} - \frac{167}{180\gamma^2} \right), \quad (4.6)$$

$$H_{c2} = \frac{\epsilon_b}{2} + \pi^2 n^2 \left(1 - \frac{112}{15\gamma} + \frac{164}{5\gamma^2} \right). \quad (4.7)$$

Na figura 4.2 nós mostramos um diagrama esquemático que mostra as possíveis fases do gás de bôsons com três componentes: a fase singlet onde o estado fundamental é formado por bôsons pareados, que ocorre quando $H < H_{c1}$, a fase mista, onde coexistem bôsons não pareados e pareados, que ocorre quando $H_{c1} < H < H_{c2}$ e a fase ferromagnética que ocorre quando temos $H > H_{c2}$.

4.3 Formalismo do ansatz de Bethe termodinâmico

Pelo ABT, o estado de equilíbrio pode ser obtido pela condição de minimização da energia livre de Gibbs $G = E - HF^z - \mu N - TS$. No limite termodinâmico a energia livre de Gibbs pode ser expressa em termos das densidades de bôsons não-pareados, pareados e das densidades de “n-strings” associadas aos graus de liberdade de “spin” [48]. Assim a minimização da energia livre de Gibbs leva ao conjunto de equações integrais não lineares, as equações do ABT para as energias vestidas $\varepsilon_1(k)$, $\varepsilon_2(k)$ e $\phi_n(k)$

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= k^2 - \mu - H - Ta_4 * \ln(1 + e^{-\varepsilon_1(k)/T}) + T[a_1 - a_5] * \ln(1 + e^{-\varepsilon_2(k)/T}) \\ &- T \sum_{n=1}^{\infty} [a_{n-1} + a_{n+1}] * \ln(1 + e^{-\phi_n(k)/T}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(k) &= 2(k^2 - c'^2 - \mu) + T[a_1 - a_5] * \ln(1 + e^{-\varepsilon_1(k)/T}) \\ &+ T[a_2 - a_4 - a_6] * \ln(1 + e^{-\varepsilon_2(k)/T}) \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\phi_n(k) = n + T[a_{n-1} + a_{n+1}] * \ln(1 + e^{-\varepsilon_1(k)/T}) + T \sum_{n=1}^{\infty} T_{mn} * \ln(1 + e^{-\phi_n(k)/T}). \quad (4.10)$$

As funções $T_{nm}(x)$ e $a_n(x)$ foram definidas no cap 2 (ver equações (2.9) e (2.10)). A última equação (4.10) está associada a flutuações de “spin”. Nós podemos observar que estas flutuações de “spin” estão acopladas a energia vestida para bósons não-pareados $\varepsilon_1(k)$ através do último termo na equação (4.10).

No limite fortemente interagente, as energias vestidas dependem das pressões exercidas entre elas, em um comportamento similar ao gás de Fermi com duas componentes, com a diferença que aqui podemos ter o espalhamento entre bósons.

A pressão por unidade de comprimento do sistema pode ser derivada através da relação $p = -\partial G/\partial L$, o que nos fornece

$$p = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{-\varepsilon_1(k)/T}) dk + \frac{T}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{-\varepsilon_2(k)/T}) dk. \quad (4.11)$$

Acima o primeiro termo corresponde à pressão para bósons não-pareados, p_1 , e o segundo termo corresponde a pressão para bósons pareados (ou par singuleto), p_2 .

4.4 Diagrama de fases para $T = 0$

Nesta seção iremos determinar o diagrama de fases do sistema para $T = 0$. No limite $T \rightarrow 0$, as equações do ABT tomam a seguinte forma

$$\varepsilon_1(k) = k^2 - \mu - H + a_4 * \varepsilon_1(k) + [a_5 - a_1] * \varepsilon_2(k), \quad (4.12)$$

$$\varepsilon_2(k) = 2(k^2 - c'^2 - \mu) + [a_5 - a_1] * \varepsilon_1(k) + [a_6 + a_4 - a_2] * \varepsilon_2(k). \quad (4.13)$$

A parte negativa das energias vestidas $\varepsilon_a(k)$, $a = 1, 2$ para $k \leq Q_a$ correspondem a estados ocupados, enquanto a parte positiva dos $\varepsilon_a(k)$ correspondem a estados não ocupados. Os limites de integração Q_a são definidos por $\varepsilon_a(Q_a) = 0$.

Através de uma análise cuidadosa das equações (4.12) e (4.13) nós podemos obter o diagrama de fases no plano $\mu - H$, mostrado na Fig. 4.3. Nele podemos observar a existência de quatro fases: (i) vácuo [V]; (ii) a fase singuleto de bósons pareados [S]; (iii) a fase ferromagnética de átomos no estado hiperfino $|m_F = 1 >$ [F] e (iv) a fase mista onde bósons

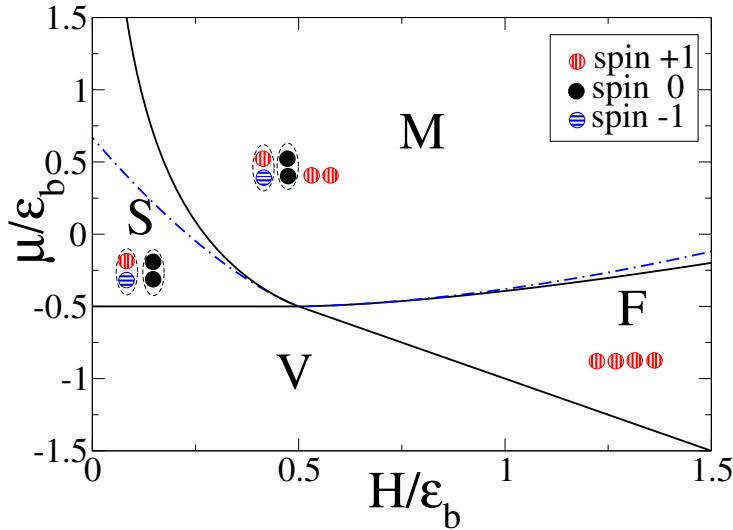


Fig. 4.3: Diagrama de fases no plano μ - H mostrando a fase singlet S de bôsons pareados, a fase ferromagnética F de bôsons com estados hiperfinos alinhados, e a fase mista M de bôsons não pareados e pareados. V é o vácuo. As linhas $S - M$ e $F - M$ são determinadas pelos campos críticos dadas por (4.17) e (4.18), respectivamente. As linhas $V - S$ e $V - F$ são dadas em (4.19). As linhas tracejadas azuis são aproximações dos campos dadas por (4.20) e (4.21) no regime fortemente interativo.

pareados e não-pareados coexistem [M]. As fronteiras entre essas fases (V-F), (V-S), (F-M) e (S-M) são indicadas por μ_{c1} , μ_{c2} , μ_{c3} e μ_{c4} , respectivamente

A fronteira entre as fases de vácuo e ferromagnética (V-F) é estabelecida pela condição $\varepsilon_1(k) \leq 0$ e $\varepsilon_2(k) > 0$. Desta forma, da equação (4.12) nós obtemos que $\mu_{c1} = -H$. A fronteira entre as fases vácuo e singlet (V-S) ocorre utilizando a condição $\varepsilon_1(k) > 0$ e $\varepsilon_2(k) \leq 0$, o que resulta em $\mu_{c2} = -c^2/16$ da equação (4.13). A fronteira entre as fases ferromagnética e mista é determinada pelas condições $\varepsilon_1(\pm Q_1) = 0$ e $\varepsilon_2(k) \leq 0$, que leva ao conjunto de equações

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1(k) &= k^2 - \mu_{c3} - H + \frac{1}{\pi} \int_{-Q_1}^{Q_1} \frac{c\varepsilon_1(k')}{c^2 + (k - k')^2} dk', \\
Q_1^2 &= \mu_{c3} + H - \frac{1}{\pi} \int_{-Q_1}^{Q_1} \frac{c\varepsilon_1(k')}{c^2 + (Q_1 - k')^2} dk', \\
\mu_{c3} &= -\frac{c^2}{16} + \frac{5}{8\pi} \int_{-Q_1}^{Q_1} \frac{c\varepsilon_1(k)}{(5c/4)^2 + k^2} dk - \frac{1}{8\pi} \int_{-Q_1}^{Q_1} \frac{c\varepsilon_1(k)}{(c/4)^2 + k^2} dk. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Por sua vez, a fronteira entre a fase singlet e a mista (S-M) ocorre quando $\varepsilon_1(k) \leq 0$ e $\varepsilon_2(\pm Q_2) = 0$, gerando o seguinte conjunto de equações

$$\begin{aligned}
\varepsilon_2(k) &= 2(k^2 - \frac{c^2}{16} - \mu_{c4}) + \frac{1}{\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k')}{c^2 + (k - k')^2} dk' \\
&\quad + \frac{3}{2\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k')}{(3c/2)^2 + (k - k')^2} dk' - \frac{2}{\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k')}{(c/2)^2 + (k - k')^2} dk', \\
Q_2^2 &= \frac{c^2}{16} + \mu_{c4} - \frac{3}{4\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k')}{(3c/2)^2 + (Q_2 - k')^2} dk' \\
&\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k')}{c^2 + (Q_2 - k')^2} dk' + \frac{1}{4\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k')}{(c/2)^2 + (Q_2 - k')^2} dk, \\
\mu_{c4} &= -H + \frac{5}{4\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k)}{(5c/4)^2 + k^2} dk - \frac{1}{4\pi} \int_{-Q_2}^{Q_2} \frac{c\varepsilon_2(k)}{(c/4)^2 + k^2} dk. \tag{4.15}
\end{aligned}$$

Por conveniência iremos trabalhar com grandezas adimensionais, ou seja iremos definir $\tilde{\mu} \equiv \mu/\epsilon_b$ e $\tilde{h} = H/\epsilon_b$. Desta forma passamos a ter:

$$\tilde{\mu}_{c1} = -h, \quad \tilde{\mu}_{c2} = -\frac{1}{2}, \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\varepsilon}_1(x) &= 8x^2 - \tilde{\mu}_{c3} - h + \frac{1}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x')}{1 + (x - x')^2} dx', \\
\tilde{Q}_1^2 &= \frac{\tilde{\mu}_{c3}}{8} + \frac{h}{8} - \frac{1}{8\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x')}{1 + (\tilde{Q}_1 - x')^2} dx', \\
\tilde{\mu}_{c3} &= -\frac{1}{2} + \frac{2}{5\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x)}{1 + 16x^2/25} dx - \frac{2}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x)}{1 + 16x^2} dx, \tag{4.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\varepsilon}_2(x) &= 2 \left(8x^2 - \frac{1}{2} - \tilde{\mu}_{c4} \right) + \frac{1}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + (x - x')^2} dx' \\
&\quad + \frac{2}{3\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(x - x')^2/9} dx' - \frac{2}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(x - x')^2} dx', \\
\tilde{Q}_2^2 &= \frac{1}{16} + \frac{\tilde{\mu}_{c4}}{8} - \frac{1}{24\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(\tilde{Q}_2 - x')^2/9} dx' \\
&\quad - \frac{1}{16\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + (\tilde{Q}_2 - x')^2} dx' + \frac{1}{8\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(\tilde{Q}_2 - x')^2} dx', \\
\tilde{\mu}_{c4} &= -h + \frac{4}{5\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x)}{1 + 16x^2/25} dx - \frac{4}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x)}{1 + 16x^2} dx,
\end{aligned} \tag{4.18}$$

onde $\tilde{Q}_a = \frac{Q_a}{c}$ e $\tilde{\varepsilon}_a(x) = \frac{8\varepsilon_a(cx)}{c^2}$.

As equações (4.17) e (4.18) são resolvidas numericamente e comparadas com a solução analítica para o regime de acoplamento forte, que é o regime de interesse, como ilustrado na figura 4.3. No regime fortemente interativo podemos obter o diagrama de fase através de um longo processo iterativo utilizando as equações (4.4-4.7) com seus respectivos limites, o que gera o seguinte conjunto de equações para os potenciais químicos

$$\tilde{\mu}_{c1} = -h, \quad \tilde{\mu}_{c2} = -\frac{1}{2}, \tag{4.19}$$

$$\tilde{\mu}_{c3} = -\frac{1}{2} + \frac{8\sqrt{2}}{15\pi} \left(h - \frac{1}{2} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{104}{75\pi^2} \left(h - \frac{1}{2} \right)^2, \tag{4.20}$$

$$\tilde{\mu}_{c4} = -h + \frac{32\sqrt{2}}{15\pi} \left(\frac{1}{2} - h \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{2912}{225\pi^2} \left(\frac{1}{2} - h \right)^2. \tag{4.21}$$

Essas equações irão ter um papel importante no estudo da criticalidade quântica, que será realizado mais adiante nesta tese. As eqs.(4.19) são válidas para qualquer regime, enquanto as equações (4.20) e (4.21) são válidas somente no regime fortemente interativo.

Desta forma é possível determinar o diagrama de fases completo para o modelo a temperatura zero. É interessante observar que em [32] foi apresentado um diagrama de fases no plano $n - H$ que está de acordo com o diagrama aqui apresentado.

4.5 Equação de estado

No ensemble gran-canônico a pressão do sistema funciona como equação de estado, que nos permite entender as propriedades termodinâmicas, fornecendo informações que podem ser utilizadas para comparar a teoria com experimentos. Além disso, a equação de estado também permite extrair informações sobre a criticalidade quântica do sistema ao escrevermos esta equação em termos de funções polilogarítmicas, o que veremos em detalhes na subseção 4.5.2.

4.5.1 Baixas temperaturas

A termodinâmica e a equação de estado do sistema podem ser investigadas através das equações do ABT (4.8-4.10), sendo que em baixas temperaturas nós podemos negligenciar a contribuição dada pela equação (4.10). No limite de acoplamento forte, $|c| \gg 1$, nós podemos usar a expansão de Taylor nas funções a_n , utilizando somente os termos até a ordem de $1/c^2$ nas equações (4.8) e (4.9), resultando em

$$\varepsilon_1(k) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \mu - H - \frac{2p_1}{|c|} + \frac{16p_2}{5|c|}, \quad (4.22)$$

$$\varepsilon_2(k) = \frac{2\hbar^2}{2m}k^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{c^2}{8} - 2\mu + \frac{32p_1}{5|c|} + \frac{p_2}{3|c|}. \quad (4.23)$$

Correções de ordens mais altas podem ser calculadas utilizando mais termos na expansão, mas isso não será necessário. Da equação (4.11) juntamente com as equações (4.22) e (4.23) nós calculamos a pressão para bósons não pareados e pareados, obtendo

$$p_1 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{-1/2} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon_1^0} d\varepsilon_1^0}{1 + e^{(\varepsilon_1^0 - A_1^0)/T}}, \quad (4.24)$$

$$p_2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{-1/2} \frac{\sqrt{2}}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon_2^0} d\varepsilon_2^0}{1 + e^{(\varepsilon_2^0 - A_2^0)/T}}, \quad (4.25)$$

onde

$$A_1^0 = \mu + H + \frac{2p_1}{|c|} - \frac{16p_2}{5|c|}, \quad (4.26)$$

$$A_2^0 = 2\mu + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{c^2}{8} - \frac{32p_1}{5|c|} - \frac{p_2}{3|c|}. \quad (4.27)$$

As integrais em (4.24) e (4.25) podem ser calculadas explicitamente usando a expansão de Sommerfeld [67]. A_1^0 (A_2^0) corresponde ao potencial de corte para o “mar de Fermi” relacionado aos bôsons não-pareados (bôsons pareados).

Das equações (4.22-4.27) juntamente com as relações $n_1 = \frac{\partial p}{\partial H}$, $n = n_1 + 2n_2 = \frac{\partial p}{\partial \mu}$, após iterações longas e trabalhosas nós obtivemos a pressão do sistema para bôsons não-pareados e pareados, que será usada como a equação de estado do sistema

$$p_1 = \frac{2\pi^2 n_1^3}{3} \left(1 - \frac{6n_1}{|c|} + \frac{96n_2}{5|c|} \right) + \frac{T^2}{6n_1} \left(1 + \frac{2n_1}{|c|} - \frac{32n_2}{5|c|} \right), \quad (4.28)$$

$$p_2 = \frac{\pi^2 n_2^3}{3} \left(1 + \frac{48n_1}{5|c|} + \frac{n_2}{|c|} \right) + \frac{T^2}{3n_2} \left(1 - \frac{16n_1}{5|c|} - \frac{n_2}{3|c|} \right). \quad (4.29)$$

A energia livre de Helmholtz por unidade de comprimento é dada por $f = n\mu - p$. Desta forma, após mais um processo iterativo longo nós obtemos

$$f = f_0 - \frac{\pi T^2}{6} \left(\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right), \quad (4.30)$$

onde f_0 é a energia livre de Helmholtz para o estado fundamental já apresentada em [32], sendo $v_{1,2}$ as velocidades de grupo das partículas não-pareadas e pareadas, respectivamente, dadas por

$$v_1 = 2\pi n_1 \left(1 + \frac{2(32n_2 - 10n_1)}{5|c|} \right), \quad (4.31)$$

$$v_2 = \pi n_2 \left(1 + \frac{2(48n_1 + 5n_2)}{15|c|} \right). \quad (4.32)$$

A entropia do sistema é dada por $s = -\frac{\partial f}{\partial T}$, o que resulta em

$$s = \frac{\pi T}{3} \left(\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right). \quad (4.33)$$

Desta forma podemos observar que a termodinâmica do sistema é descrita como um líquido de Tomanaga-Luttinger (LTL), onde a entropia cresce linearmente com a temperatura. Porém isto não é apropriado para descrevermos a criticalidade quântica, pois aqui não levamos em consideração a contribuição dada pelas flutuações de spin (eq. (4.10)), o que então iremos desenvolver na próxima seção.

4.5.2 Função polilogaritmica

Agora nós vamos considerar todas as equações do ABT (4.8 - 4.10), inclusive a eq. (4.10). Seguindo o método proposto em [59], essas equações podem ser escritas em termos da função polilogaritmica, onde levaremos em consideração que estamos no regime fortemente interativo, $T|c| \rightarrow \infty$. Desta forma iremos expandir as funções a_n em série de Taylor, usando a definição de pressão dada em (4.11). Resolvendo algumas integrações por partes nós obtivemos que as energias vestidas podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= \frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \mu - H - \frac{2|c|p_1}{c^2 + k^2} - \frac{T^{\frac{5}{2}}}{2\sqrt{\pi}|c|^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{3}{2}}} Li_{\frac{5}{2}}\left(-e^{\frac{A_1^0}{T}}\right) \\ &+ 4|c|p_2 \left(\frac{1}{c^2 + 16k^2} - \frac{5}{25c^2 + 16k^2} \right) + \frac{1984T^{\frac{5}{2}}}{125\sqrt{2\pi}|c|^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{3}{2}}} Li_{\frac{5}{2}}\left(-e^{\frac{A_2^0}{T}}\right) \\ &- Te^{-\frac{H}{T}} e^{-\frac{\bar{K}}{4}} \left[\left(1 - \frac{2k^2}{c^2} + \frac{2\bar{K}'}{16}\right) I_0\left(\frac{\bar{K}}{4}\right) + \left(\frac{2k^2}{c^2} - \frac{\bar{K}'}{4}\right) I_1\left(\frac{\bar{K}}{4}\right) - \frac{\bar{K}'}{16} I_2\left(\frac{\bar{K}}{4}\right) \right], \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(k) &= \frac{2\hbar^2}{2m}k^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^2}{8} - 2\mu + 8|c|p_1 \left(\frac{1}{c^2 + 16k^2} - \frac{5}{25c^2 + 16k^2} \right) \\ &+ \frac{3968T^{\frac{5}{2}}}{125\sqrt{2\pi}|c|^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{3}{2}}} Li_{\frac{5}{2}}\left(-e^{\frac{A_1^0}{T}}\right) + \frac{181T^{\frac{5}{2}}}{108\sqrt{2\pi}|c|^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{3}{2}}} Li_{\frac{5}{2}}\left(-e^{\frac{A_2^0}{T}}\right) \\ &+ |c|p_2 \left(\frac{2}{c^2 + 4k^2} - \frac{1}{c^2 + k^2} - \frac{6}{9c^2 + 4k^2} \right), \end{aligned} \quad (4.35)$$

onde $Li_s(z) = \sum_{k=1}^{\infty} z^k/k^s$ é a função polilogaritmica, $\bar{K} = 8p_1/T|c|$, $\bar{K}' = \frac{32T^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi}|c|^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{3}{2}}} Li_{\frac{5}{2}}\left(-e^{\frac{A_1^0}{T}}\right)$ e $I_n(z) = \sum_{\gamma=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{n+2\gamma}}{\gamma!(n+\gamma)!}$ é a contribuição dada pelas flutuações de “spin”. As pressões são dadas por

$$p_1 = -\frac{T^{\frac{3}{2}}}{\left(\frac{4\pi\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{2}}} f_{\frac{3}{2}}^1 \left(1 - \frac{p_1}{|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2} + \frac{3968p_2}{125|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2}\right), \quad (4.36)$$

$$p_2 = -\frac{T^{\frac{3}{2}}}{\left(\frac{2\pi\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{2}}} f_{\frac{3}{2}}^2 \left(1 + \frac{3968p_1}{125|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2} + \frac{181p_2}{108|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2}\right), \quad (4.37)$$

onde nós definimos $f_s^i = Li_s\left(-e^{\frac{A_i}{T}}\right)$, com $i = 1, 2$ para facilitar a notação, e temos que

$$\begin{aligned} A_1 &= \mu + H + \frac{2p_1}{|c|} - \frac{16p_2}{5|c|} + \frac{T^{\frac{5}{2}}}{|c|^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} f_{\frac{5}{2}}^1 - \frac{1984}{125\sqrt{2\pi}} f_{\frac{5}{2}}^2 \right) \\ &\quad + Te^{-\frac{H}{T}} e^{-\frac{\bar{K}}{4}} I_0\left(\frac{\bar{K}}{4}\right), \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$A_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^2}{8} + 2\mu - \frac{32p_1}{5|c|} - \frac{p_2}{3|c|} - \frac{T^{\frac{5}{2}}}{|c|^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3968}{125\sqrt{\pi}} f_{\frac{5}{2}}^1 + \frac{181}{108\sqrt{2\pi}} f_{\frac{5}{2}}^2 \right). \quad (4.39)$$

As equações para pressões fornecem uma equação de estado precisa para estudarmos o comportamento do sistema num regime quântico. Do conjunto de equações (4.36 - 4.39) nós obtivemos numericamente a entropia do sistema $S = \frac{\partial p}{\partial T}$. Podemos notar que a entropia não evolui linearmente com a temperatura.

Na figura 4.4 nós apresentamos a entropia como função da temperatura utilizando duas aproximações distintas: (i) a expansão de Sommerfeld (4.33) e (ii) função polilogarítmica (4.36 - 4.39). Desta forma podemos determinar a fronteira entre o regime semi-clássico descrito pelo LTL discutido na subseção 4.5.1 e o regime crítico quântico. Em baixíssimas temperaturas as duas teorias exibem uma concordância excelente, sendo assim a fronteira é determinada pelo valor da temperatura onde as curvas começam a se separar, ou seja, quando a entropia deixa de ter um comportamento linear com a temperatura fornecendo as fronteiras entre as fases LTL e o regime crítico quântico nas figuras 4.5 e 4.8.

4.6 Criticalidade quântica

Criticalidade quântica descreve o comportamento de um sistema com temperatura próximo a uma transição de fase quântica, ou seja, descreve fases de grande número de partículas interagindo em temperaturas baixas o suficiente para que a mecânica quântica tenha um papel importante na determinação das propriedades do sistema. [41].

Na Fig. 4.5 nós apresentamos as curvas de níveis da entropia no plano $T - \mu$ para dois valores do campo magnético externo. Nós podemos ver as fronteiras entre as fases

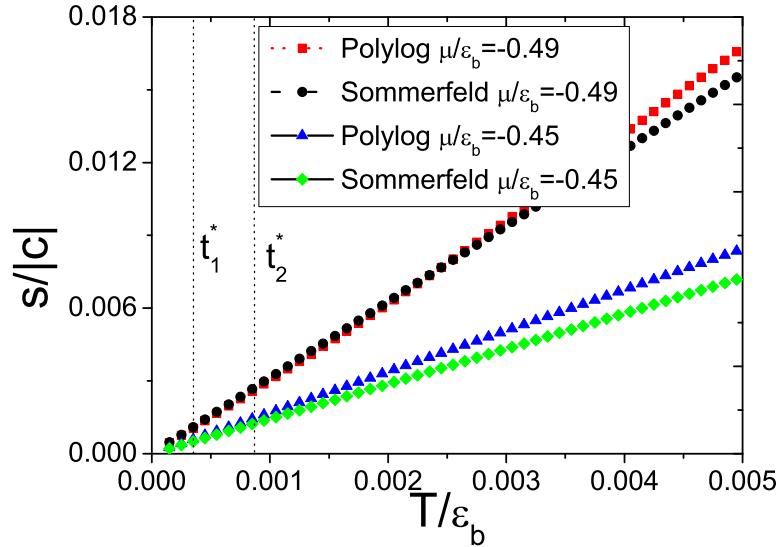


Fig. 4.4: Entropia versus temperatura utilizando as equações (4.33) (Sommerfeld) e (4.36 - 4.39) (função polilogarítmica) para $\mu = -0.49$ e $\mu = -0.45$. O valor para t onde as curvas se separam determina o t^* , que gera as fronteiras entre as fases LTL e o regime crítico quântico nas figuras 4.5 e 4.8.

LTL (regime quase-clássico) e o regime crítico quântico. Na figura 4.5 a TLL_S , a TLL_M e a TLL_F são as fases singleto, a fase mista e a ferromagnética do líquido de Tomonaga-Luttinger respectivamente (sigla aqui mantida em inglês).

O comportamento crítico quântico é refletido através de singularidades em quantidades termodinâmicas como densidade n e magnetização M , cujas expressões são derivadas da pressão do sistema p com relação a μ e H , respectivamente; também investigaremos a compressibilidade $\kappa = \partial n / \partial \mu$ e susceptibilidade $\chi = \partial M / \partial H$. Para estudarmos a criticalidade quântica não é necessário levar em contas termos em alta ordem ($1/|c|^3$) de correção, sendo assim as equações (4.36) e (4.37) podem ser simplificadas em

$$\tilde{p} = -\frac{t^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{2}f_{\frac{3}{2}}^1 + \frac{1}{\sqrt{2}}f_{\frac{3}{2}}^2 \right), \quad (4.40)$$

onde nós definimos $\tilde{p} = p/|c|\epsilon_b$ e $t = T/\epsilon_b$, com

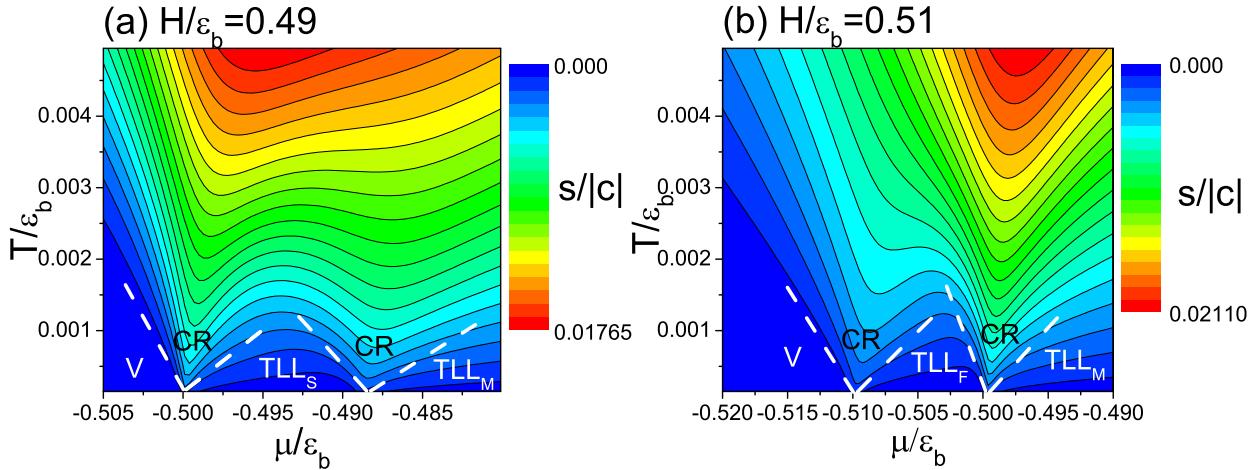


Fig. 4.5: Curvas de níveis da entropia S no plano $\mu - t$ das equações (4.36) e (4.37) para dois valores do campo magnético externo (a) $h = 0.49$ (b) $h = 0.51$. As linhas tracejadas separam o regime semi-classico (TLL) do regime crítico quântico. No limite $t \rightarrow 0$ ambos métodos (Sommerfeld e função polilogarítmica) coincidem e nós reobtemos os mesmos valores para os potenciais químicos críticos obtidos através das energias vestidas (4.13); em temperatura finita, o sistema apresenta a universal criticalidade quântica na forma típica de V .

$$\tilde{A}_1 = \tilde{\mu} + h + 2\tilde{p}_1 - \frac{16\tilde{p}_2}{5}, \quad (4.41)$$

$$\tilde{A}_2 = 1 + 2\tilde{\mu} - \frac{32\tilde{p}_1}{5} - \frac{\tilde{p}_2}{3}. \quad (4.42)$$

Depois de um processo iterativo longo utilizando as equações (4.40), (4.41) e (4.42), nós obtivemos a expressão para densidade

$$\tilde{n} = -\frac{\sqrt{t}}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{2} f_{1/2}^1 \Delta_1 + \sqrt{2} f_{1/2}^2 \Delta_2 \right), \quad (4.43)$$

onde definimos $\tilde{n} \equiv n/|c|$ e

$$\Delta_1 = 1 - \frac{t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{t}{8\pi} (f_{1/2}^1)^2 + \frac{8t^{1/2}}{5\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 + \frac{2t}{15\pi} (f_{1/2}^2)^2 + \frac{12t}{25\pi\sqrt{2}} f_{1/2}^1 f_{1/2}^2, \quad (4.44)$$

$$\Delta_2 = 1 + \frac{4t^{1/2}}{5\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 - \frac{t}{5\pi}(f_{1/2}^1)^2 + \frac{t^{1/2}}{12\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 + \frac{t}{144\pi}(f_{1/2}^2)^2 + \frac{101t}{75\pi\sqrt{2}}f_{1/2}^1 f_{1/2}^2. \quad (4.45)$$

Da mesma forma temos para a magnetização $\tilde{M} \equiv M/|c|$,

$$\begin{aligned} \tilde{M} = & -\frac{\sqrt{t}}{2\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{1}{2}f_{1/2}^1 \left(1 - \frac{t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 + \frac{t}{8\pi}(f_{1/2}^1)^2 + \frac{32t}{25\pi\sqrt{2}}f_{1/2}^1 f_{1/2}^2 \right) \right. \\ & \left. + \sqrt{2}f_{1/2}^2 \left(\frac{4t^{1/2}}{5\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 - \frac{t}{5\pi}(f_{1/2}^1)^2 + \frac{t}{15\pi\sqrt{2}}f_{1/2}^1 f_{1/2}^2 \right) \right\}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

susceptibilidade $\tilde{\chi} \equiv \chi\epsilon_b/|c|$, com $\chi = \partial M/\partial H$,

$$\begin{aligned} \tilde{\chi} = & -\frac{1}{2\sqrt{2\pi t}} \left\{ \frac{1}{2}f_{-1/2}^1 \left(1 - \frac{3t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 + \frac{3t}{4\pi}(f_{1/2}^1)^2 + \frac{8t^{1/2}}{5\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 + \frac{2t}{15\pi}(f_{1/2}^1)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{36t}{25\pi\sqrt{2}}f_{1/2}^1 f_{1/2}^2 \right) + f_{-1/2}^2 \frac{32t}{25\pi\sqrt{2}}(f_{1/2}^1)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (4.47)$$

e por sua vez para a compressibilidades $\tilde{\kappa} \equiv \kappa\epsilon_b/|c|$, com $\kappa = \partial n/\partial \mu$

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa} = & -\frac{1}{2\sqrt{2\pi t}} \left\{ \frac{1}{2}f_{-1/2}^1 \left[(\Delta_1)^2 - \frac{t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 \left(1 - \frac{3t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 + \frac{16t^{1/2}}{25\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 \right) \right. \right. \\ & + \frac{2t^{1/2}}{5\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 \left(1 - \frac{3t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 + \frac{197t^{1/2}}{60\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 \right) \left. \right] \\ & + 2\sqrt{2}f_{-1/2}^2 \left[(\Delta_2)^2 + \frac{4t^{1/2}}{5\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 \left(1 + \frac{11t^{1/2}}{10\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 + \frac{t^{1/2}}{4\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 \right) \right. \\ & \left. \left. + \frac{t^{1/2}}{12\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 \left(1 + \frac{424t^{1/2}}{25\sqrt{2\pi}}f_{1/2}^1 + \frac{t^{1/2}}{4\sqrt{\pi}}f_{1/2}^2 \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

4.6.1 Análise utilizando o potencial químico μ

O sistema exibe um comportamento universal nas vizinhanças dos pontos críticos $\tilde{\mu}_c$. Seguindo o algorítimo proposto em [42, 59] para investigar a criticalidade quântica, nós obtivemos a função de escala universal para densidade e magnetização fazendo os limites $T \rightarrow 0$ e $\tilde{\mu} \rightarrow \tilde{\mu}_c$ nas equações \tilde{n} (4.43) e \tilde{M} (4.46), o que gera

$$(V - F) \quad \begin{aligned} \tilde{n} &\simeq -\frac{\sqrt{t}}{4\sqrt{2}\pi} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c1}}{t}} \right), \\ \tilde{M} &\simeq -\frac{\sqrt{t}}{4\sqrt{2}\pi} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c1}}{t}} \right), \end{aligned} \quad (4.49)$$

$$(V - S) \quad \begin{aligned} \tilde{n} &\simeq -\frac{\sqrt{t}}{2\sqrt{\pi}} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c2})}{t}} \right), \\ \tilde{M} &\simeq \frac{2t}{5\pi\sqrt{2}} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c2})}{t}} \right) \sim 0, \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$(F - MP) \quad \begin{aligned} \tilde{n} &\simeq \tilde{n}_{03} - \lambda_1 \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c3})}{t}} \right), \\ \tilde{M} &\simeq \tilde{n}_{03} + \lambda_2 \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c3})}{t}} \right), \end{aligned} \quad (4.51)$$

$$(S - MP) \quad \begin{aligned} \tilde{n} &\simeq \tilde{n}_{04} - \lambda_3 \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c4}}{t}} \right), \\ \tilde{M} &\simeq -\lambda_4 \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c4}}{t}} \right), \end{aligned} \quad (4.52)$$

onde \tilde{n}_{03} , \tilde{n}_{04} , λ_1 , λ_2 , λ_3 , λ_4 , a e b são constantes independentes de $\tilde{\mu}$ e t . Suas expressões são dadas por

$$a = \left(h - \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{13\sqrt{2}}{15\pi} \sqrt{h - \frac{1}{2}} \right), \quad b = 2 \left(\frac{1}{2} - h \right) \left(1 + \frac{91\sqrt{2}}{45\pi} \sqrt{\frac{1}{2} - h} \right), \quad (4.53)$$

$$\tilde{n}_{03} = \frac{\sqrt{a}}{2\pi\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\sqrt{a}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{a}{2\pi^2} \right), \quad \tilde{n}_{04} = \frac{\sqrt{b}}{\pi} \left(1 - \frac{\sqrt{b}}{6\pi} + \frac{b}{36\pi^2} \right), \quad (4.54)$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{16\sqrt{a}}{5\pi\sqrt{2}} - \frac{8a}{25\pi^2} \right), \quad \lambda_2 = \frac{4\sqrt{a}}{5\sqrt{2}\pi^{3/2}} \left(1 - \frac{3\sqrt{a}}{5\pi\sqrt{2}} \right), \quad (4.55)$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{32\sqrt{b}}{5\pi} + \frac{848b}{75\pi^2} \right), \quad \lambda_4 = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{16\sqrt{b}}{5\pi} + \frac{8b}{15\pi^2} \right), \quad (4.56)$$

Nas equações acima \tilde{n}_{03} e \tilde{n}_{04} são as densidades de fundo próximas aos pontos críticos $\tilde{\mu}_{c3}$ e $\tilde{\mu}_{c4}$, respectivamente. Nesse regime de criticalidade quântica, as densidades podem ser escritas em uma forma universal [41].

$$n(\mu, T) = n_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{1}{\nu z}} \mathcal{G} \left(\frac{\mu - \mu_c}{T^{\frac{1}{\nu z}}} \right), \quad (4.57)$$

onde d é a dimensionalidade, z é o expoente crítico dinâmico e ν é o expoente crítico do comprimento de correlação. Como para nosso sistema $d = 1$, o que nos leva a $z = 2$ e $\nu = 1/2$ que são computados por comparação das expressões (4.49-4.52) com 4.57.

Nas figuras 4.6 e 4.7 nós plotamos a “densidade escalonada” $T^{-(\frac{d}{z}+1-\frac{1}{\nu z})}(n(\mu, T) - n_0)$ versus $\tilde{\mu}$ para diferentes temperaturas. Podemos notar que todas as curvas intersectam no mesmo ponto $\tilde{\mu} = \tilde{\mu}_c$, e isto só ocorre se z e ν assumirem seus valores corretos [42].

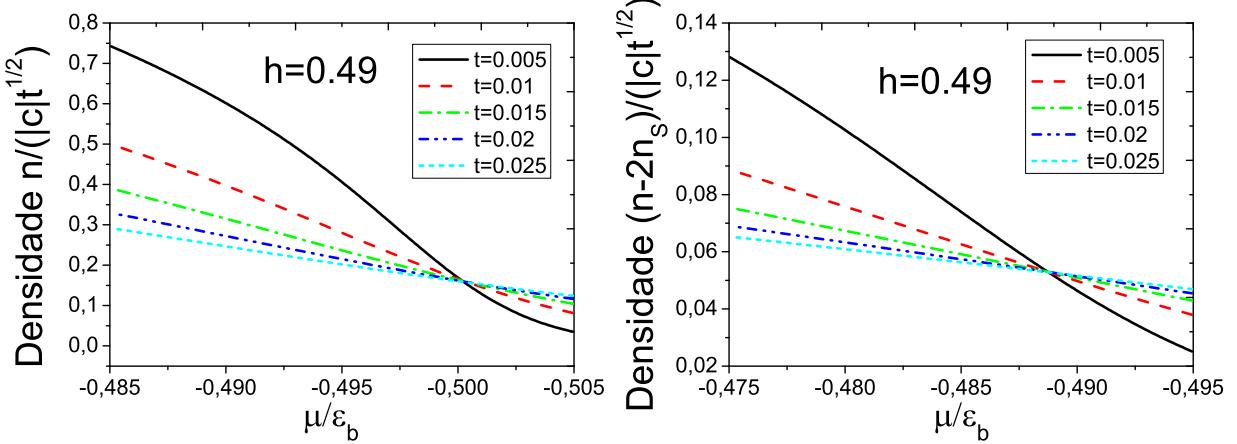


Fig. 4.6: “Densidade escalonada” versus potencial químico quando $h = 0.49$ para diferentes temperaturas $T/\epsilon_b = 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$ e 0.025 . A intersecção fornece os valores críticos para o potencial químico nas transições $(V - S)$ sendo $\tilde{\mu}_{c2} = -0.5$ e $(S - MP)$ sendo $\tilde{\mu}_{c4} \approx -0.489$, da esquerda para direita.

Fazendo uma análise similar para a compressibilidade, nós obtivemos

$$(V - F) \quad \tilde{\kappa} \simeq -\frac{1}{4\sqrt{2\pi t}} Li_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c1}}{t}} \right), \quad (4.58)$$

$$(V - S) \quad \tilde{\kappa} \simeq -\frac{1}{\sqrt{\pi t}} Li_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c2})}{t}} \right), \quad (4.59)$$

$$(F - MP) \quad \tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{03} - \frac{\lambda_5}{\sqrt{t}} Li_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c3})}{t}} \right), \quad (4.60)$$

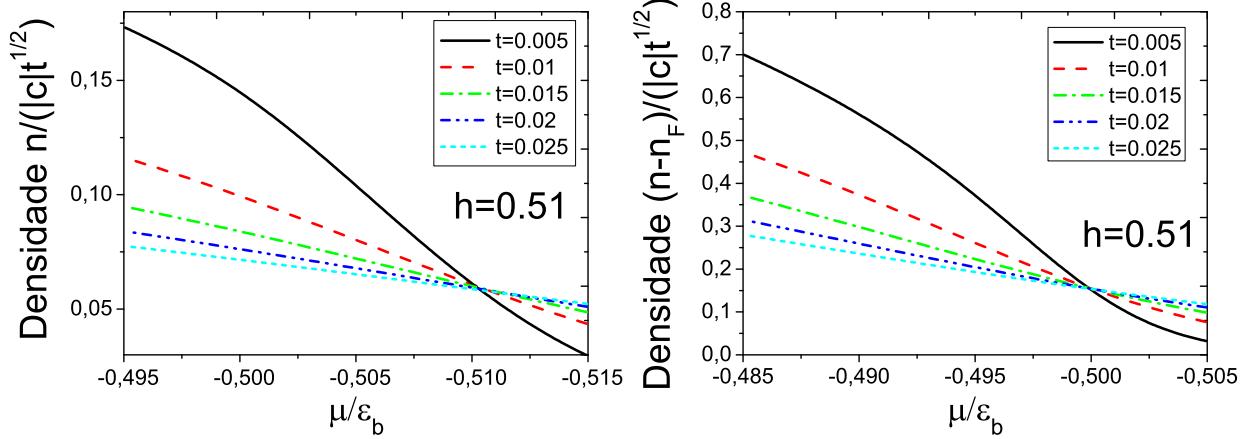


Fig. 4.7: “Densidade escalonada” versus potencial químico quando $h = 0.49$ para diferentes temperaturas $T/\epsilon_b = 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$ e 0.025 . A intersecção fornece os valores críticos para o potencial químico nas transições ($V - F$) sendo $\tilde{\mu}_{c1} = -0.51$ e ($F - MP$) sendo $\tilde{\mu}_{c3} \approx -0.499$, da esquerda para direita.

$$(S - MP) \quad \tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{04} - \frac{\lambda_6}{\sqrt{t}} Li_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_{c4}}{t}} \right), \quad (4.61)$$

onde $\tilde{\kappa}_{03}$, $\tilde{\kappa}_{04}$, λ_5 e λ_6 são dados

$$\tilde{\kappa}_{03} = \frac{1}{4\pi\sqrt{2a}} \left(1 + \frac{3\sqrt{a}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{3a}{\pi^2} \right), \quad \lambda_5 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{24\sqrt{a}}{5\pi\sqrt{2}} + \frac{36a}{25\pi^2} \right), \quad (4.62)$$

$$\tilde{\kappa}_{04} = \frac{1}{\pi\sqrt{b}} \left(1 - \frac{\sqrt{b}}{2\pi} + \frac{b}{6\pi^2} \right), \quad \lambda_6 = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{36\sqrt{b}}{5\pi} + \frac{414b}{25\pi^2} \right). \quad (4.63)$$

Os expoentes críticos $z = 2$ e $\nu = 1/2$ são novamente computados a partir de uma função de escala universal.

$$\kappa(\mu, T) = \kappa_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{2}{\nu z}} \mathcal{F} \left(\frac{\mu - \mu_c}{T^{\frac{1}{\nu z}}} \right), \quad (4.64)$$

com a função universal escalonada $\mathcal{F}(x) = Li_{-\frac{1}{2}}(x)$. Nós podemos encontrar um comportamento similar quando definimos a compressibilidade escalonada como $(\kappa(\mu, T) - \kappa_0)T^{-(\frac{d}{z}+1-\frac{2}{\nu z})}$ é graficada versus o potencial químico, como será feito na seção sobre aproximação de densidade local (ADL).

4.6.2 Análise utilizando o campo magnético externo

Nós podemos fazer uma análise similar a feita na subseção anterior, deixando o potencial químico constante e variando o campo magnético externo H . Nesta situação vamos analisar somente duas transições de fases quânticas, da fase singlet S para fase mista M e da fase ferromagnética F para M , ou seja iremos fixar μ em um valor superior a 0.5. Os valores críticos para os campos magnéticos serão dados por

$$h_{c1} = -\tilde{\mu} + \frac{32\sqrt{2}}{15\pi} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{3}{2}} - \frac{32}{45\pi^2} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (4.65)$$

$$h_{c2} = -\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \left(\frac{15\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} - \frac{5}{8} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.66)$$

onde fizemos várias iterações de forma similar as feitas no processo da obtenção das equações (4.20) e (4.21). Estes pontos críticos podem ser verificados na figura 4.8, que apresenta as curvas de nível da entropia, quando variamos o valor de h para $T = 0$. Novamente temos o comportamento típico da criticalidade quântica: quando aumentamos o valor da temperatura, os pontos críticos expandem em uma região de forma V.

Das equações (4.43),(4.46) e (4.48) nós encontramos as funções de escala no regime crítico quântico usando as equações (4.65) e (4.66)

$$\tilde{n} \simeq \tilde{n}_{05} - \lambda_7 \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{h-h_{c1}}{t}} \right),$$

$$(S - MP) \quad \tilde{M} \simeq -\lambda_8 \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{h-h_{c1}}{t}} \right), \quad (4.67)$$

$$\tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{05} - \frac{\lambda_9}{\sqrt{t}} Li_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{h-h_{c1}}{t}} \right),$$

$$\tilde{n} \simeq \tilde{n}_{06} - \lambda_{10} \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\alpha(h-h_{c2})}{t}} \right),$$

$$(F - MP) \quad \tilde{M} \simeq \tilde{n}_{06} + \lambda_{11} \sqrt{t} Li_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\alpha(h-h_{c2})}{t}} \right), \quad (4.68)$$

$$\tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{06} - \frac{\lambda_{12}}{\sqrt{t}} Li_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\alpha(h-h_{c2})}{t}} \right),$$

sendo as constantes dadas por

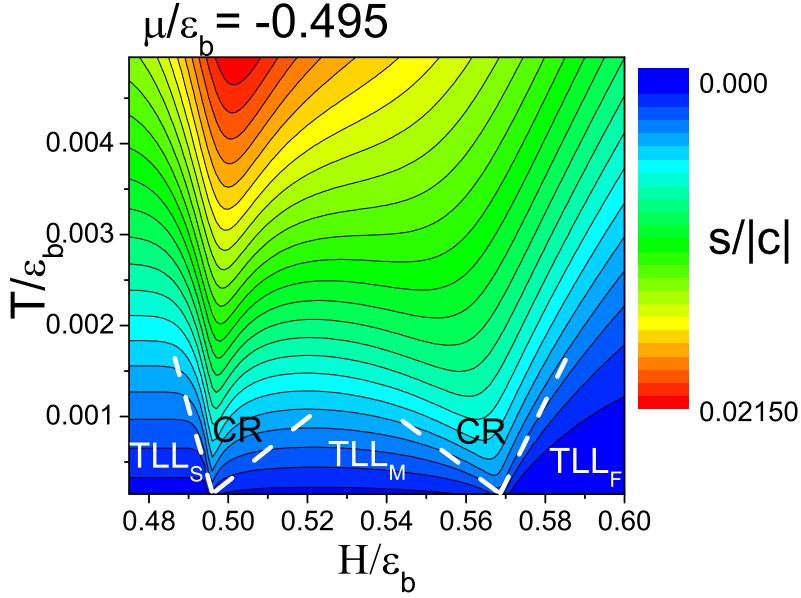


Fig. 4.8: Curvas de nível da entropia \$S\$ no plano \$H - t\$, extraídas numericamente das equações (4.36) e (4.37) para o potencial químico \$\tilde{\mu} = -0.495\$. As linhas tracejadas separam o regime quase-clássico (LTL) do regime crítico. No limite \$t \rightarrow 0\$ ambos métodos (Sommerfeld e polilogaritimico) coincidem; em temperatura finita, o sistema apresenta um comportamento universal em forma de V para o regime crítico quântico.

$$d = 2 \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right) \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\tilde{\mu} + \frac{1}{2}} \right), \quad e = \frac{1}{2} \left(\frac{15\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (4.69)$$

$$\alpha = -\frac{8}{5\pi} \left(\frac{15\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad \lambda_7 = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{32\sqrt{d}}{5\pi} + \frac{848d}{75\pi^2} \right), \quad (4.70)$$

$$\lambda_8 = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{16\sqrt{d}}{5\pi} + \frac{8d}{15\pi^2} \right), \quad \lambda_9 = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{36\sqrt{d}}{5\pi} + \frac{414d}{25\pi^2} \right), \quad (4.71)$$

$$\lambda_{10} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{16\sqrt{e}}{5\pi\sqrt{2}} - \frac{8e}{25\pi^2} \right), \quad \lambda_{11} = \frac{4\sqrt{e}}{5\sqrt{2}\pi^{3/2}} \left(1 - \frac{3\sqrt{e}}{5\pi\sqrt{2}} \right) \quad (4.72)$$

$$\lambda_{12} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{24\sqrt{e}}{5\pi\sqrt{2}} + \frac{36e}{25\pi^2} \right), \quad \tilde{n}_{05} = \frac{\sqrt{d}}{\pi} \left(1 - \frac{\sqrt{d}}{6\pi} + \frac{d}{36\pi^2} \right), \quad (4.73)$$

$$\tilde{n}_{06} = \frac{\sqrt{e}}{2\pi\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\sqrt{e}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{e}{2\pi^2} \right), \quad \tilde{\kappa}_{05} = \frac{1}{\pi\sqrt{d}} \left(1 - \frac{\sqrt{d}}{2\pi} + \frac{d}{6\pi^2} \right), \quad (4.74)$$

$$\tilde{\kappa}_{06} = \frac{1}{4\pi\sqrt{2e}} \left(1 + \frac{3\sqrt{e}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{3e}{\pi^2} \right). \quad (4.75)$$

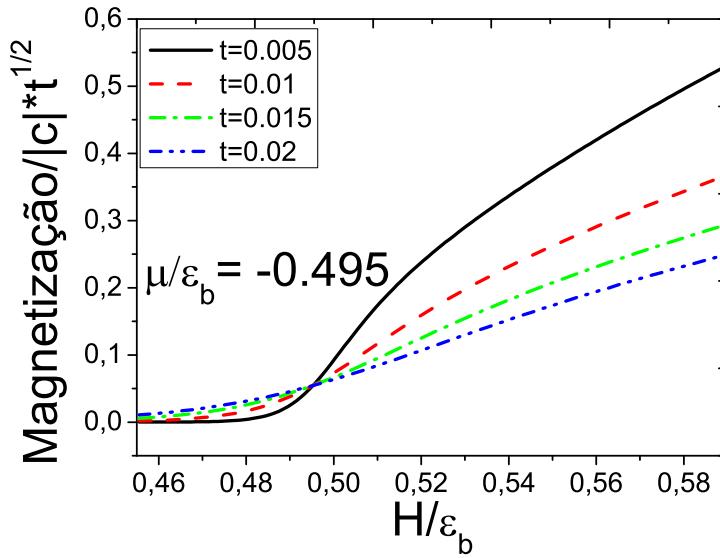


Fig. 4.9: Magnetização versus campo magnético externo para $\tilde{\mu} = -0.495$ para diferentes valores de t ; a interseção fornece o valor do campo magnético crítico para a transição de fase quântica ($S - MP$). Este resultado está consistente com a função de escala universal para a magnetização.

Aqui nós observamos um comportamento similar ao caso anterior, onde fixamos h e variamos o potencial químico. Assim também podemos escrever a densidade em uma função de escala universal

$$n(h, T) = n_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{1}{\nu z}} \mathcal{G} \left(\frac{h - h_c}{T^{\frac{1}{\nu z}}} \right). \quad (4.76)$$

Na figura 4.9 nós plotamos a magnetização versus o campo magnético externo para diferentes temperaturas e para um valor do potencial químico perto da transição de fase quântica. Como esperado, todas as curvas se intersectam no mesmo ponto critico h_{c1} , confirmando o comportamento universal.

4.7 Potencial harmônico e ADL

Nesta seção iremos usar a aproximação de densidade local (ADL) para colocarmos o nosso modelo dentro de uma armadilha magnética com potencial harmônico, ou seja iremos fazer um processo similar ao realizado em [70] para fitar os dados experimentais obtidos em [16].

Uma vez que o número de bôsons é suficientemente grande, podemos aplicar a ADL neste caso [70]. Desta maneira a equação de estado (4.40) pode ser reformulada usando a aproximação de densidade local para acomodar a armadilha com potencial harmônico, através de uma simples redefinição do potencial químico como $\mu(x) = \mu(0) - \frac{1}{2}m\omega_x^2x^2$ onde x é a posição e ω_x é a frequência no interior da armadilha. [70, 71].

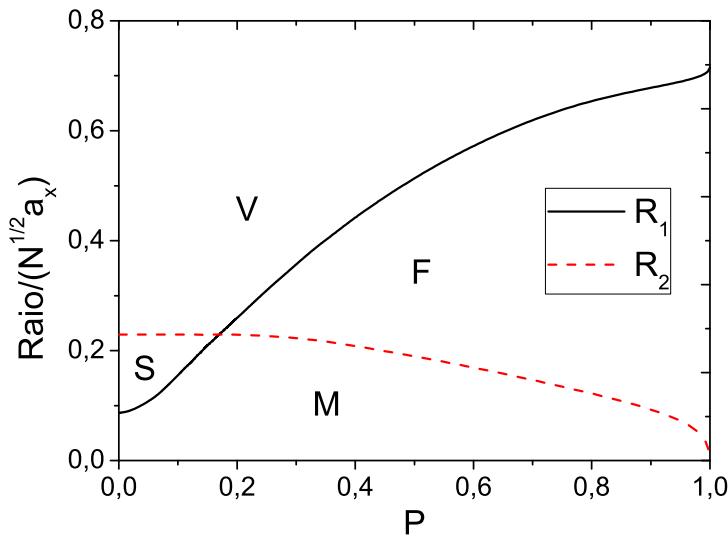


Fig. 4.10: Diagrama de fases com temperaturas muito próximas de zero. Raio normalizado $R/a_x N^{1/2}$ versus a polarização P para $N/(a_x^2 c^2) = 0.05$. Aqui R_2 é a posição ao longo da armadilha, onde a densidade de bôsons pareados (linha tracejada) vai a zero e R_1 é a posição onde a densidade de bôsons não-pareados (linha sólida) vai a zero. Os raios se cruzam em $P_c \approx 0.17$.

Usando o potencial químico adimensional, $\tilde{\mu}(\tilde{x}) = \tilde{\mu}(0) - 8\tilde{x}^2$ onde $\tilde{x} = x/a_x^2|c|$ e $a_x = \sqrt{\hbar/m\omega_x}$ é o raio característico do oscilador harmônico. Assim o número de partículas e a polarização são dados, respectivamente, por

$$\frac{N}{a_x^2 c^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{n}(\tilde{x}) d\tilde{x},$$

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{n}_1(\tilde{x}) d\tilde{x} / (N/(a_x^2 c^2)). \quad (4.77)$$

Combinando a equação de estado (4.40) no limite $t \rightarrow 0$ juntamente com as equações (4.77) nós podemos construir o diagrama de fases apresentado na Figura 4.10. As fronteiras entre as fases são determinadas da condição em que as densidades dos bôsons pareados e não-pareados vão a zero, determinando assim os raios R_2 e R_1 respectivamente. A intersecção ocorre quando $h = 0.5$ e $\mu = 0.5$, levando ao valor crítico da polarização $P_c \approx 16.97\%$. Este resultado está em completa concordância com o diagrama obtido na figura 4.3.

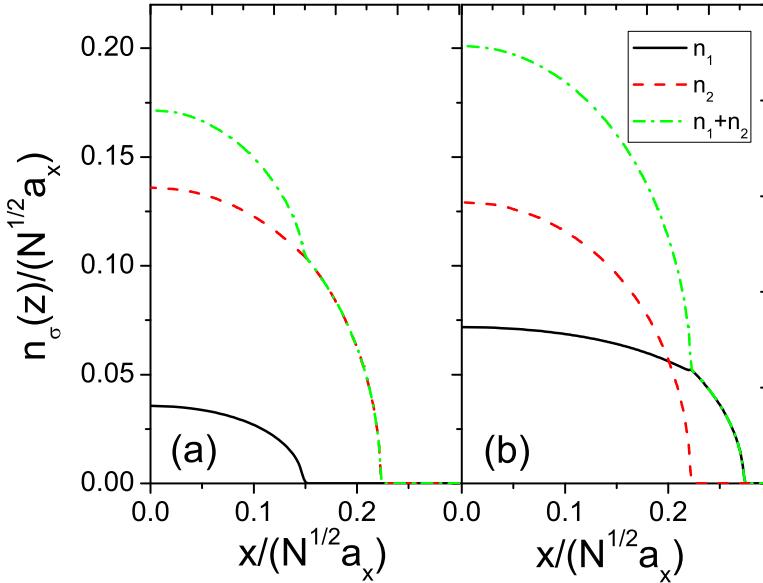


Fig. 4.11: Diagrama típico da densidade normalizada para bôsons no interior da armadilha com $N/a_x^2 c^2 \simeq 0.05$ para (a) $P \approx 12.22\%$ (ou $h = 0.49$) e (b) $P \approx 22.33\%$ (ou $h = 0.51$).

Do ponto de vista experimental, as quantidades medidas são as densidades (maiores detalhes podem ser encontrados em [16] para o caso de fermions de duas componentes). Assim, na Fig 4.11 nós ilustramos a densidade no limite $T \rightarrow 0$ para $N/a_x^2 c^2 \simeq 0.05$ para os

dois casos (a) baixa polarização ($P < P_c$) - $P \approx 12.22\%$, onde nós temos a intersecção entre a fase singlet e a fase mista, em concordância com a Fig 4.3. Nós podemos verificar também que a fase mista ocupa a maior parte da armadilha localizando-se no centro da nuvem enquanto o estado singlet ocorre nas bordas da nuvem; (b) alta polarização ($P > P_c$) - $P_c - P \approx 22.33\%$, onde nós temos a intersecção entre a fase ferromagnética e a fase mista; aqui novamente a fase mista encontra-se no centro da armadilha, e a fase ferromagnética encontra-se nas extremidades. Sendo assim nosso resultado indica que o gás de bósons com spin-1 em uma armadilha unidimensional com potencial harmônico é um excelente simulador quântico que poderia ser observado via imagem *in situ*, análogo ao gás de Fermi de 6Li em 1D [16].

Cabe ainda verificar o comportamento do sistema no interior da armadilha com temperaturas finitas. Nas figuras 4.12 e 4.13 nós plotamos a densidade escalonada e compressibilidade escalonada versus a posição para diferentes valores de temperatura. Podemos observar que o comportamento universal previsto nas equações (4.57) e (4.64) no interior da armadilha com potencial harmônico permanece, dando assim a exata posição para os valores críticos dos potenciais químicos. Tendo os valores críticos para os potenciais químicos, outro meio de se checar a universalidade é graficar as densidades escalonadas em termos dos potenciais escalados $(\mu(x) - \mu_c)/T^{z\nu}$: todas as curvas para diferentes valores de temperatura irão colapsar em uma única curva, como podemos ver na figura 4.14.

4.8 Conclusão

Neste capítulo nós estudamos o modelo exatamente solúvel para um gás de bósons de “spin-1” com interações do tipo densidade e troca de “spin” na forma de função δ , através do ansatz de Bethe termodinâmico, o que nos permitiu a obtenção do diagrama de fases do modelo em $T = 0$. Através do ABT nós também obtivemos a equação de estado para temperaturas finitas, possibilitando assim o estudo da criticalidade quântica para o modelo. Neste contexto obtivemos as funções de escala para densidade, compressibilidade e magnetização, onde pudemos computar os expoentes críticos $z = 2$ e $\nu = 1/2$, colocando assim este sistema na mesma classe de universalidade do gás Fermi “spin-1/2” em 1D [59, 70]. Nós observamos

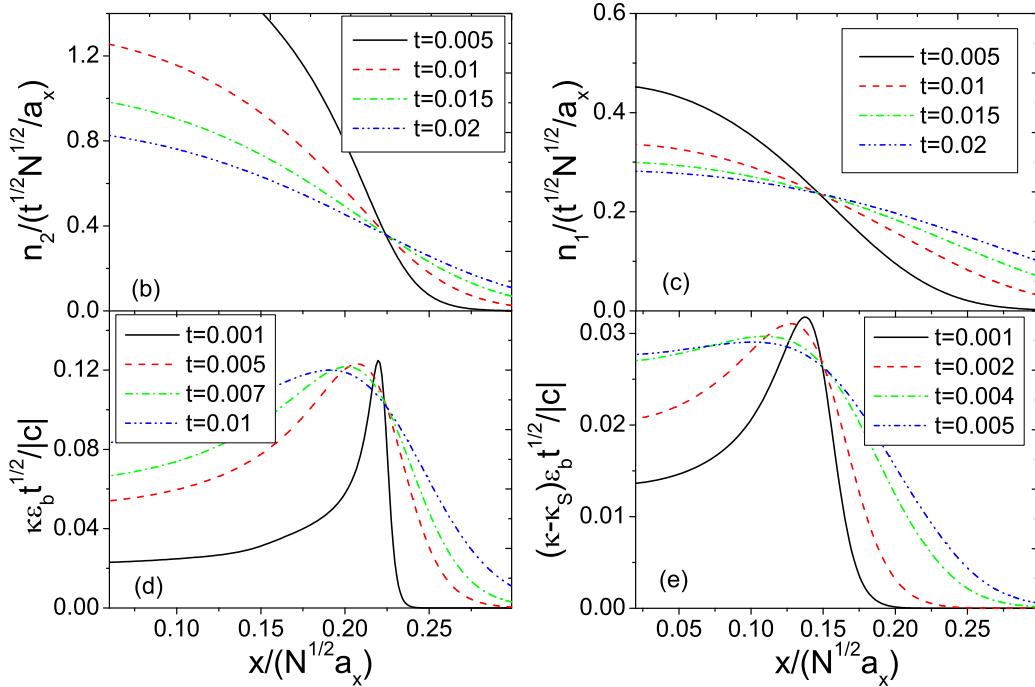


Fig. 4.12: Criticalidade quântica para baixa polarização. A densidade escalonada revela a localização do ponto crítico no interior da armadilha (b) $\tilde{\mu}_{c2}$ e (c) $\tilde{\mu}_{c4}$ usando o ABT e a ADL. As correspondentes “compressibilidades escalonada” são mostradas em (d) e (e), onde a intersecção indica o ponto crítico.

ainda que o sistema confinado em uma amardilha com potencial harmônico também pode ser investigado, combinando o ABT e a ADL. Nesta aproximação nós fizemos previsões para os perfis de densidades que apresentam um comportamento muito interessante. Com o aumento das técnicas experimentais de se obter sistemas ultrafrios em baixas dimensões [16, 73, 74], nós podemos supor que os resultados aqui apresentados poderão ser testados em experimentos futuros. Com este objetivo em vista, e também para entender mais os aspectos físicos envolvidos em todo esta trabalho, nós resolvemos ir ao laboratório para aprender como construir tubos unidimensionais no contexto de átomos ultrafrios. Com isto encerramos a discussão teórica de modelos exatamente solúveis desta tese. Todos os re-

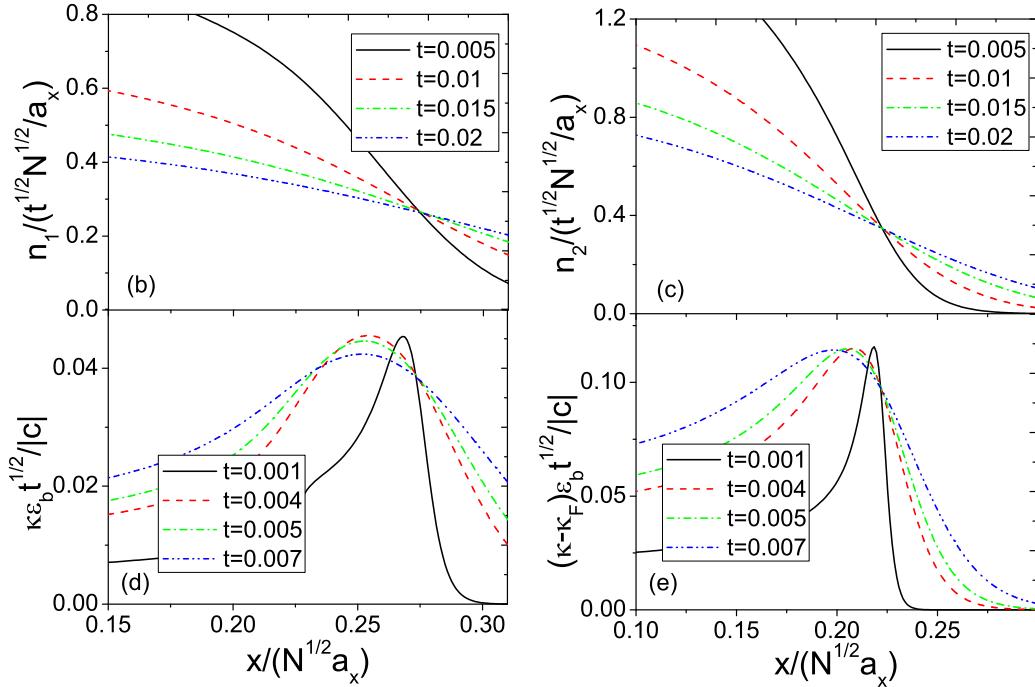


Fig. 4.13: Criticalidade quântica para baixa polarização. A densidade escalonada revela a localização do ponto crítico no interior da armadilha (b) $\tilde{\mu}_{c1}$ e (c) $\tilde{\mu}_{c3}$ usando o ABT e a ADL. As correspondentes “compressibilidades escalonadas” são mostradas em (d) e (e), onde a intersecção também indica o ponto crítico.

sultados apresentados nas seções 4.4, 4.5 e 4.6 são novos e constituem a nossa contribuição na área para esse modelo, tendo sido publicados em [60, 75].

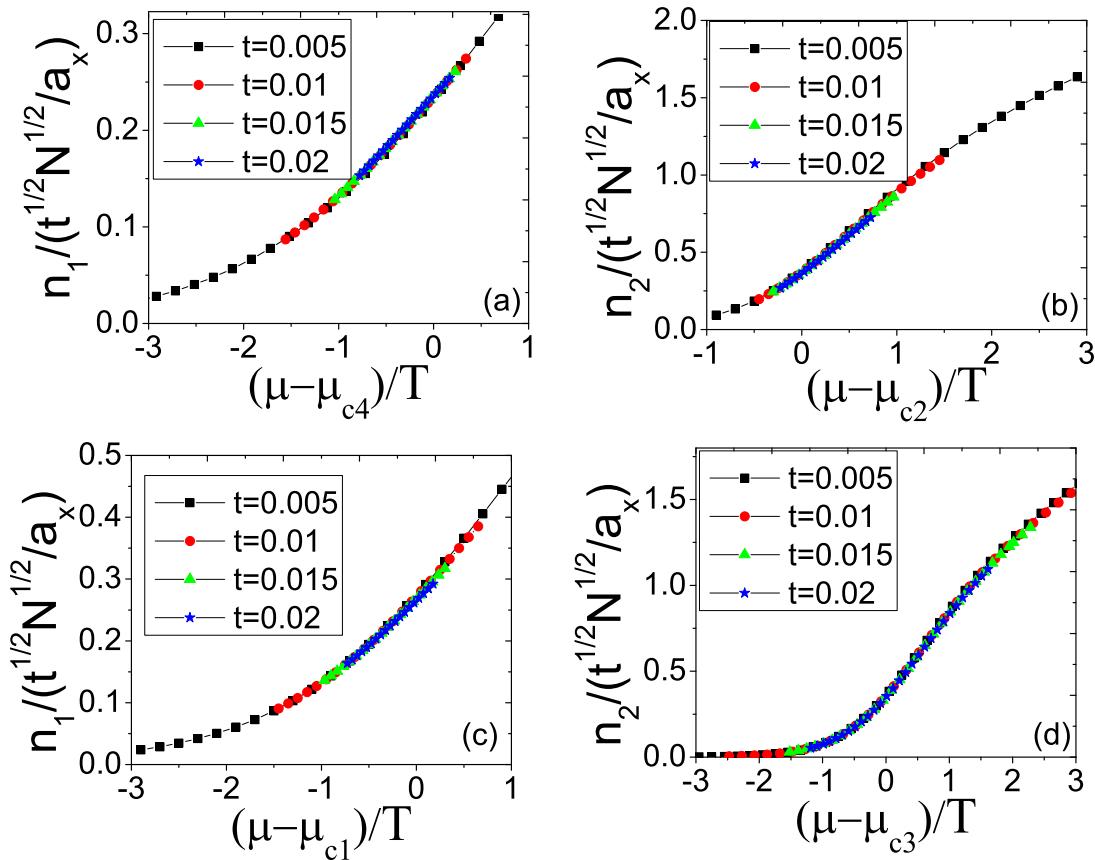


Fig. 4.14: Densidade escalonada versus $(\mu(x) - \mu_c)/T^{z\nu}$ para diferentes temperaturas $t = 0.005, 0.01, 0.015$ e 0.02 . Aqui estamos usando $h = 0.49$ nas figuras (a) e (b) e $h = 0.51$ para as figuras (c) e (d). Todas as curvas colapsam em uma única curva.

Capítulo 5

Desenvolvimento Experimental

5.1 Introdução

Neste capítulo iremos nos concentrar nos aspectos experimentais básicos necessários para a obtenção de tubos unidimensionais no contexto de átomos ultrafrios. Com o intuito de familiarizar o leitor com os mecanismos de controles e equipamentos utilizados, iremos apresentar uma breve discussão sobre: sistema de vácuo, armadilhas ópticas magnéticas, configuração dos feixes de laser, redes ópticas, entre outros.

Este estudo foi realizado no Laboratório de Ciências Quânticas da Universidade Nacional Australiana, chefiado pelos Professor John Close e Dr. Nicholas Robins.

5.2 Sistema de vácuo

Um dos aspectos mais importantes em experimentos com átomos ultrafrios é neutralizar o máximo possível as colisões dos átomos com as partículas de fundo, que normalmente tem energia cinética muito superior a dos átomos na armadilha, que irão causar perdas durante o procedimento de esfriamento por vaporização na obtenção de um condensado de Bose-Einstein.

O desenho esquemático 5.1 mostra nosso sistema de vácuo. Informações detalhadas do sistema podem ser obtidas em [76]. Todo sistema foi construído utilizando peças comerciais para sistema de vácuo e anexadas com juntas de cobres comprimidas entre flanges. Nas armadilhas ópticas e magnéticas (AOM) em 2D e 3D, os átomos são coletados em duas células de vidro retangulares com as dimensões de 25mm por 25mm por 80mm em lados opostos. O sistema de vácuo é iniciado com a evacuação das partículas de fundo utilizando uma bomba de sucção molecular e então o ultra vácuo é mantido por uma bomba iônica de 75 l/s e uma bomba de sublimação de Titanium (BST) instalada em um tubo de 6 polegadas. Um alimentador elétrico fornece corrente para dois tubos pequenos de armazenamento de Rubidio 50mg (Alvatec AS-Rb-50-F) instalado no interior da AOM 2D, que está constantemente a 3A. A pressão do sistema é medida por um equipamento acoplado na bomba iônica. Depois de construído o sistema, este é levado a uma temperatura de 300°C e esfriado a temperatura ambiente. Com isso, consegue-se obter a pressão na câmara da AOM 3D na ordem de 10^{-10}

torr, o que reduz consideravelmente as colisões com as partículas de fundo. Na célula da AOM 2D a pressão é mantida na ordem de 10^{-7} torr, onde é coletado o maior números de átomos de Rb e transferido através de um tubo fino para a AOM 3D através de um feixe de laser. Assim, no final de todo o processo, a criação do CBE irá ocorrer dentro da AOM 3D.

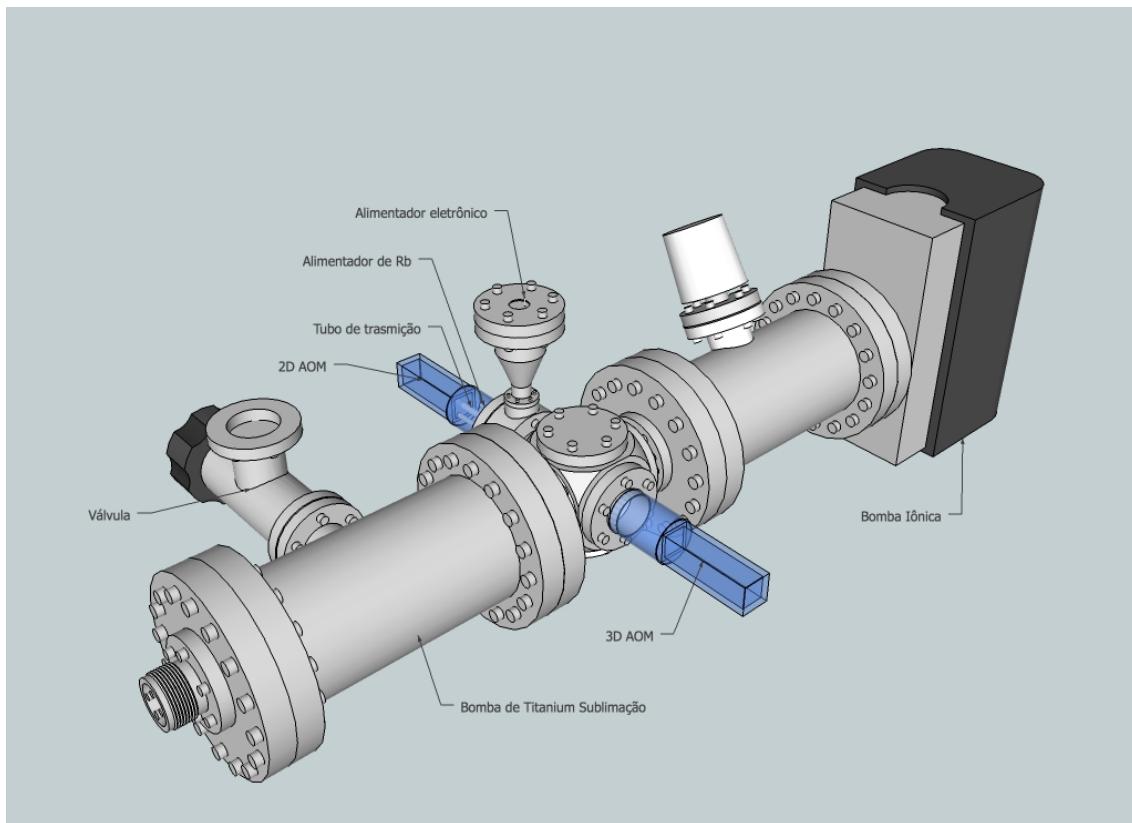


Fig. 5.1: Esquema ilustrativo do sistema de vácuo, onde podemos ver as células de vidro para as AOMs 2D e 3D, as bombas iônica e de Titânio.

Mesmo tendo alcançado um excelente sistema de vácuo na câmara da AOM 3D, o tempo de vida de uma nuvem de átomos de Rb é tipicamente de 20s, curto comparado com outros sistemas para criar um CBE, mas compensamos esse problema com um rápido sistema de evaporação.

5.3 Armadilhas ópticas magnéticas

Os lasers usados nas armadilhas óptico-magnéticas e no sistema de imagem, são todos gerados por um laser de “diodo” com cavidade externa, em configuração de Littrow [77]. Nesta configuração temos feixes de luz com potências entre 50mW e 80mW na frequência de ressonância do Rubídio na linha D2 ($5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{3/2}$, $\lambda = 780.24\text{nm}$). As frequências dos feixes de laser são controladas através de moduladores óptico acústicos e moduladores eletro-ópticos, possibilitando assim dessintonizar os feixes de laser da armadilha para esfriar os átomos utilizando-se do efeito Doppler observado pelos átomos. A figura 5.2 mostra a configuração dos feixes de laser em cada câmara, onde temos os feixes de laser de bombeamento , o da armadilha e o de transmissão (maiores detalhes em [77]). Os feixes de laser para a armadilha estão sintonizados abaixo das transições dos estados ^{87}Rb , $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ por 24MHz e ^{85}Rb , $|3\rangle \rightarrow |4\rangle$ por 20MHz, onde usamos o efeito Doppler para esfriar os átomos através da absorção e subsequente emissão expontânea de fôtons. Já os feixes de laser de bombeamentos são calibrados na frequência da transição ^{87}Rb , $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ e ^{85}Rb , $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$, permitindo assim o aprisionamento de átomos nos estados $|1\rangle$ para ^{87}Rb , e $|2\rangle$ para ^{85}Rb , no momento em que desligamos essa luz. Ambos os feixes de transmissão e do sistema de imagem, estão sintonizadas na transição $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ de ambos átomos.

Neste experimento, a AMO ambas 3D coleta na ordem de 10^{10} átomos de ^{87}Rb e 10^8 átomos de ^{85}Rb em 10s. Depois de ligar a armadilha por 20ms, período onde acrescentamos a dessintonização da luz, os campos magnéticos são suavemente desligados. Esse processo reduz a temperatura da nuvem de átomos para $40\mu\text{K}$. A luz de bombeamento é desligada por 1ms, permitindo assim que os estados hiperfinos de mais baixa energia sejam populados ($^{87}\text{Rb } |F = 1\rangle$ e $^{85}\text{Rb } |F = 2\rangle$) na preparação do esfriamento. Todos os feixes da armadilhas são desligadas e as bobinas, que geram o campo magnético da AMO 3D, são rapidamente ligadas, aprisionando os átomos nos estados hiperfinos $^{85}\text{Rb } |F = 2, m_F = -2\rangle$ e $^{87}\text{Rb } |F = 1, m_F = -1\rangle$. Com a ajuda de uma bobina retangular, os átomos são transportados magneticamente sobre uma distância de 40mm para a segunda armadilha quadrupolar (Figura 5.3). Neste processo, a corrente é acrescida na bobina de transferência, empurrando a nuvem para as bobinas da armadilha de Ioffe-Pritchard. Então as bobinas de AMO e trans-

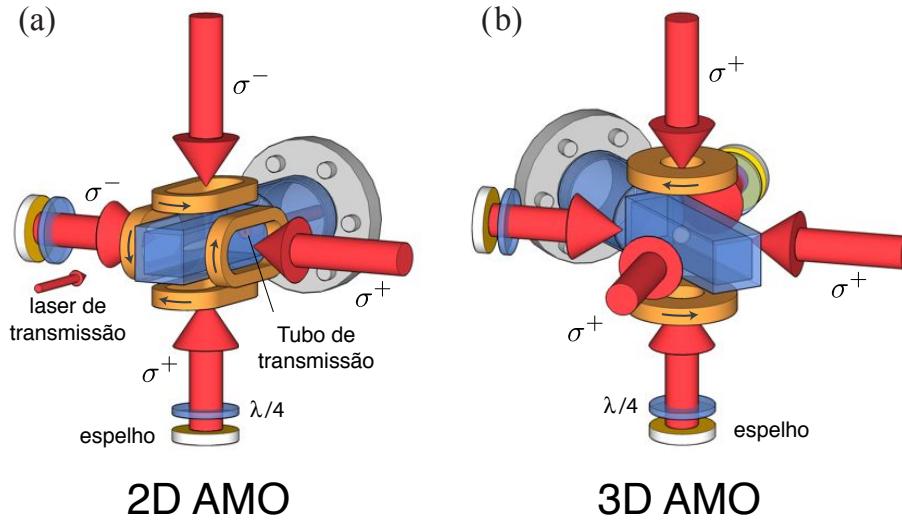


Fig. 5.2: Figura demonstrativa das células de vidro e do conjunto de feixes de laser para as armadilhas ópticas magnéticas (a) 2D e (b) 3D. Todos os feixes de laser, com exceção do de transmissão, contém luz na frequência da armadilha e na de bombeamento. Figura extraída de [77]

ferência são desligadas e acrescida a corrente das bobinas do quadrupolo. Essa armadilha é convertida em um potencial harmônico Ioffe-Pritchard usando a configuração de bobinas Ioffe quadripolo (QUIC, sigla em inglês) mostrada na Figura 5.3.

5.3.1 Evaporação na armadilha magnética

Após os átomos serem transportados para a armadilha QUIC, como descrito anteriormente, teremos neste estágio, tipicamente 5×10^9 ^{87}Rb e 3×10^7 ^{85}Rb átomos numa temperatura de $200\mu K$, antes do processo de evaporação. Usamos uma radiofrequência oscilatória, de frequência angular ω_{rf} controlada por um gerador de função arbitrário (Agilent 33250A), para forçar a evaporação dos átomos, reduzindo assim a energia média destes. Os átomos remanescentes são normalizados em baixas temperaturas através de colisões elásticas. Esse processo nos permite a criação de condensados de ^{87}Rb puro no estado hiperfino $|F = 1, m_F = -1\rangle$ contendo 2×10^6 átomos no QUIC depois de 15 segundos de evaporação.

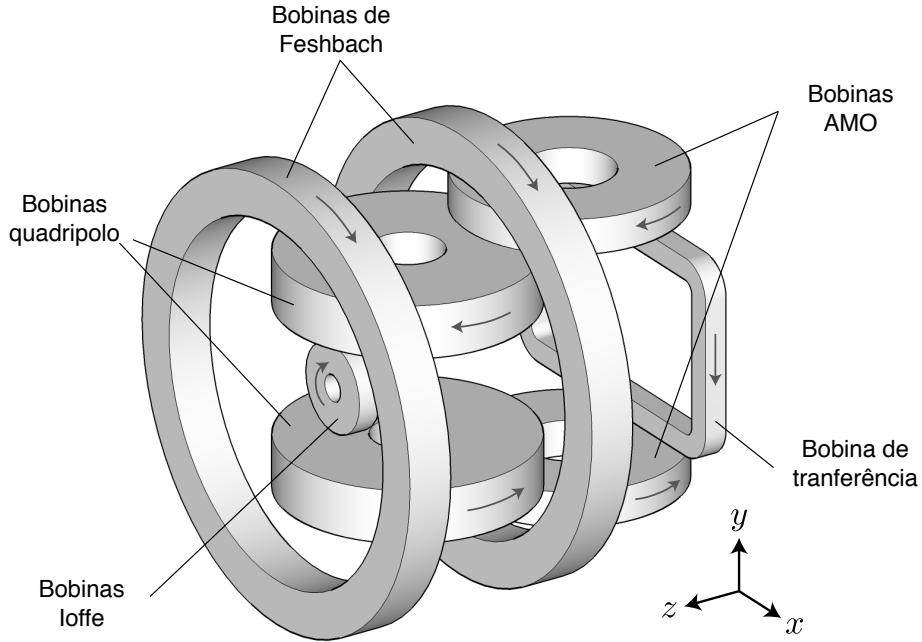


Fig. 5.3: Armadilha magnética montada nas redondezas da AMO 3D. A direção da corrente em cada bobina é indicada pelas setas. A bobina de radiofrequência e a bobina do sistema de imagem não estão mostradas. Figura extraída de [77]

5.4 Armadilha óptica dipolar

Com o intuito de obter condensados de ^{85}Rb , cujo comprimento de espalhamento pode ser controlado através das ressonâncias de Feshbach geradas pelas bobinas mostradas na figura 5.3, nós confinamos os átomos por dois feixes cruzados, sintonizados distantes da freqüência de ressonância ($\lambda = 1090\text{nm}$). Esta luz, longe da freqüência de ressonância atômica, pode polarizar um átomo neutro, induzindo um momento dipolar que interage com o campo elétrico da luz. Um feixe de luz, dependendo da variação da intensidade $I(\mathbf{r})$, representa um potencial, que para um modelo semiclássico de dois níveis atômicos é dado por [78]

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

onde c é a velocidade da luz, $\Gamma = 2\pi \times 6.07\text{MHz}$, $2\pi c/\omega_0 = 787.61\text{nm}$ é o comprimento de onda correspondente à freqüência de ressonância atômica e ω é a freqüência do feixe de

laser dipolar. Isto permite os átomos serem aprisionados quando $\omega < \omega_0$, conhecido como deslocamento para vermelho no efeito Doppler. A intensidade I é dada pela distribuição Gaussiana de potência total P

$$I(r, z) = -\frac{2P}{\pi w^2(z)} \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2(z)}\right), \quad (5.2)$$

onde $w(z) = w_0\sqrt{1 + (z/z_R)^2}$ é o raio do feixe de laser com $2w_0$ sendo o diâmetro da cintura do feixe, ou seja, o diâmetro mínimo que o feixe pode ter ao longo do seu percurso, e $z_R = \pi w_0^2/\lambda$ é a distância de Rayleigh, onde o raio do feixe é $\sqrt{2}w_0$. Quando a profundidade do potencial $U_0 = U(r = 0, z = 0)$ é larga comparada com a temperatura dos átomos $U_0 \gg k_B T$, a armadilha formada por um único feixe de laser produz um potencial harmônico com simetria cilíndrica com frequências de oscilação $\omega_\rho = (4U_0/mw_0^2)^{1/2}$ e $\omega_z = (2U_0/mz_R^2)^{1/2}$. Nos casos onde temos $z_R \gg w_0$ o confinamento na direção radial é muito maior do que ao longo do feixe laser. A figura 5.4 mostra a comparação do potencial harmônico e o potential produzido por um feixe de laser na direção x , ou seja, na direção radial. Estamos desprezando o potencial gravitacional e usando para potência do feixe $P = 2W$, o que corresponde a potência real no final do processo de esfriamento, para uma cintura do feixe de $w_0 = 30\mu\text{m}$.

5.4.1 Evaporação na armadilha óptica

A evaporação na armadilha óptica ocorre reduzindo-se a potência do feixe de laser, ou seja, iremos reduzir a profundidade do potencial U_0 deixando os átomos mais energéticos escaparem da armadilha e assim esfriando a nuvem atômica por normalização da temperatura média. A figura 5.4 simula o potencial no final desse processo. Neste experimento, aplicamos um processo padrão na redução da potência do feixe. Imediatamente depois de ligarmos as bobinas de Feshbach, que controlam a interação atômica, a potência do feixe é reduzida suavemente de $P = 9\text{W}$ para $P = 2\text{W}$ em 7 segundos, esfriando a nuvem de $5\mu\text{K}$ para 100nk . Depois de 5 segundos de esfriamento na armadilha híbrida, a nuvem é suficientemente pequena para ser completamente aprisionada pelos feixes cruzados da armadilha

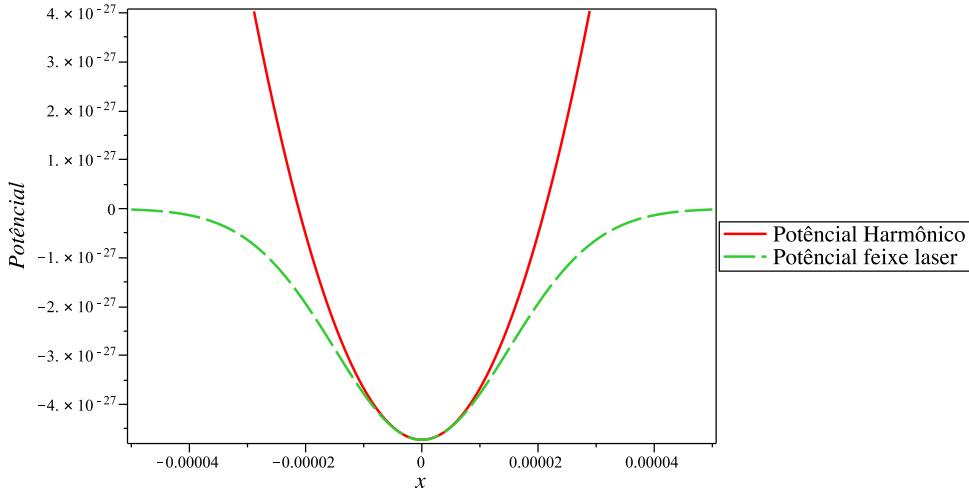


Fig. 5.4: Comparação entre o potencial harmônico e o potencial produzido por um feixe de laser com distribuição gaussiana na direção radial. Ambos potenciais estão em escalas reais no sistema internacional de medidas com $P = 2 \text{ W}$ e $w_0 = 30 \mu\text{m}$.

óptica, sendo assim a QUIC é totalmente desligada, e nos 2 segundos finais a evaporação é puramente feita pelo potencial óptico.

Uma armadilha óptica tem como vantagem, se comparada com a magnética, o fato de ser possível aprisionar átomos em diferentes estados hiperfinos, produzindo assim condensados com uma mistura de "spins", possibilizando o estudo experimental dos modelos abordados nesta tese.

5.5 Redes em gases ultrafrios

É possível se obter, numa nuvem de gases atômicos, redes do tipo 1D, 2D e 3D utilizando uma configuração de feixes de laser refletidos fora da ressonância atômica, com um deslocamento para o vermelho ou azul, formando assim uma onda estacionária que proporcionará o potencial sentido pelos átomos. A utilização de uma onda estacionária produz a rede 1D, também conhecida como panquecas, pois ela divide a nuvem em diversos planos de átomos sentados nos vales do potencial. Usando então um segundo feixe de laser refletido, com diferente polarização ou com diferente frequência do primeiro para evitar interferências, se produz uma rede 2D, também conhecida como tubos unidimensionais, que é o que preten-

demos construir. E assim por diante, com um terceiro feixe laser podemos produzir uma rede 3D. A figura 5.5 ilustra estes casos.

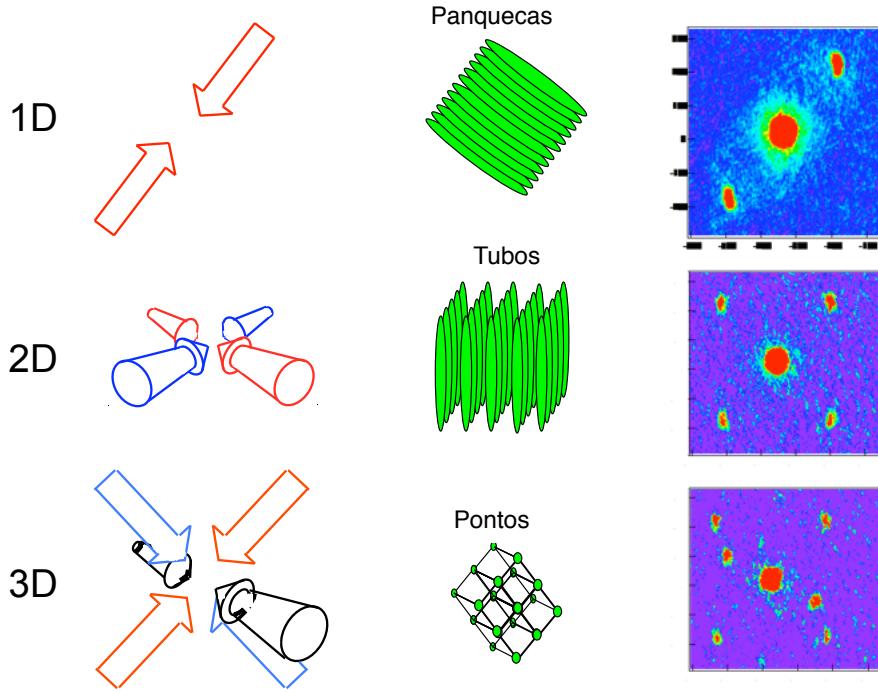


Fig. 5.5: Figura mostrando as diferentes configurações dos feixes de laser na obtenção das redes ópticas do tipo panquecas, tubos e pontos. Figura extraída de [84].

Ligando os feixes de laser adiabaticamente, permite-se que os átomos permaneçam no estado fundamental ao se montar a rede; desligando os feixes de forma não adiabática os átomos sofrem a difração de Bragg [79], separadas por múltiplos de $2\hbar k$, onde k é o momento associado à partícula. Esse comportamento pode ser observado nas figuras 5.5 e 5.6. A difração de Bragg serve como primeiro diagnóstico na montagem de redes ópticas. Na figura 5.6 temos as imagens obtidas em nosso experimento durante o alinhamento dos feixes junto ao CBE. Aqui estamos usando um feixe de laser deslocado para o vermelho. Esta rede pode ser desligada numa velocidade inferior a $2\mu\text{s}$.

Para explicar as figuras (5.6 a) e (5.6 b) vamos considerar o potencial criado por um único feixe, que é dado por [80]

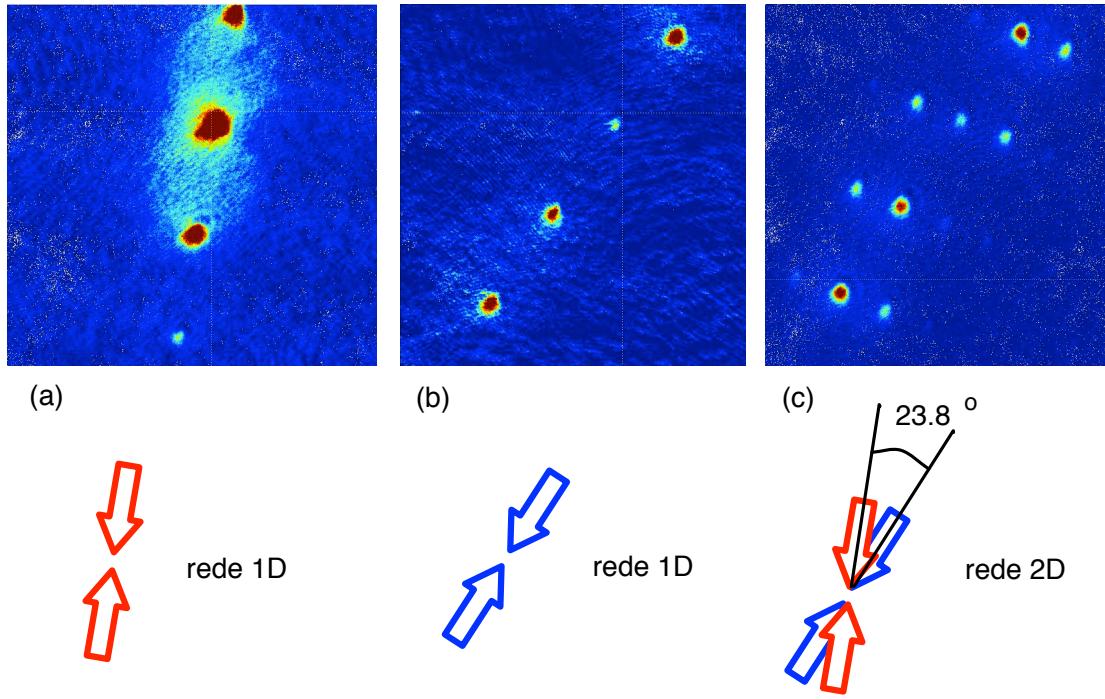


Fig. 5.6: Fotografias da nuvem de átomos de ^{87}Rb após expansão de 25ms após o desligamento da rede. Podemos observar a difração de Bragg com a distância de $4\hbar k$. Os feixes de laser estão deslocados para o vermelho por 5GHz e com potência $P = 8.5\text{mW}$. O ângulo entre os feixes é de aproximadamente 24° .

$$V(x) = \frac{V_0}{2} \cos(2\pi x/d), \quad (5.3)$$

onde $d = \lambda/(2 \sin(\theta/2))$, θ é o angulo de reflexão dos feixes e λ é o comprimento de onda. A profundidade do potencial é $V_0 = \frac{\hbar\Gamma^2 I}{8\Delta I_{sat}}$, com I_{sat} sendo a intensidade de saturação e $\Delta = \omega - \omega_0$ o deslocamento. Na figura 5.6(a) e (b) nós temos $V_0 \approx 660E_R$, aqui $E_R = \hbar^2 k^2/2m$ é a energia de recuo com $k = 2\pi/\lambda$. Usando feixes refletidos, $\theta = \pi$ para cada feixe, temos $d \approx 390\text{nm}$. A figura 5.7 mostra o potencial da rede 1D, eq. (5.3) acrescido do potencial gerado pela armadilha óptica, eq. (5.1). Como estamos trabalhando com frequência deslocada para o vermelho, o que indica um potencial atrativo, os átomos irão ser aprisionados nos mínimos do potencial.

Em nosso experimento para criar uma rede 2D ou tubos unidimensionais, o potencial

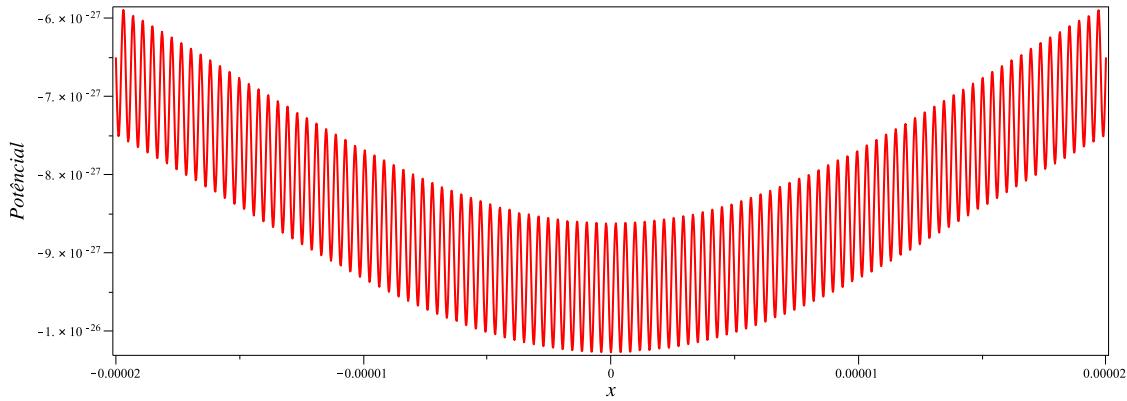


Fig. 5.7: Potencial gerado pela armadilha óptica (5.1) acrescido do potencial gerado pela rede 1D (5.3). Estamos usando unidades no sistema internacional e seguindo rigorosamente as medidas para o sistema utilizado na obtenção da figura 5.6 (a).

dos tubos será dado:

$$V(x, z) = \frac{V_0}{2} \cos(2\pi x/d) + \frac{V_0}{2} \cos(2\pi z'/d), \quad (5.4)$$

onde $z' = z \sin(\phi) + x \cos(\phi)$ com ϕ sendo o ângulo entre os feixes de laser refletidos. Em nosso experimento temos que $\phi = 23.8^\circ$ (por motivos de acesso a câmara contendo a nuvem), o que gera o potencial mostrado na figura 5.8. Ao desligarmos esse potencial abruptamente obtemos as imagens correspondentes a difração de Bragg observada na figura 5.6 (c).

Podemos obter as frequências da armadilha nas direções radiais em baixas temperaturas através da expansão de Taylor do potencial (5.4) em torno do centro da armadilha e assim tomando o termo quadrático e igualando ao potencial harmônico, obtemos

$$\omega_z = \sqrt{\frac{4V_o\pi^2 \sin^2(\phi/2)}{d^2 m}}, \quad \omega_x = \sqrt{\frac{4V_o\pi^2 \cos^2(\phi/2)}{d^2 m}} \quad (5.5)$$

Lembramos aqui que a frequência na direção axial (ao longo do tubo) é dada pela frequência da armadilha óptica dipolar ω_ρ . Portanto, para levarmos o potencial 3D para o regime 1D, precisamos ter as seguintes condições: o potencial químico, μ , e a energia térmica, $k_B T$, devem ser muito menores que a energia do confinamento transverso, $\hbar\omega_\perp$ ($\perp = z$ e x), onde ω_\perp são dadas por (5.5). Sendo assim, o potencial da armadilha que será considerado no

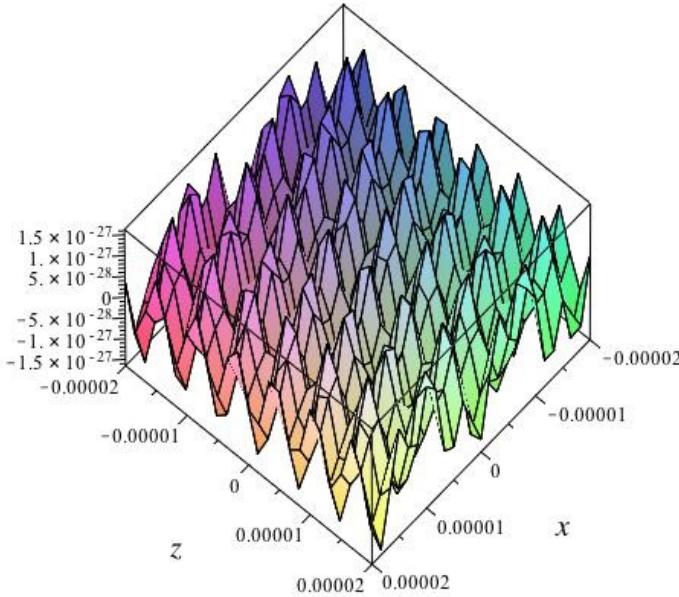


Fig. 5.8: Potencial da rede 2D gerado pelos feixes de laser cruzados, onde estamos usando um ângulo entre os feixes $\phi = 23.8^\circ$ e unidades no sistema internacional. Esse potencial gera a difração de Bragg observado na figura 5.6 (c) quando desligamos a armadilha abruptamente.

hamiltoniano é dado por $V = m\omega_\rho^2 y^2/2$. Dentro destas condições unidimensionais e seguindo [82, 83] também é possível mostrar que a constante de acoplamento em 1D, g_{1D} , pode ser expressa em termos do comprimento de espalhamento conhecido experimentalmente em 3D, a_{3D} , que para ^{87}Rb é aproximadamente $100a_{Bohr}$, onde $a_{Bohr} = 5.3 \times 10^{-11}\text{m}$ é o raio de Bohr. Assim temos [82]

$$g_{1D} = \frac{2\hbar^2 a_{3D}}{ma_\perp^2} \frac{1}{1 - Aa_{3D}/a_\perp}, \quad (5.6)$$

onde $A = |\zeta(1/2)|/\sqrt{2} = 1.0326$ e $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$ é o comprimento característico do oscilador harmônico.

Com isso mostramos como levar toda a informação experimental que é efetivamente em 3D, para a situação de tubo unidimensional, como estudado na teoria.

5.5.1 Configuração dos feixes de laser

Como nosso objetivo é a obtenção de gases bosônicos em tubos unidimensionais, necessitamos então de dois feixes de laser não interagentes. Para isso nós vamos propor uma montagem onde utilizamos um laser “diodo” com uma cavidade externa montada num sistema de saturação do Rubídio, apresentada na figura 5.9, No caminho utilizamos um modulador eletro-óptico (MOA), possibilitando assim o controle do deslocamento da freqüência do feixe. O feixe é ligado na mesa do sistema de vácuo, através de fibra óptica alinhada com a primeira ordem (+1) do feixe de laser após a passagem por um modulador óptico acústico (MOA). Este é controlado por um gerador de função de onda que possibilita assim escolhermos a forma do pulso, controlando o tempo e a maneira com que a rede é ligada e desligada. Utilizando-se um divisor de feixe de polarização de cubo (DFP), forçamos um segundo laser “diodo” a emitir luz na mesma freqüência, alinhado com outro MOA, sendo desta vez utilizada a primeira ordem negativa (-1) alinhada à fibra óptica, fornecendo assim a diferença de freqüência necessária entre os dois feixes para que tenhamos redes 1D individuais que ao se cruzarem, formam a rede 2D ou os tubos individuais. Utilizando esta montagem, produzimos a figura 5.6(c), onde pode ser observada a difração de Bragg.

5.6 Conclusão

Assim a fig 5.6 constitui nosso primeiro resultado experimental para tubos unidimensionais utilizando o esquema da figura 5.9. Uma análise preliminar indica que o sistema ainda não se encontra no estado fundamental. Portanto, a montagem experimental deverá ser melhorada através da utilização de um laser com maior potência do tipo Ti:sapphire, para atingirmos o estado fundamental e dar continuidade às medidas.

Durante a realização desse trabalho foi publicado um artigo científico em Optics Express [85].

Como uma sequência natural, pretendemos dar continuidade neste experimento, com o objetivo de realizar medidas da densidade de átomos no interior de um tubo individual para diferentes temperaturas. A resolução de um único tubo em uma rede óptica constitui um grande desafio do ponto de vista experimental. Para isso, pretendemos desenvolver um meio

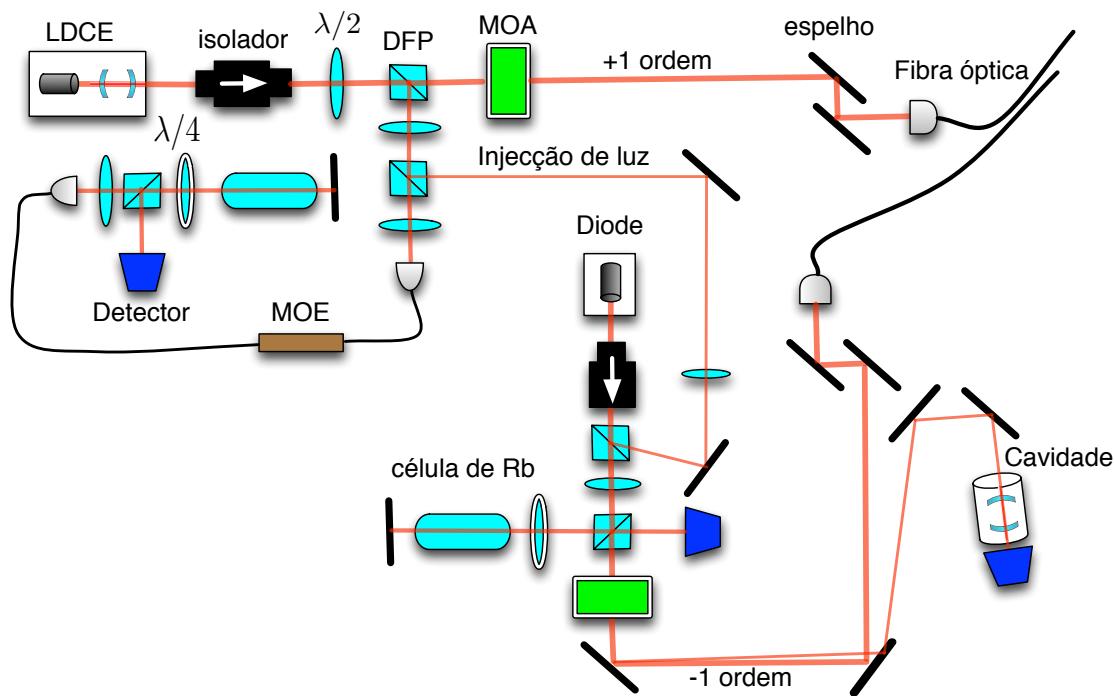


Fig. 5.9: Figura esquemática mostrando a configuração dos feixes de laser para a geração da rede 2D, ou tubos unidimensionais. Aqui estamos usando as seguintes abreviaturas: LDCE - Laser “diodo” com cavidade externa, DFP - divisor de feixe de polarização, MOA- modelador óptico acústico e MOE- modulador óptico elétrico.

de marcar um único tubo, utilizando-se de gradientes dos campos magnéticos gerados por bobinas, deixando somente um tubo visível para o sistema de imagem. Pretendemos então, em um futuro próximo, verificar as previsões teóricas do capítulo 4.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas

6.1 Conclusão e perspectivas

Neste trabalho realizamos um estudo de três modelos exatamente solúveis com interação do tipo δ que descrevem gases ultrafrios em uma dimensão. Esse estudo oferece um conhecimento sólido de grandezas e propriedades físicas de gases ultrafrios que são de extrema relevância no contexto experimental. Através do Ansatz de Bethe termodinâmico obtivemos expressões analíticas para as energias no estado fundamental, para as equações de estado, diagramas de fases, entre outros.

Especificamente, realizamos um estudo detalhado do modelo exatamente solúvel para o gás de Fermi de duas componentes nos regimes fracamente e fortemente atrativos. Estudamos os diagramas de fases através da resolução das equações do ABT no limite $T \rightarrow 0$, usando integração numérica. Esses resultados concordam com resultados obtidos em [45] e com um método alternativo utilizado para obtenção dos campos externos que possibilitam encontrar o diagrama de fases do modelo. Esse método baseia-se na utilização da energia do estado fundamental do modelo via a resolução das equações do ansatz de Bethe, fornecendo uma maneira prática e consistente para obter o comportamento do sistema no limite em que a temperatura vai a zero. É interessante salientar que as previsões teóricas para o diagrama de fases no regime de acoplamento forte utilizando o ansatz de Bethe concordam com os resultados dos experimentos recentes obtidos pelo grupo do Prof. Hulet [16] para gases de férmiões de 6Li com duas componentes, servindo assim como motivação para estudarmos outros modelos exatamente solúveis unidimensionais.

Para o modelo exatamente solúvel do gás de Fermi de três componentes no regime fortemente atrativo também obtivemos o diagrama de fases através da expressão de energia para o estado fundamental via a resolução das EAB. Aqui confirmamos os diagramas de fases obtidos em [39] para o sistema através de resolução numérica das equações do ABT. Mostramos que os métodos utilizados para a obtenção dos diagramas são compatíveis, obtendo uma perfeita concordância entre si. Neste regime, o diagrama de fases é muito rico, apresentando novas fases exóticas, como por exemplo a fase “trions”. No regime fracamente atrativo, utilizando as mesmas técnicas matemáticas, obtivemos o diagrama de fases do modelo. Notamos aqui o desaparecimento da fase triônica. Através de um estudo numérico

detalhado verificamos que a transição entre os dois regimes, forte e fraco, o ocorre de forma suave.

Para o modelo de gás de bósons com três componentes no regime fortemente atrativo, nós obtivemos o diagrama de fases a temperatura zero. Apresentamos também um estudo detalhado do gás a temperaturas suficientemente baixas, onde as transições são governadas por flutuações quânticas. Obtivemos expressões analíticas para grandezas físicas como densidade, magnetização, compressibilidade e susceptibilidade. Mostramos que essas grandezas podem ser escritas em uma função de escala universal, sendo assim possível a determinação dos expoentes críticos. O modelo também foi estudado numa armadilha harmônica.

Do ponto de vista experimental, adquirimos os conhecimentos básicos para a realização dos tubos unidimensionais no regime de interesse. Neste sentido, seria muito interessante aprimorar a montagem e as técnicas discutidas no capítulo 5 para estudar o gás de bósons com três componentes, analisado teoricamente no capítulo 4. Em particular, poderíamos usar átomos de ^{85}Rb e ^{87}Rb para obter o diagrama de fases, os perfis de densidade e, possivelmente, observar a criticalidade quântica do sistema. Como não existem ainda resultados experimentais para estes sistemas de tubos unidimensionais, o desafio é ainda maior.

Mostramos nesta tese, que o método do ansatz de Bethe, juntamente com a aproximação de densidade local, é uma ferramenta muito útil para descrever sistemas de gases ultrafrios confinados em potencial harmônico, quando o número de partículas é elevado. Assim, uma questão natural é se poderíamos utilizar o método do ansatz de Bethe para modelar experimentos com poucos átomos, como um experimento notável envolvendo poucos (entre 2 e 8) átomos ultrafrios de ^6Li em tubos 1D, realizado recentemente pelo grupo do Professor S. Jochin em Heidelberg [88,89]. Em princípio, combinando o ansatz de Bethe com o princípio variacional isto seria possível [90] e poderia ser aplicado para todos modelos exatamente solúveis deste trabalho.

6.2 Publicações

1. CARLOS CLAITON NOSCHANG KUHN, X. W. Guan, A. Foerster and M. T. Batchelor, *Quantum criticality of spin-1 bosons in a 1D harmonic trap*, Phys. Rev. A 86(R), 011605 (2012);
2. CARLOS CLAITON NOSCHANG KUHN, X. W. Guan, A. Foerster and M. T. Batchelor, *Universality class of quantum criticality for strongly repulsive spin-1 bosons with antiferromagnetic spin-exchange interaction*, Phys. Rev. A 85, 043606 (2012);
3. S. S. Sané, S. Bennetts, J. E. Debs, CARLOS CLAITON NOSCHANG KUHN, G. D. McDonald, P. A. Altin, J. D. Close, N. P. Robins, 11 W narrow linewidth laser source at 780nm for laser cooling and manipulation of Rubidium Optics Express, 20, 8915–8919 (2012);
4. CARLOS CLAITON NOSCHANG KUHN and A. Foerster, *Phase Diagrams of Three-Component Attractive Ultracold Fermions in One-Dimension*, New J. Phys. 14 013008 (2012);
5. M. T. Batchelor, A. Foerster, X. Guan, CARLOS CLAITON NOSCAHNG KUHN, *Exactly solvable models and ultracold Fermi gases*, Journal of Statistical Mechanics, P12014 (2010).

Referências Bibliográficas

- [1] A. Einstein, **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 22, p. 261-267, (1924);
- [2] A. Einstein, **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften Physikalisch-Mathematische Klasse**, Berlin, v. 1, p. 3-14, (1925);
- [3] S. N. Bose, Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese **Zeitschrift für Physik**, Berlin, v. 26, p. 178-181, (1924);
- [4] M. H. Anderson, et al, **Science**, Washington, v. 269, n. 7, p. 198-201, July 1995;
- [5] C. C. Bradley, et al, **Phys. Rev. Lett.**, Woodbury, v. 75, n. 9, 1687 4p., Aug. 1995;
- [6] K. B. Davies, et al, **Phys. Rev. Lett.**, Woodbury, v. 75, n. 22, 3969 5p., Nov. 1995;
- [7] Adrian Cho, **Science** **319**, 1180 (2008);
- [8] B. DeMarco e D.S. Jin, **Science** **285**, 1703 (1999);
- [9] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn, e D. S. Jin, **Nature** **424**, 47 (2003);
- [10] C. A. Regal, M. Greiner, D. S. Jin, **Phys. Rev. Lett.** **92**, 040403 (2004);
- [11] Zwierlein M W, Abo-Shaeer J R, Schirotzek A, Schunck C H e Ketterle W, **Nature** **435**, 1047 (2005)
- [12] P. Fulde e R. A. Ferrell, **Phys. Rev.** **135**, A550 (1964); A. I. Larkin e Yu. N. Ovchinnikov, **Sov. Phys.: JETP** **20**, 762 (1965);

- [13] G. B. Partridge, Wenhui Li, Y. A. Liao, e R. G. Hulet, **Phys. Rev. Lett.** **97**, 190407, (2006);
- [14] Wenhui Li , G.B. Partridge , Y.A. Liao , e R.G. Hulet, **Nuclear Physics A** **790** 88c–95c (2007);
- [15] Zwierlein M W, Schirotzek A, Schunck C H e Ketterle W, **Science** **311**, 492 (2006);
- [16] Y. Liao, A. Rittner, T. Paprota, W. Li, G. Patridge, R. Hulet, S. Baur e E. Mueller, **Nature** **467**, 567 (2010);
- [17] T. B. Ottenstein, T. Lompe, M. Kohnen, A. N. Wenz, e S. Jochim†, **Phys. Rev. Lett.** **101**, 203202 (2008);
- [18] J. H. Huckans, J. R. Williams, E. L. Hazlett, R. W. Stites, e K. M. O'Hara, **Phys. Rev. Lett.** **102**, 165302 (2009); J. R. Williams, E. L. Hazlett, J. H. Huckans, R. W. Stites, Y. Zhang, e K. M. O'Hara, **Phys. Rev. Lett.** **103**, 130404 (2009);
- [19] T. Lompe, T. B. Ottenstein, F. Serwane, K. Viering, A. N. Wenz, G. Zürn e S. Jochim, **Phys. Rev. Lett.** **105**, 103201 (2010);
- [20] S. Nakajima, M. Horikoshi, T. Mukaiyama, P. Naidon, M. Ueda, **Phys. Rev. Lett.** **105**, 023201 (2010); S. Nakajima, M. Horikoshi, T. Mukaiyama, P. Naidon e M. Ueda, **Phys. Rev. Lett.** **106**, 143201 (2011);
- [21] S.Knoop, F. Ferlaino, M. Mark, M. Berninger, H.Schöbel, H.-C.Nägerl e R.Grimm, **Nature Physics** **5**, 227 (2009);
- [22] T. Lompe, T. B. Ottenstein, F. Serwane, A. N. Wenz, G. Zürn, S. Jochim, **Science** **330**, 940 (2010);
- [23] Toshiya Kinoshita, Trevor Wenger e David S. Weiss **Science** **305**, 1125 (2004);
- [24] E. Haller, M. Gustavsson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo e H.-C. Nägerl, **Science** **325** , 1224 (2009);
- [25] M. Girardeau, **J. Math. Phys.** **1**, 516 (1960);

- [26] E. H. Lieb, W. Liniger, **Phys. Rev.** **130**, 1605 (1963);
- [27] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Meehl, S. Folling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hansch e I. Bloch, **Nature** **429**, 277 (2004);
- [28] I. Vidanovic, N. J. van Druten e M. Haque, arXiv:1210.0030v1 [cond-mat.quant-gas] ;
- [29] Antoine Klauser e Jean-Sébastien Caux, **Phys. Rev. A** **84**, 033604 (2011);
- [30] J. Cao, Y. Jiang e Y. Wang, **Europhys. Lett.** **79**, 30005 (2007);
- [31] F. H. L. Essler, G. V. Shlyapnikov e A. M. Tsvelik, **J. Stat. Mech.** P02027(2009);
- [32] J. Y. Lee, X.-W. Guan, M. T. Batchelor e C. Lee, **Phys. Rev. A** **80**, 063625 (2009);
- [33] G. V. Shlyapnikov e A. M. Tsvelik, **New J. Phys.** **13**, 065012 (2011);
- [34] H. Bethe, **Z. Physic** **71**, 205 (1931);
- [35] X. W. Guan, M. T. Batchelor, C. Lee e M. Bortz, **Phys. Rev. B** **76**, 085120 (2007);
- [36] J.S. He, A. Foerster, X.-W. Guan e M. T. Batchelor, **New J. of Phys.** **11**, 073009-1 (2009);
- [37] M. T. Batchelor, A. Foerster, X-W. Guan e C.C.N. Kuhn, **J. Stat. Mech.** P12014 (2010);
- [38] C.C.N. Kuhn, A. Foerster, **New J. Phys.** **14**, 013008 (2012);
- [39] X. W. Guan, M.T. Batchelor, C. Lee, e H.-Q. Zhou, **Phys. Rev. Lett.** **100**, 200401 (2008);
- [40] A. Rapp, G. Zare, C. Honerkamp, W. Hofstetter, **Phys. Rev. Lett.** **98**, 160405 (2007);
- [41] Sachdev S, Quantum Phase Transitions (Cambridge: Cambridge University Press, 1999);
- [42] Qi Zhou e Tin-Lun Ho, **Phys. Rev. Lett.** **105**, 245702 (2010);

- [43] C. N. Yang, **Phys. Rev. Lett.** **19**, 1312 (1967);
- [44] M. Gaudin, **Phys. Lett.** **24A**, 55 (1967);
- [45] M T Batchelor, M Bortz, X W Guan e N Oelkers **J. Phys: Conference Series** **42** 5 (2006);
- [46] N Oelkers, M T Batchelor, M Bortz e X-W Guan **J. Phys. A: Math. Gen.** **39** 1073 (2006);
- [47] C. N. Yang e C. P. Yang, **J. Math. Phys.** **10** 1115 (1969);
- [48] M. Takahashi, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999);
- [49] M. T. Batchelor, X.-W. Guan, N. Oelkers e Z. Tsuboi, **Adv. Phys.** **56**, 465 (2007);
- [50] Lai C K **Phys. Rev. A** **8** 2567 (1973);
- [51] P. Schlottmann, **Int. J. Mod. Phys. B** **11** 355 (1997);
- [52] M. M. Parish, S. K. Baur, E. J. Mueller e D. A. Huse, **Phys. Rev. Lett.** **99**, 250403 (2007);
- [53] E. Zhao e W. V. Liu, **Phys. Rev. A** **78** 063605 (2009);
- [54] M. Rizzi, M. Polini, M. A. Cazalilla, M. R. Bakhtiari, M. P. Tosi e R. Fazio, **Phys. Rev. B** **77**, 245105 (2008);
- [55] G. G. Batrouni, M. H. Huntley, V. G. Rousseau e R. T. Scalettar, **Phys. Rev. Lett.** **100**, 116405 (2008);
- [56] X-W. Guan e M. T. Batchelor, **J. Phys. A: Math. Theor.** **44**, 102001 (2011);
- [57] E. Zhao, X-W. Guan, W. V. Liu, M. T. Batchelor e M. Oshikawa, **Phys. Rev. Lett.** **103**, 140404 (2009);
- [58] I. Affleck, **Phys. Rev. Lett.** **56**, 746 (1986);

- [59] Xiwen Guan e Tin-Lun Ho, **Phys. Rev. A** **84**, 023616 (2011);
- [60] C. C. N. Kuhn, X. W. Guan, A. Foerster e M. T. Batchelor, **Phys. Rev. A** **85**, 043606 (2012);
- [61] B. Sutherle, **Phys. Rev. Lett.** **20**, 98 (1968);
- [62] T. Bergeman, M. G. Moore e M. Olshanii, **Phys. Rev. Lett.** **91**, 163201 (2003);
- [63] H. Moritz *et al.*, **Phys. Rev. Lett.** **94**, 210401 (2005);
- [64] M. Bartenstein *et al.*, **Phys. Rev. Lett.** **94**, 103201 (2005);
- [65] M. Takahashi, **Prog. Theor. Phys.** **44**, 899 (1970);
- [66] X. W. Guan, M. T. Batchelor, C. Lee e J. Y. Lee, **Europhys. Lett.** , **86**, 50003 (2009);
- [67] X. W. Guan, M. T. Batchelor e M. Takahashi, **Phys. Rev. A** **76**, 043617 (2007),
- [68] F. Woynarovich e K. Penc Z., **Phys. B** **85**, 269 (1991);
- [69] T. L. Ho, **Phys. Rev. Lett.** **81**, 742 (1998).
- [70] Xiangguo Yin, Xi-Wen Guan, Shu Chen e Murray T. Batchelor, **Phys. Rev. A** **84**, 011602(R) (2011);
- [71] Hui Hu, Xia-Ji Liu e Peter D. Drummond. **Phys. Rev. Lett.** **98**, 070403 (2007);
- [72] Xibo Zhang, Chen-Lung Hung, Shih-Kuang Tung, Nathan Gemelke e Cheng Chin, **New J. Phys.** **13**, 045011 (14pp) (2011);
- [73] Nathan Gemelke, Xibo Zhang, Chen-Lung Hung e Cheng Chin, **Nature** **460**, 995 (2009);
- [74] Chen-Lung Hung, Xibo Zhang, Nathan Gemelke e Cheng Chin, **Nature** **470**, 236 (2011);
- [75] C. C. N. Kuhn, X. W. Guan, A. Foerster e M. T. Batchelor, **Phys. Rev. A** **86**(R), 011605 (2012);

- [76] P. A. Altin, N. P. Robins, D. Döring, J. E. Debs, R. Poldy, C. Figl, e J. D. Close, **Rev. Sci. Instrum.** **81**, 063103 (2010);
- [77] P. A. Altin, Tese de doutorado em Física da Universidade Nacional Australiana, (2012);
- [78] R. Grimm, M. Weidemüller, e Y. B. Ovchinnikov., **Adv. At. Mol. Opt. Phys.** **42**, 95 (2000);
- [79] Matthias Weidemüller, Andreas Hemmerich, Axel Görlitz, Tilman Esslinger, e Theodor W. Hänsch, **Phys. Rev. Lett.** **75**, 4583–4586 (1995);
- [80] Zoran Hadzibabic, Sabine Stock, Baptiste Battelier, Vincent Bretin, e Jean Dalibard, **Phys. Rev. Lett.** **93**, 180403 (2004);
- [81] Henning Moritz, Thilo Stöferle, Michael Köhl, e Tilman Esslinger, **Phys. Rev. Lett.** **91**, 250402 (2003);
- [82] M. Olshanii, **Phys. Rev. Lett.** **81** , 938 (1998);
- [83] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini, e B. E. Granger, **Phys. Rev. Lett.** **92**, 030402 (2004);
- [84] Seminário apresentado pelo grupo do Prof. William D. Phillips em Kiola, 2004;
- [85] S. S. Sané, S. Bennetts, J. E. Debs, C. C. N. KUHN, G. D. McDonald, P. A. Altin, J. D. Close e N. P. Robins, **Optics Express**, **20**, 8915–8919 (2012);
- [86] Luu T e Schwenk A, **Phys. Rev. Lett.** **98**, 1973 (2007);
- [87] Guan X-W, Lee J Y, Batchelor M T, Yin X-G e Chen S, **Phys. Rev. A** **82**, 021606(R) (2010);
- [88] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz e S. Jochim **Science** **332**, 336 (2011);
- [89] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Boh e, S. Jochim, **Phys. Rev. Lett.** **108** , 075303 (2012);

- [90] D. Rubeni, A. Foerster e I. Roditi, **Phys. Rev. A** **86**, 043619 (2012);

New Journal of Physics

The open-access journal for physics

Phase diagrams of three-component attractive ultracold fermions in one dimension

C C N Kuhn and A Foerster

Instituto de Fisica da UFRGS, Av. Bento Gonçalves, 9500,
Porto Alegre 91501-970, Brazil
E-mail: carlos.kuhn@ufrgs.br and angela@if.ufrgs.br

New Journal of Physics **14** (2012) 013008 (11pp)

Received 3 May 2011

Published 6 January 2012

Online at <http://www.njp.org/>

doi:10.1088/1367-2630/14/1/013008

Abstract. We investigate trions, paired states and quantum phase transitions in one-dimensional SU(3) attractive fermions in external fields by means of the Bethe ansatz formalism. Analytical results for the ground state energy, critical fields and complete phase diagrams are obtained for the weak coupling regime. Higher-order corrections for these physical quantities are presented in the strong attractive regime. Numerical solutions of the dressed energy equations allow us to examine how the different phase boundaries are modified by varying the inter-component coupling throughout the whole attractive regime. The pure trionic phase existing in the strong coupling regime decreases smoothly with a decrease in this coupling, until the weak limit is reached. In this weak regime, a pure Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS)-like paired phase can be sustained under certain nonlinear Zeeman splittings.

Contents

1. Introduction	2
2. The model	2
3. Ground states	4
4. Dressed energy formalism	5
5. Full phase diagrams	7
6. Conclusion	10
Acknowledgments	10
References	10

1. Introduction

Recent experiments on ultracold atomic systems confined to one dimension (1D) [1–4] have attracted renewed interest in Bethe ansatz integrable models of interacting bosons and multi-component fermions. The most recent experimental breakthrough is the realization of a one-dimensional (1D) spin-imbalanced Fermi gas of ${}^6\text{Li}$ atoms under the degenerate temperature [5]. This study demonstrates how ultracold atomic gases in 1D may be used to create nontrivial new phases of matter, and also paves the way for direct observation and further study of the Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) states [6, 7].

Three-component fermions exhibit a rich scenario, revealing more exotic phases [8–15]. Notably, strongly attractive three-component ultracold atomic fermions can form three-body bound states called *trions*. Consequently, a phase transition between Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS)-like pairing superfluid and trionic states is expected to occur in the strong attractive regime [10, 13, 16–22]. So far, most of the theoretical analyses have focused on the attractive strong coupling limit. A pertinent discussion in this context is what happens at the intermediate and weak attractive coupling regimes.

In this paper, we consider 1D three-component ultracold fermions with δ -function interaction in external magnetic fields. From a mathematical point of view, this model was solved long ago by Sutherland [23] and Takahashi [24] through Bethe ansatz techniques. Recently, integrable models of three-component interacting fermions [16, 17, 25] received renewed interest in connection with ultracold atomic gases. Advanced experimental techniques newly developed allow us to explore the three-component Fermi gas with different phases of trions, dimers and free atoms [26–29]. Remarkably, the direct observation of a trimer state consisting of fermionic ${}^6\text{Li}$ atoms in the three energetically lowest substates has recently been reported in [30]. This opens up a possibility to experimentally study such novel quantum phases of trions and pairs in 1D three-component Fermi gases, providing a physical ground and stimulus for the investigation of their theoretical aspects.

Our aim here is to expand on the theoretic knowledge of the 1D integrable model of three-component fermions by undertaking a detailed analysis of how the different phases are modified as the inter-component interaction decreases, ranging from a strong to a weak regime. We obtain analytical expressions for the critical fields and construct the full phase diagrams in the weak coupling regime by solving the Bethe ansatz equations (BAE). We extend previous work on this model [16, 19] to derive higher order corrections for these physical quantities in the strong coupling regime. Numerical solutions of the dressed energy equations show that the pure trionic phase existing in the strong coupling regime decreases as the coupling decreases and disappears in the presence of external fields when the weak regime is approached. In contrast to the two-component interacting fermions [31], nonlinear Zeeman splitting may sustain a BCS-like paired phase in the three-component attractive fermions for the weak coupling regime.

2. The model

We consider a δ -function (contact potential) interacting system of N fermions with equal mass m , which can occupy three possible hyperfine levels ($|1\rangle$, $|2\rangle$ and $|3\rangle$) with particle number N^1 , N^2 and N^3 , respectively. They are constrained to a line of length L with periodic boundary

conditions. The Hamiltonian reads [23]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) + E_Z. \quad (1)$$

The first and second terms correspond to the kinetic energy and δ -interaction potential, respectively. The last term denotes the Zeeman energy $E_Z = \sum_{i=1}^3 N^i \epsilon_Z^i(\mu_B^i, B)$, with the Zeeman energy levels ϵ_Z^i determined by the magnetic moments μ_B^i and the magnetic field B . For later convenience, the Zeeman energy term can also be written as $E_Z = -H_1(N^1 - N^2) - H_2(N^2 - N^3) + N\bar{\epsilon}$, where the unequally spaced Zeeman splitting in three hyperfine levels can be specified by two independent parameters $H_1 = \bar{\epsilon} - \epsilon_Z^1(\mu_B^1, B)$ and $H_2 = \epsilon_Z^3(\mu_B^3, B) - \bar{\epsilon}$, with $\bar{\epsilon} = \sum_{\sigma=1}^3 \epsilon_Z^\sigma(\mu_B^\sigma, B)/3$ the average Zeeman energy.

The spin-independent contact interaction g_{1D} remains between fermions with different hyperfine states and preserves the spins in each hyperfine state, i.e. the number of fermions in each spin state is conserved. Although these conditions seem rather restrictive, it is possible to tune scattering lengths between atoms in different low sublevels to form nearly SU(3) degeneracy Fermi gases via broad Feshbach resonances [1, 26, 27, 32]. Consequently, the model still captures the essential physics relevant in the discussion of multiple phases in three-component ultracold Fermi gases. The inter-component coupling $g_{1D} = -\hbar^2 c/m$ with interaction strength $c = -2/a_{1D}$ is determined by the effective 1D scattering length a_{1D} [33]. It is attractive for $g_{1D} < 0$ and repulsive for $g_{1D} > 0$. Here we will focus on the attractive case. For simplicity, we choose the dimensionless units of $\hbar = 2m = 1$ and use the dimensionless coupling constant $\gamma = c/n$ with linear density $n = N/L$.

The Hamiltonian (1) exhibits spin SU(3) symmetry and was solved long ago by means of the nested Bethe ansatz [23, 24]. In this approach its spin content was incorporated via the symmetry of the wavefunction. The energy eigenspectrum is given in terms of the quasimomenta $\{k_i\}$ of the fermions through

$$E = \sum_{j=1}^N k_j^2, \quad (2)$$

satisfying the following set of coupled BAE [23, 24]

$$\begin{aligned} \exp(i k_j L) &= \prod_{\ell=1}^{M_1} \frac{k_j - \Lambda_\ell + i\gamma/2}{k_j - \Lambda_\ell - i\gamma/2}, \\ \prod_{\ell=1}^N \frac{\Lambda_\alpha - k_\ell + i\gamma/2}{\Lambda_\alpha - k_\ell - i\gamma/2} &= - \prod_{\beta=1}^{M_1} \frac{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + i\gamma}{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - i\gamma} \prod_{\ell=1}^{M_2} \frac{\Lambda_\alpha - \lambda_\ell - i\gamma/2}{\Lambda_\alpha - \lambda_\ell + i\gamma/2}, \\ \prod_{\ell=1}^{M_1} \frac{\lambda_\mu - \Lambda_\ell + i\gamma/2}{\lambda_\mu - \Lambda_\ell - i\gamma/2} &= - \prod_{\ell=1}^{M_2} \frac{\lambda_\mu - \lambda_\ell + i\gamma}{\lambda_\mu - \lambda_\ell - i\gamma}, \end{aligned} \quad (3)$$

written also in terms of the rapidities for the internal hyperfine spin degrees of freedom Λ_α and λ_μ . Above $j = 1, \dots, N$, $\alpha = 1, \dots, M_1$, $\mu = 1, \dots, M_2$, with quantum numbers $M_1 = N_2 + 2N_3$ and $M_2 = N_3$. For the irreducible representation $[3^{N_3} 2^{N_2} 1^{N_1}]$, a three-column Young tableau

encodes the numbers of unpaired fermions ($N_1 = N^1 - N^2$), bound pairs ($N_2 = N^2 - N^3$) and trions ($N_3 = N^3$).

3. Ground states

For attractive interaction, the BAE allow charge bound states and spin strings. In particular, the SU(3) symmetry carries two kinds of charge bound states: trions and pairs. In principle, different numbers of unpaired fermions, pairs and trions can be chosen to populate the ground state by carefully tuning H_1 and H_2 .

In the strong coupling regime $L|c| \gg 1$, the imaginary parts of the bound states become equal spaced, i.e. a trionic state has the form $\{k_j = \Lambda_j \pm i|c|, \lambda_j\}$ and for the bound pair $\{k_r = \Lambda_r \pm i|c|/2\}$. Substituting these root patterns into the BAE (3), we find their real parts, from which the ground state energy in the strongly attractive regime can be obtained [16]:

$$\begin{aligned} \frac{E}{L} \approx & \frac{\pi^2 n_1^3}{3} \left(1 + \frac{8n_2 + 4n_3}{|c|} + \frac{12}{c^2} (2n_2 + n_3)^2 \right) - \frac{n_2 c^2}{2} \\ & + \frac{\pi^2 n_2^3}{6} \left(1 + \frac{12n_1 + 6n_2 + 16n_3}{3|c|} + \frac{1}{3c^2} (6n_1 + 3n_2 + 8n_3)^2 \right) - 2n_3 c^2 \\ & + \frac{\pi^2 n_3^3}{9} \left(1 + \frac{12n_1 + 32n_2 + 18n_3}{9|c|} + \frac{1}{27c^2} (6n_1 + 16n_2 + 9n_3)^2 \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Here $n_a = N_a/L$ ($a = 1, 2, 3$) is the density for unpaired fermions, pairs and trions, respectively. This state can be considered as a mixture of unpaired fermions, pairs and trionic fermions, behaving basically like particles with different statistical signatures [34]. For strong attractive interaction, trions are stable compared to the BCS-like pairing and unpaired states. From (4) we can obtain the binding energy for a trion, given by $\varepsilon_t = \hbar^2 c^2 / m$ and the pair binding energy, which is $\varepsilon_b = \hbar^2 c^2 / 4m$.

In the weak coupling regime $L|c| \ll 1$, the imaginary parts iy of the charge bound states are the roots of Hermite polynomials H_k of degree k . Specifically, $H_k(\sqrt{\frac{L}{2|c|}}y) = 0$, with $k = 2, 3$ for a bound pair and a trion, respectively [35]. The real parts of the quasimomenta deviate smoothly from the values evaluated for the $c = 0$ case. With this root configuration, the ground state energy in the weak attractive regime can be obtained:

$$\begin{aligned} \frac{E}{L} \approx & \frac{\pi^2}{3} (n_1^3 + 2n_2^3 + 3n_3^3) + \pi^2 (n_1(n_2 + n_3)(n_1 + n_2 + n_3) + 2n_2n_3(n_2 + n_3)) \\ & - 2|c|(n_1n_2 + 2n_1n_3 + 4n_2n_3 + n_2^2 + 3n_3^2). \end{aligned} \quad (5)$$

The ground state energy (5) is dominated by the kinetic energy of composite particles and unpaired fermions and has an interaction energy consisting of density-density interaction between charge bound states and between charge bound states and unpaired fermions. From equation (5) we can obtain the binding energy for a trion, given by $\varepsilon_t = 3\hbar^2|c|/mL$, and the pair binding energy, which is $\varepsilon_b = \hbar^2|c|/mL$. For weak attractive interaction, the trionic state is unstable against thermal and spin fluctuations. This becomes apparent in the weak coupling phase diagrams presented in figures 1(d), 2(c) and 3(c).

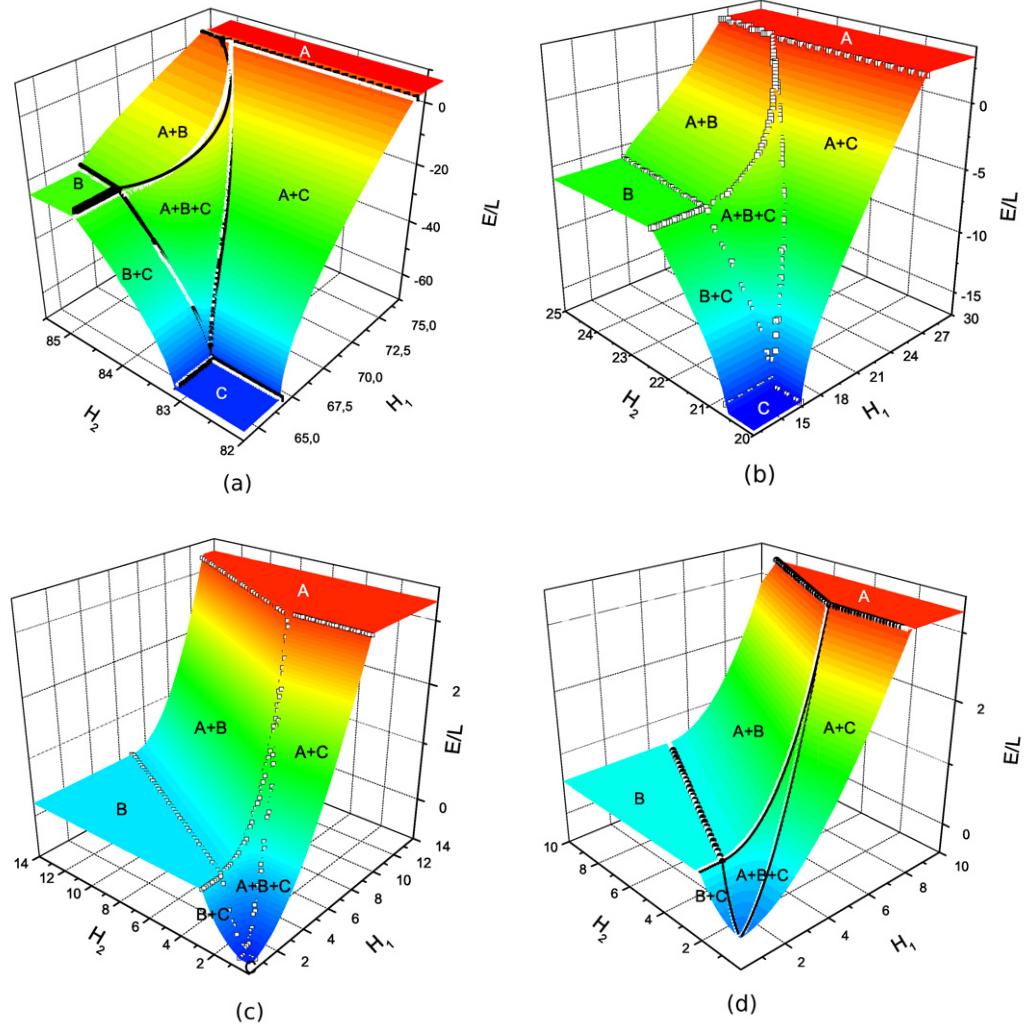


Figure 1. Ground state energy versus Zeeman splitting for different coupling values: (a) strong interaction $|\gamma| = 10$, (b) $|\gamma| = 5$, (c) $|\gamma| = 1$ and (d) weak interaction $|\gamma| = 0.5$. The white dots correspond to the numerical solutions of the dressed energy equations (6). The black lines in (a) and (d) are plotted from the analytical results (10) and (11), respectively. Good agreement was found between the analytical results and the numerical solutions in the strong and weak regimes. The pure trionic phase C , present in the strong coupling regime, decreases smoothly as $|\gamma|$ decreases and is suppressed in the weak limit.

4. Dressed energy formalism

In the thermodynamic limit, i.e. $L, N \rightarrow \infty$ with N/L finite, the grand partition function $Z = \text{tr}(e^{-\mathcal{H}/T}) = e^{-G/T}$ is given in terms of the Gibbs free energy $G = E + E_Z - \mu N - TS$, written in terms of the Zeeman energy E_Z , chemical potential μ , temperature T and entropy S [16, 36–38]. The Gibbs free energy can be expressed in terms of the densities of particles and holes for unpaired fermions, bound pairs and trions, as well as spin degrees of freedom, which

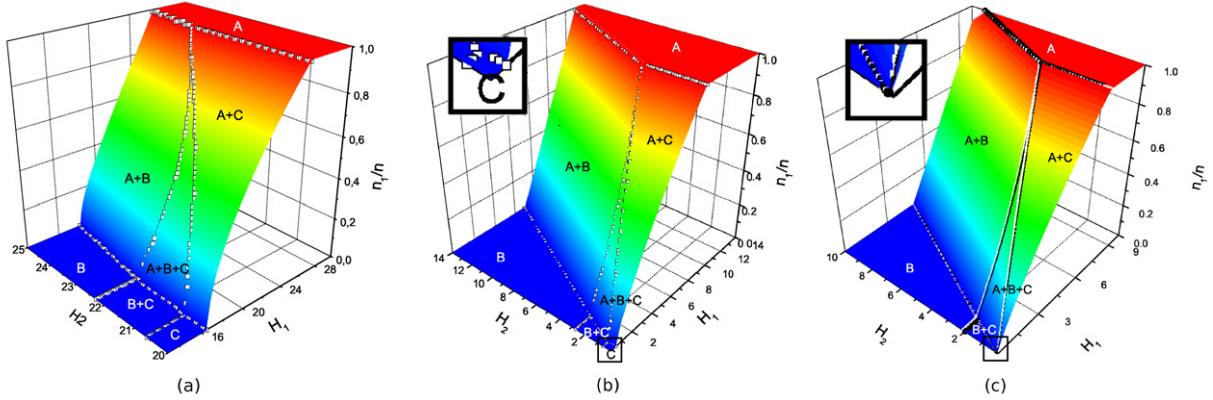


Figure 2. Phase diagram showing the polarization n_1/n versus the fields H_1 and H_2 for different coupling values (a) $|\gamma| = 5$, (b) $|\gamma| = 1$ and (c) weak interaction $|\gamma| = 0.5$. The white dots correspond to the numerical solutions of the dressed energy equations (6). Good agreement is found between the analytical results (11) (black lines) and the numerical solution in the weak regime. At intermediate coupling regimes, the pure trionic phase decreases by decreasing the coupling and it is not present in the weak regime. A zoom around the origin is presented in figure 2(b) (2(c)) to show the presence (absence) of the trionic phase.

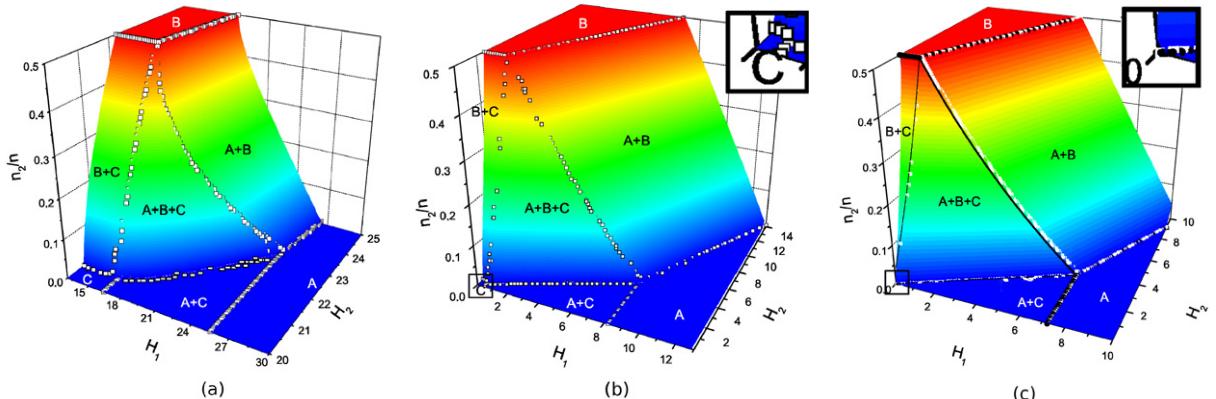


Figure 3. Phase diagram showing the polarization n_2/n versus the fields H_1 and H_2 for different coupling values (a) $|\gamma| = 5$, (b) $|\gamma| = 1$ and (c) weak interaction $|\gamma| = 0.5$. The white dots correspond to the numerical solutions of the dressed energy equations (6). The black lines plotted from the analytical results (11) are in good agreement with the numerical results in the weak regime. At intermediary coupling regimes, the pure trionic phase decreases by decreasing the coupling and it is not present in the weak regime. A zoom around the origin is presented in figure 3(b) (3(c)) to show the presence (absence) of the trionic phase.

are determined from the BAE (3). Thus the equilibrium state is established by minimizing the Gibbs free energy with respect to these densities. This procedure leads to a set of coupled nonlinear integral equations, from which the dressed energy equations are obtained in the limit $T \rightarrow 0$ (see [16, 38] for details)

$$\begin{aligned}\epsilon^{(3)}(\lambda) &= 3\lambda^2 - 2c^2 - 3\mu - a_2 * \epsilon^{(1)}(\lambda) - [a_1 + a_3] * \epsilon^{(2)}(\lambda) - [a_2 + a_4] * \epsilon^{(3)}(\lambda), \\ \epsilon^{(2)}(\Lambda) &= 2\Lambda^2 - 2\mu - \frac{c^2}{2} - H_2 - a_1 * \epsilon^{(1)}(\Lambda) - a_2 * \epsilon^2(\Lambda) - [a_1 + a_3] * \epsilon^{(3)}(\Lambda), \\ \epsilon^{(1)}(k) &= k^2 - \mu - H_1 - a_1 * \epsilon^{(2)}(k) - a_2 * \epsilon^{(3)}(k).\end{aligned}\quad (6)$$

Here $\epsilon^{(a)}$, $a = 1, 2, 3$ are the dressed energies for unpaired fermions, bound pairs and trions, respectively, and $a_j(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{j|c|}{(jc/2)^2 + x^2}$. The symbol ‘*’ denotes the convolution $a_j * \epsilon^{(a)}(x) = \int_{-Q_a}^{+Q_a} a_j(x-y) \epsilon^{(a)}(y) dy$ with the integration boundaries Q_a given by $\epsilon^{(a)}(\pm Q_a) = 0$. The Gibbs free energy per unit length at zero temperature can be written in terms of the dressed energies as $G = \sum_{a=1}^3 \frac{a}{2\pi} \int_{-Q_a}^{+Q_a} \epsilon^{(a)}(x) dx$.

The dressed energy equations (6) can be analytically solved just in some special limits. In particular, they were solved in [16] for strongly attractive interaction through a lengthy iteration method. Here we numerically solve these equations to determine the full phase diagram of the model for any value of the coupling. This allows us to examine how the different phase boundaries deform by varying the coupling from the strong to weak regime. The numerical solution is also employed to confirm the analytical expressions for the physical quantities and the resulting phase diagrams of the model in the weak coupling limit (for a similar discussion in the strong regime see [19]).

5. Full phase diagrams

Basically, there are two possible Bethe ansatz schemes to construct the phase diagram of the system. One possibility is to handle it with the dressed energy equations (6). This approach was discussed for the strong attractive regime in [16], where expressions for the fields in terms of the densities were obtained up to the order of $1/|c|$. Alternatively, one can handle it directly with its discrete version (equations (2) and (3)) by solving the BAE. We adopt this second strategy here. In order to obtain the explicit forms for the fields in terms of the polarizations, we consider the energy for arbitrary population imbalances

$$E/L = \mu n + G/L + n_1 H_1 + n_2 H_2, \quad (7)$$

which coincides with the ground state energy (2) obtained by solving the BAE (3). Then the fields H_1 and H_2 are determined through the relations

$$H_1 = \frac{\partial E/L}{\partial n_1}, \quad H_2 = \frac{\partial E/L}{\partial n_2} \quad (8)$$

together with the constraint

$$n = n_1 + 2n_2 + 3n_3. \quad (9)$$

In the strong coupling regime, using the ground state energy (4) we find

$$\begin{aligned}
H_1 &= \pi^2 n_1^2 \left(1 - \frac{4n_1}{9|c|} + \frac{8n_2}{|c|} + \frac{4n_3}{|c|} + \frac{12}{c^2} (2n_2 + n_3)^2 - \frac{8n_1}{3c^2} (2n_2 + n_3) \right) \\
&\quad - \frac{\pi^2 n_3^2}{9} \left(1 + \frac{4n_1}{3|c|} + \frac{32n_2}{9|c|} + \frac{4n_3}{3|c|} + \frac{(6n_1 + 16n_2 + 9n_3)^2}{27c^2} - \frac{2n_3(6n_1 + 16n_2 + 9n_3)}{9c^2} \right) \\
&\quad + \frac{10\pi^2 n_2^3}{27|c|} \left(1 + \frac{6n_1 + 3n_2 + 8n_3}{|c|} \right) + \frac{2c^2}{3}, \\
H_2 &= \frac{\pi^2 n_2^2}{2} \left(1 + \frac{4n_1}{|c|} + \frac{40n_2}{27|c|} + \frac{16n_3}{3|c|} + \frac{(6n_1 + 3n_2 + 8n_3)^2}{3c^2} - \frac{14n_2(6n_1 + 3n_2 + 8n_3)}{27c^2} \right) \\
&\quad - \frac{2\pi^2 n_3^2}{9} \left(1 + \frac{4n_1}{3|c|} + \frac{32n_2}{9|c|} + \frac{8n_3}{9|c|} + \frac{(6n_1 + 16n_2 + 9n_3)^2}{27c^2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{10n_3(6n_1 + 16n_2 + 9n_3)}{27c^2} \right) + \frac{16\pi^2 n_1^3}{9|c|} \left(1 + \frac{6(2n_2 + n_3)}{|c|} \right) + \frac{5c^2}{6}. \tag{10}
\end{aligned}$$

These equations provide higher order corrections to those derived in [16] using the dressed energy equations. To determine the full phase boundaries, we also need the energy–field transfer relation between the paired and unpaired phases $H_1 - H_2/2$, which can be extracted from the underlying two-component system with SU(2) symmetry [31, 34]. These equations determine the full phase diagram and the critical fields activated by the fields H_1 and H_2 .

Figure 1(a) shows the ground state energy versus Zeeman splitting parameters H_1 and H_2 determined from equation (4) with the densities n_1 and n_2 obtained from (10). There are three pure phases: an unpaired phase A , a pairing phase B and a trion phase C and four different mixtures of these states. For small H_1 , a transition from a trionic state into a mixture of trions and pairs occurs as H_2 exceeds the lower critical value H_2^{c1} . When H_2 is greater than the upper critical value H_2^{c2} , a pure pairing phase takes place. Trions and BCS-like pairs coexist when $H_2^{c1} < H_2 < H_2^{c2}$. These critical fields, derived from equation (10), are given by $H_2^{c1} \approx n^2 (\frac{5\gamma^2}{6} - \frac{2\pi^2}{81} (1 + \frac{8}{27|\gamma|} - \frac{1}{27\gamma^2}))$ and $H_2^{c2} \approx n^2 (\frac{5\gamma^2}{6} + \frac{\pi^2}{8} (1 + \frac{20}{27|\gamma|} - \frac{1}{36\gamma^2}))$. The phase transitions from $B \rightarrow A + B \rightarrow A$ induced by increasing H_1 are reminiscent of those in the two-component systems [34, 41]. Basically, in this region the highest level is far away from the other two levels, so the system reduces to the spin-1/2 fermion case. The mixed phase containing BCS-like pairs and unpaired fermions can be called an FFLO phase. We mention that a discussion on the pairing nature of 1D many-body systems can be found in, for instance, [39, 40]. For small H_2 , a phase transition from a trionic to a mixture of trions and unpaired fermions occurs. Using equation (10), we find that the trionic state with zero polarization $n_1/n = 0$ forms the ground state when the field $H < H_1^{c1}$, where $H_1^{c1} \approx n^2 (\frac{2\gamma^2}{3} - \frac{\pi^2}{81} (1 + \frac{4}{9|\gamma|} + \frac{1}{9\gamma^2}))$. When H_1 is greater than the upper critical value $H_1^{c2} \approx n^2 (\frac{2\gamma^2}{3} + \pi^2 (1 - \frac{4}{9|\gamma|}))$, all trions are broken and the state becomes a normal Fermi liquid.

At intermediate coupling regimes, it is not possible to construct the full phase diagrams analytically. However, they can be determined by numerically solving the dressed energy equations (6), as illustrated in figures 1(b) and (c), figures 2(a) and (b) and figures 3(a) and (b),

for the intermediate values of the coupling $|c| = 5$ and $|c| = 1$, respectively. The different phase boundaries are modified slightly by varying the inter-component coupling through the whole attractive regime. In particular, the pure trionic phase existing in the strong coupling regime decreases smoothly by decreasing this coupling until it is completely suppressed. A careful numerical analysis of the phase diagrams for $n = 1$ and different values of $|c|$ between $|c| = 1$ and $|c| = 0.5$ indicates that the critical coupling value at which the trionic phase disappears is around $c_c \approx 0.6$. Other mixed phases involving trions, especially the phase $(B + C)$, also decrease by decreasing $|c|$.

In the weak coupling regime, we obtain the expressions between the fields and the polarizations using equations (5), (8) and (9):

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{\pi^2}{3}(2n_1^2 + n_2^2 + 4n_1n_2 + 4n_1n_3 + 2n_2n_3) + \frac{2|c|}{3}(2n_1 + n_2), \\ H_2 &= \frac{\pi^2}{3}(n_1^2 + 2n_2^2 + 2n_1n_2 + 2n_1n_3 + 4n_2n_3) + \frac{2|c|}{3}(2n_2 + n_1). \end{aligned} \quad (11)$$

These equations together with the energy–field transfer relation $H_1 - H_2/2$ determine the full phase diagram and the critical fields activated by the Zeeman splitting H_1 and H_2 . We observe that the density of trions n_3 does not appear independently in equations (11), in contrast to the corresponding equations in the strong regime (10). Figure 1(d) presents the ground state energy versus the fields H_1 , H_2 , while figures 2(c) and 3(c) show the polarizations n_1/n and n_2/n in terms of Zeeman splitting, respectively. Now in the weak coupling regime there are just six different phases in the H_1 – H_2 plane: we observe the disappearance of the pure trionic phase C in the presence of the fields, i.e. the trionic state is unstable against thermal and spin fluctuations. This behavior is in contrast to the strong coupling regime, where the phase C is robust and trion states populate the ground state for a considerable interval of the fields. In addition, the phase where trions and pairs coexist $(B + C)$ decreases significantly compared to the strong coupling regime. Interestingly, in contrast to the weak attractive spin-1/2 fermion system, a pure paired phase can be sustained under certain Zeeman splittings. For certain tuning H_1 and H_2 , the two lowest levels are almost degenerate. Therefore, the paired phase naturally occurs and is stable. The persistence of this phase is relevant for the investigation of phase transition between BCS-like pairs and FFLO states. All these boundary modifications occur smoothly, as shown by a numerical analysis of the phase diagrams for different values of the coupling across all regimes. This indicates that all phase transitions in the vicinity of critical points are second order. This conclusion is consistent with previous analytical results [34, 41]. We also mention that quantum phase transitions between different superfluid phases have been discussed in [42].

We perform a similar analysis as in the previous strong case to extract the critical fields. Since the trionic phase C disappears for non-vanishing fields, less critical fields are found compared to the strong coupling case. For small H_1 a transition from a mixture of trions and pairs to a pure paired phase occurs as H_2 exceeds the critical value $H_2^c \approx n^2(\frac{2\gamma}{3} + \frac{\pi^2}{6})$. The transition from a mixture of trions and unpaired fermions to a normal Fermi liquid phase occurs as H_1 exceeds the critical value $H_1^c \approx n^2(\frac{4\gamma}{3} + \frac{2\pi^2}{3})$. The phase transitions $B \rightarrow A + B \rightarrow A$ are reminiscent of those in spin-1/2 fermion systems. However, in the weak attractive two-component case the pure BCS-like paired phase is suppressed [31] and consequently it is not possible to investigate the phase separation between a BCS-like paired phase and an FFLO state, in contrast to the three-component case, where this study is still possible in a weak regime.

6. Conclusion

We have studied the three-component attractive 1D Fermi gas in external fields through the Bethe ansatz formalism. New results for the critical fields and complete zero-temperature phase diagrams have been presented for the weak coupling regime. Previous work on this model has been extended to derive higher order corrections to these physical quantities in the strong regime. We have further confirmed that the system exhibits exotic phases of trions, bound pairs, a normal Fermi liquid and a mixture of these phases in the strongly attractive limit. We have also shown how the different phase boundaries deform by varying the inter-component coupling across the whole attractive regime. In particular, the trionic phase that may occur in the strong coupling regime for certain values of the Zeeman splittings decreases smoothly by decreasing the coupling, until the weak limit is approached, when the trionic phase is suppressed. Interestingly, in the weak regime, a pure paired phase can be maintained under certain nonlinear Zeeman splittings, in contrast to the two-component attractive 1D Fermi gas. Our high precision of critical phase boundaries paves the way for further investigation of quantum criticality in the three-component interacting Fermi gas through the finite-temperature Bethe ansatz.

Acknowledgments

This work was supported by CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico). The authors thank XW Guan for helpful discussions and comments.

References

- [1] Moritz H, Stoferle T, Gunter K, Kohl M and Esslinger T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 210401
- [2] Kinoshita T, Wenger T and Weiss D S 2004 *Science* **305** 1125
- [3] Kinoshita T, Wenger T and Weiss D S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 190406
- [4] Haller E, Gustavsson M, Mark M J, Danzl J G, Hart R, Pupillo G and Nägerl H-C 2009 *Science* **325** 1224
- [5] Liao Y, Rittner A, Paprotta T, Li W, Patridge G, Hulet R, Baur S and Mueller E 2010 *Nature* **467** 567
- [6] Fulde P and Ferrell R A 1964 *Phys. Rev.* **135** A550
Larkin A I and Ovchinnikov Yu N 1965 *Sov. Phys.—JETP* **20** 762
- [7] Liu W V and Wilczek F 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 047002
- [8] Rapp Á, Zaránd G, Honerkamp C and Hofstetter W 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 160405
Honerkamp C and Hofstetter W 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 170403
- [9] Cherng R W, Refael G and Demler E 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 130406
- [10] Lecheminant P, Boulat E and Azaria P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 240402
Capponi S, Roux G, Lecheminant P, Azaria P, Boulat E and White S R 2008 *Phys. Rev. A* **77** 013624
- [11] Wilczek F 2007 *Nat. Phys.* **3** 375
- [12] Paananen T, Martikainen J-P and Törmä P 2006 *Phys. Rev. A* **73** 053606
- [13] Rapp Á, Hofstetter W and Zaránd G 2008 *Phys. Rev. B* **77** 144520
- [14] Zhai H 2007 *Phys. Rev. A* **75** 031603
- [15] de Silva T N 2009 *Phys. Rev. A* **80** 013620
- [16] Guan X W, Batchelor M T, Lee C and Zhou H-Q 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 200401
- [17] Liu X-J, Hu H and Drummond P D 2008 *Phys. Rev. A* **77** 013622
- [18] Peng He, Yin X, Guan X-W, Batchelor M T and Wang Y 2010 *Phys. Rev. A* **82** 053633
- [19] Batchelor M T, Foerster A, Guan X-W and Kuhn C C N 2010 *J. Stat. Mech.* (2010) P12014

- [20] Guan X-W, Lee J-Y, Batchelor M T, Yin X G and Chen S 2010 *Phys. Rev. A* **82** 021606
- [21] Bedaque P F and Incao D J P 2009 *Ann. Phys.* **324** 1763
- [22] Inaba K and Suga S 2009 *Phys. Rev. A* **80** 041602
- [23] Sutherland B 1968 *Phys. Rev. Lett.* **20** 98
- [24] Takahashi M 1970 *Prog. Theor. Phys.* **44** 899
- [25] Errea B, Dukelsky J and Ortiz G 2009 *Phys. Rev. A* **79** 051603
- [26] Ottenstein T B, Lompe T, Kohnen M, Wenz A N and Jochim S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 203202
Huckans J H, Williams J R, Hazlett E L, Stites R W and Hara O K M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 165302
Williams J R, Hazlett E L, Huckans J H, Stites R W, Zhang Y and Hara O K M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 130404
- [27] Lompe T, Ottenstein T B, Serwane F, Viering K, Wenz A N, Zürn G and Jochim S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 103201
- [28] Nakajima S, Horikoshi M, Mukaiyama T, Naidon P and Ueda M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 023201
Nakajima S, Horikoshi M, Mukaiyama T, Naidon P and Ueda M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 143201
- [29] Knoop S, Ferlaino F, Mark M, Berninger M, Schöbel H, Nägerl H-C and Grimm R 2009 *Nat. Phys.* **5** 227
- [30] Lompe T, Ottenstein T B, Serwane F, Wenz A N, Zürn G and Jochim S 2010 *Science* **330** 940
- [31] He J S, Foerster A, Guan X-W and Batchelor M T 2009 *New J. Phys.* **11** 073009–1
- [32] Bartenstein M, Altmeyer A, Riedl S, Geursen R, Jochim S, Chin C, Denschlag J H and Grimm R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 103201
- [33] Bergeman T, Moore M G and Olshanii M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 163201
- [34] Guan X-W, Batchelor M T, Lee C and Bortz M 2007 *Phys. Rev. B* **76** 085120
- [35] Guan X W, Batchelor M T, Lee C and Lee J Y 2009 *Europhys. Lett.* **86** 50003
- [36] Takahashi M 1999 *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [37] Schlottmann P 1997 *Int. J. Mod. Phys. B* **11** 355
- [38] Batchelor M T, Guan X-W, Oelkers N and Tsuboi Z 2007 *Adv. Phys.* **56** 465
- [39] Gu C H and Yang C N 1989 *Commun. Math. Phys.* **122** 105
- [40] Lee J-Y and Guan X-W 2011 *Nucl. Phys. B* **853** 125
- [41] Woynarovich F and Penc K 1991 *Z. Phys. B* **85** 269
- [42] Catelani G and Yuzbashyan E A 2008 *Phys. Rev. A* **78** 033615

Exactly solvable models and ultracold Fermi gases

M T Batchelor^{1,2}, A Foerster^{3,4}, X-W Guan¹ and C C N Kuhn³

¹ Department of Theoretical Physics, Research School of Physics and Engineering, Australian National University, Canberra ACT 0200, Australia

² Mathematical Sciences Institute, Australian National University, Canberra ACT 0200, Australia

³ Instituto de Física da UFRGS, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, RS, Brazil

E-mail: Murray.Batchelor@anu.edu.au, angela@if.ufrgs.br, xwe105@physics.anu.edu.au and carlos.kuhn@ufrgs.br

Received 15 September 2010

Accepted 9 November 2010

Published 6 December 2010

Online at stacks.iop.org/JSTAT/2010/P12014

[doi:10.1088/1742-5468/2010/12/P12014](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2010/12/P12014)

Abstract. Exactly solvable models of ultracold Fermi gases are reviewed via their thermodynamic Bethe ansatz solution. Analytical and numerical results are obtained for the thermodynamics and ground state properties of two- and three-component one-dimensional attractive fermions with population imbalance. New results for the universal finite temperature corrections are given for the two-component model. For the three-component model, numerical solution of the dressed energy equations confirms that the analytical expressions for the critical fields and the resulting phase diagrams at zero temperature are highly accurate in the strong coupling regime. The results provide a precise description of the quantum phases and universal thermodynamics which are applicable to experiments with cold fermionic atoms confined to one-dimensional tubes.

Keywords: quantum integrability (Bethe ansatz), solvable lattice models, thermodynamic Bethe ansatz, phase diagrams (theory)

ArXiv ePrint: [1011.3259v1](https://arxiv.org/abs/1011.3259v1)

⁴ Author to whom any correspondence should be addressed.

Contents

1. Introduction	2
2. Two-component attractive Fermi gas with polarization	3
2.1. The model	3
2.2. Thermodynamic Bethe ansatz (TBA)	5
2.3. Phase diagram at zero temperature	6
2.4. TBA for low temperature	7
3. Three-component attractive Fermi gas with polarization	10
3.1. The model	10
3.2. Dressed energy formalism and phase diagrams at zero temperature	11
4. Conclusion and perspectives	14
Acknowledgments	15
References	15

1. Introduction

The experimental realization of Bose–Einstein condensates in dilute atomic gases [1]–[3] led to an explosion of ongoing research in ultracold matter physics. A remarkable development was the creation of the first molecular condensate in an ultracold degenerate Fermi gas [4,5], after which the condensation of fermionic pairs was soon detected and shown to be a superfluid [6]. A relevant question in this fermionic context is if superfluidity can persist in a Fermi gas with imbalanced spin population. In principle, superfluidity may still occur in a mismatched case, and some theories with unusual pairings and exotic phases have been proposed, such as the Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) phase, among others [7,8]. Subsequently the search for experimental confirmation of these new phases has been conducted by different groups [9,10]. Until now, however, only paired and polarized phases have been detected in three dimensions.

Further remarkable developments have involved the optical confinement of ultracold atoms to one dimension (1D), whereby atoms are trapped and cooled in an array of 1D tubes. These systems include bosonic Rb atoms [11,12] and fermionic ^{40}K atoms [13]. The most recent experimental breakthroughs involve 1D Rb atoms in the attractive regime [14] and the realization of a 1D spin-imbalanced attractive Fermi gas of ^6Li atoms under the degenerate temperature [15]. This experimental work in 1D has highlighted the fundamental nature of exactly solvable models of quantum many-body systems. In particular, the Bethe ansatz (BA) integrable models of Lieb and Liniger [16] for spinless bosons and of Yang [17] and Gaudin [18] for two-component fermions. The experimental work has further highlighted the deep and enduring significance of the BA [19]. More general BA integrable multi-component fermions were initially studied by Sutherland [20].

In this paper we examine the BA integrable two- and three-component attractive 1D Fermi gases with population imbalance. We shall see that these ultracold Fermi gases may be used to create nontrivial and exotic phases of matter. They also pave the way for the direct observation and further study of FFLO-like states.

2. Two-component attractive Fermi gas with polarization

2.1. The model

We begin by reviewing the exactly solved two-component model, with Hamiltonian [17, 18]

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) - \frac{1}{2} H(N_\uparrow - N_\downarrow) \quad (1)$$

which describes N δ -interacting spin- $\frac{1}{2}$ fermions of mass m constrained by periodic boundary conditions to a line of length L and subject to an external magnetic field H . The inter-component interaction g_{1D} can be tuned from strongly attractive to strongly repulsive via Feshbach resonance and optical confinement. The interaction is attractive for $g_{1D} < 0$ and repulsive for $g_{1D} > 0$. Here we will focus on the strongly attractive case, since this regime can be experimentally reached in 1D [15]. For convenience, we define $c = mg_{1D}/\hbar^2$ and a dimensionless interaction strength $\gamma = c/n$ for the physical analysis, with linear density $n = N/L$.

The model (1), which exhibits $SU(2)$ symmetry, was solved independently by Yang [17] and Gaudin [18] using the nested BA. The energy eigenspectrum is given by

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N k_j^2, \quad (2)$$

where the quasimomenta $\{k_j\}$ of the fermions, satisfy the BA equations [17, 18]

$$\begin{aligned} \exp(i k_j L) &= \prod_{\ell=1}^M \frac{k_j - \Lambda_\ell + i c/2}{k_j - \Lambda_\ell - i c/2}, \\ \prod_{\ell=1}^N \frac{\Lambda_\alpha - k_\ell + i c/2}{\Lambda_\alpha - k_\ell - i c/2} &= - \prod_{\beta=1}^M \frac{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + i c}{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - i c}, \end{aligned} \quad (3)$$

for $j = 1, \dots, N$ and $\alpha = 1, \dots, M$, with M the number of spin-down fermions. Here $\{\Lambda_\alpha\}$ are the rapidities for the internal spin degrees of freedom.

The solutions to the BA equations (3) provide the ground state properties and the elementary excitations of the model. It was shown [21, 22] that the distribution of the quasimomenta in the complex plane for the ground state involves bound states, which can be interpreted as Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS)-like pairs, and unpaired (excess) fermions. In the thermodynamic limit, i.e., $N, L \rightarrow \infty$ with N/L finite, and at zero temperature, all quasimomenta k_j of N atoms form two-body bound states, i.e.,

$k_j = \Lambda_j \pm i\frac{1}{2}c$ for $j = 1, \dots, M$, accompanied by the real spin parameter Λ_j [21]. The BA equations (3) then become

$$\begin{aligned} k_j L &= 2\pi I_j + \sum_{l=1}^M \theta\left(\frac{k_j - \Lambda_l}{c}\right), \quad j = 2M+1, \dots, N \\ 2\Lambda_j L &= 2\pi J_j + \sum_{l=1}^{N-2M} \theta\left(\frac{\Lambda_j - k_l}{c}\right) + \sum_{l=1}^M \theta\left(\frac{\Lambda_j - \Lambda_l}{2c}\right), \quad j = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (4)$$

where $\theta(x) = 2 \arctan 2x$ with $I_j = -(N-2M-1)/2, -(N-2M-3)/2, \dots, (N-2M-1)/2$ and $J_j = -(M-1)/2, \dots, (M-3)/2, (M-1)/2$.

Introducing the density of unpaired fermions $\rho(k) = dI_j(k)/L dk$ and the density of pairs $\sigma(\Lambda) = dJ_j(\Lambda)/L d\Lambda$ it follows that

$$\begin{aligned} \rho(k) &= \frac{1}{2\pi} - \frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{|c|\sigma(\Lambda) d\Lambda}{c^2/4 + (k - \Lambda)^2}, \\ \sigma(\Lambda) &= \frac{1}{\pi} - \frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{2|c|\sigma(\Lambda') d\Lambda'}{c^2 + (\Lambda - \Lambda')^2} - \frac{1}{2\pi} \int_{-Q}^Q \frac{|c|\rho(k) dk}{c^2/4 + (\Lambda - k)^2} \end{aligned} \quad (5)$$

in terms of which the total number of particles, the magnetization and the ground state energy per unit length are given by

$$n = 2 \int_{-B}^B \sigma(\Lambda) d\Lambda + \int_{-Q}^Q \rho(k) dk, \quad (6)$$

$$M^z = \frac{1}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow) = \frac{1}{2} \int_{-Q}^Q \rho(k) dk, \quad (7)$$

$$\frac{E}{L} = \int_{-B}^B (2\Lambda^2 - c^2/2) \sigma(\Lambda) d\Lambda + \int_{-Q}^Q k^2 \rho(k) dk. \quad (8)$$

Here the integration boundary Q characterizes the Fermi momentum in quasimomentum space and B is the Fermi momentum in spin rapidity space.

The BA equations (5) are essential to understanding the ground state properties of the model. The integration boundaries implicitly depend on the total number of particles and the magnetization. The strong coupling expansion for the ground state energy per unit length

$$\frac{E}{L} \approx \frac{\hbar^2 n^3}{2m} \left\{ -\frac{(1-P)\gamma^2}{4} + \frac{P^3 \pi^2}{3} \left[1 + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} \right] + \frac{\pi^2 (1-P)^3}{48} \left[1 + \frac{(1-P)}{|\gamma|} + \frac{4P}{|\gamma|} \right] \right\} \quad (9)$$

has been obtained by using the discrete BA equations (3) [22] or by iteration with the integral equations [23]. Here the polarization P is defined by $P = (N_\uparrow - N_\downarrow)/N$ and the binding energy is $\epsilon_b = \hbar^2 n^2 \gamma^2 / 4m$. The explicit relation between the polarization and the external field H is given further below in equation (16). In this strong coupling region, the system behaves like a mixture of bound pair composites and excess single particles. The form of the ground state energy (9) reveals the nature of weak pair-pair attractive interaction and pair-unpair attractive interaction. A schematic representation of this mixture is depicted in figure 1.

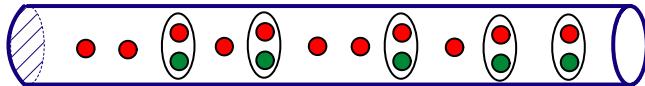


Figure 1. Schematic representation showing the mixture of bound pairs and excess fermions in the strongly attractive regime.

2.2. Thermodynamic Bethe ansatz (TBA)

The thermodynamic properties as well as quantum phase transitions in this model system can be analysed through the Thermodynamic Bethe ansatz (TBA). This method was originally proposed by Yang and Yang [24] for spinless bosons and received important contributions for fermions by Takahashi [25], among others [26]. The basic idea of the method is that in the thermodynamic limit we can consider a continuous distribution function for the BA roots. The equilibrium state can be obtained by the condition of minimizing the Gibbs free energy G ,

$$G = E - HM^z - \mu N - TS, \quad (10)$$

where μ is the chemical potential and S the entropy.

This procedure gives rise to a set of coupled nonlinear equations, the TBA equations, for the dressed energies ϵ^b for paired and ϵ^u for unpaired fermions (see [25]–[27] for details)

$$\begin{aligned} \epsilon^b(k) &= 2(k^2 - \mu - \frac{1}{4}c^2) + Ta_2 * \ln(1 + e^{-\epsilon^b(k)/T}) + Ta_1 * \ln(1 + e^{-\epsilon^u(k)/T}), \\ \epsilon^u(k) &= k^2 - \mu - \frac{1}{2}H + Ta_1 * \ln(1 + e^{-\epsilon^b(k)/T}) - T \sum_{m=1}^{\infty} a_m * \ln(1 + \eta_n^{-1}(k)), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\ln \eta_n(\lambda) = \frac{nH}{T} + a_n * \ln(1 + e^{-\epsilon^u(\lambda)/T}) + \sum_{m=1}^{\infty} T_{nm} * \ln(1 + \eta_m^{-1}(\lambda))$$

where $*$ denotes the convolution integral $(f * g)(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda - \lambda')g(\lambda') d\lambda'$ and the function η_n is the ratio of string densities, coming from Takahashi's hypothesis that complex quasimomenta group together to form strings in the complex plane [26]. The functions

$$a_m(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \frac{m|c|}{(m c/2)^2 + \lambda^2} \quad (12)$$

and $T_{mn}(\lambda)$ can also be found in Takahashi's book [26].

In the limit when $T \rightarrow 0$ the TBA equations reduce to the dressed energy equations

$$\begin{aligned} \epsilon^b(\Lambda) &= 2\left(\Lambda^2 - \mu - \frac{c^2}{4}\right) - \int_{-B}^B a_2(\Lambda - \Lambda')\epsilon^b(\Lambda') d\Lambda' - \int_{-Q}^Q a_1(\Lambda - k)\epsilon^u(k) dk, \\ \epsilon^u(k) &= \left(k^2 - \mu - \frac{H}{2}\right) - \int_{-B}^B a_1(k - \Lambda)\epsilon^b(\Lambda) d\Lambda. \end{aligned} \quad (13)$$

The Gibbs free energy per unit length at zero temperature can be written in terms of the dressed energies as

$$G(\mu, H) = \frac{1}{\pi} \int_{-B}^B \epsilon^b(\Lambda) d\Lambda + \frac{1}{2\pi} \int_{-Q}^Q \epsilon^u(k) dk, \quad (14)$$

from which the density of fermions and the magnetization (or polarization P) follow via the relations

$$-\partial G(\mu, H)/\partial \mu = n, \quad -\partial G(\mu, H)/\partial H = m_z = nP/2. \quad (15)$$

In general, the dressed energy equations provide a clear picture of band fillings with respect to the field H and the chemical potential μ at arbitrary temperatures [28]. These equations can be analytically solved in some special limits, such as in the strongly attractive regime $|\gamma| \gg 1$ [27] discussed below. For comparison, we also present their numerical solution [29].

2.3. Phase diagram at zero temperature

The set of equations (13)–(15) were solved in [27, 29] for strongly attractive interaction using a lengthy iteration method. To leading order, the explicit form for the external field in terms of the density of fermions, the polarization and the interaction strength is given by

$$H = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left\{ \frac{\gamma^2}{2} + 2P^2 \pi^2 \left[1 + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} - \frac{4P}{3|\gamma|} \right] - \frac{\pi^2(1-P)^2}{8} \left[1 + \frac{4P}{|\gamma|} \right] \right\}. \quad (16)$$

This equation determines the full phase diagram of the model and the critical values of the external field

$$H_{c1} \approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(\frac{\gamma^2}{2} - \frac{\pi^2}{8} \right), \quad H_{c2} \approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left[\frac{\gamma^2}{2} + 2\pi^2 \left(1 - \frac{4}{3|\gamma|} \right) \right]. \quad (17)$$

These results for H_{c1} and H_{c2} are obtained from equation (16) by setting the polarization to $P = 0$ and $P = 1$, respectively. The critical fields can be physically interpreted as separating three distinct quantum phases: (i) for $H < H_{c1}$ bound pairs populate the ground state, (ii) for $H > H_{c2}$ a completely ferromagnetic phase occurs, and (iii) for the intermediate range $H_{c1} < H < H_{c2}$ paired and unpaired atoms coexist.

Figure 2 illustrates the phase diagram in the $n - H$ plane for the particular value $|c| = 10$. The dashed lines are plotted from equations (17). The coloured phases are obtained by numerically integrating the dressed energy equations (13). The analytical results coincide well with the numerical boundaries. Here it is also clear that subject to the value of the external field, the system exhibits three quantum phases: a BCS-like fully paired phase; an unpaired, fully polarized phase; and a mixed, partially polarized phase, composed of BCS-like pairs and unpaired (excess) fermions. The mixed phase can be considered as a 1D-analogue of the FFLO phase (see, e.g. [30]–[33]).

Calculations on the BA integrable model thus lead to a two-shell structure composed of the partially polarized FFLO-type phase in the centre of the trap surrounded by—depending on the strength of the external field—either fully paired or fully polarized wings [27, 34, 35]. This prediction was recently verified by the observation by Liao *et al* [15] of three distinct phases in experimental measurements of ultracold ${}^6\text{Li}$ atoms in an array of 1D tubes. A number of other authors have also investigated the BA integrable model (1) in the context of the Fermi gas (see, e.g., [36]–[39]).

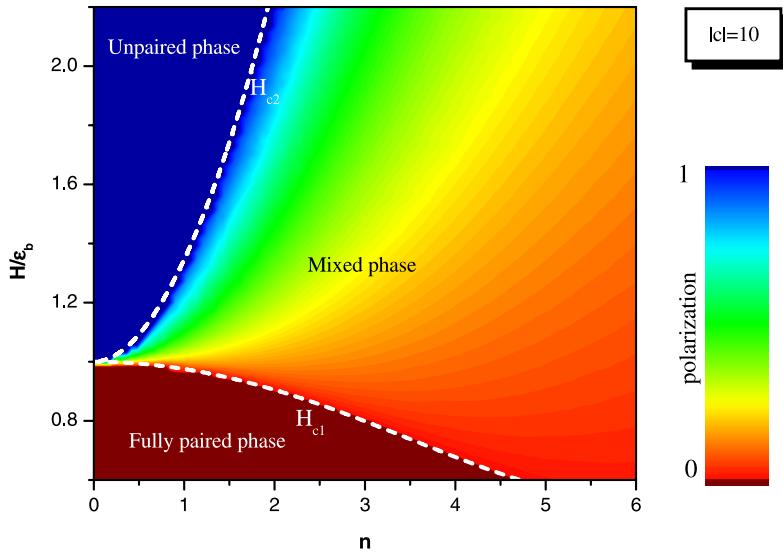


Figure 2. Phase diagram for strong coupling $|c| = 10$ in the n - H plane (from [29]). Good agreement is found between the analytical results (17) for the critical fields represented by the dashed lines and the numerical solution of the dressed energy equations (13), given by the coloured phases.

2.4. TBA for low temperature

In order to handle the TBA equations (11) at low temperature, we can employ an expansion in terms of the polylogarithm function, which has so far been applied to the 1D attractive Fermi gases of ultracold atoms up to order $1/c^2$ [39]–[41]. This approach is widely applicable to 1D many-body systems with quadratic or linear bare dispersions in both the attractive and repulsive regimes. It is also expected that the analytical polylogarithmic function approach will play a central role in unifying the properties of attractive Fermi gases of ultracold atoms with higher symmetries. For example, the TBA equations for the 1D Fermi gases with δ -function attractive interactions and internal spin degrees of freedom may be reformulated according to the charge bound states and spin strings characterizing spin fluctuations [40]. Thus for strong attraction, the spin fluctuations that couple to non-spin-neutral charge bound states are exponentially small and can be asymptotically calculated [40]. Thus the low energy physics is dominated by density fluctuations among the charge bound states. The full phase diagrams and thermodynamics of the 1D attractive Fermi gases can be analytically calculated via this polylogarithm function approach. For spin-1/2 attractive fermions, universal Tomonaga–Luttinger liquid behaviour was identified from the pressure given in terms of polylog functions [39]. Here we discuss some further results, on the universal nature of finite temperature corrections.

For $H \gg k_B T$, where k_B is the Boltzmann constant, we can ignore the exponentially small corrections from the spin bound states and collect the terms up to $1/\gamma^2$ in the TBA equations (11), resulting in the simple form

$$\epsilon^b(k) \approx 2k^2 - A^b(T, H), \quad \epsilon^u(k) \approx k^2 - A^u(T, H), \quad (18)$$

where

$$A^b(T, H) = 2 \left[\mu + \frac{1}{4} c^2 - \frac{1}{2|c|} (p^b(T, H) + 4p^u(T, H)) \right] + O\left(\frac{1}{c^3}\right), \quad (19)$$

$$\begin{aligned} A^u(T, H) &= \mu + T \ln \left(2 \cosh \left(\frac{H}{2T} \right) \right) - \frac{2}{|c|} p^b(T, H) \\ &\quad - \frac{J}{4} (1 - B^2) + \frac{3J^2}{32k_B T} (1 - B^4) + O\left(\frac{1}{c^3}\right). \end{aligned} \quad (20)$$

Here we have denoted $B = \tanh(H/2T)$ and $J = (2/|c|)p^u(T, H)$. In order to examine the low temperature Luttinger liquid signature, we can safely ignore the exponentially small contribution from the spin wave bound states in the function A^u . Thus integration by parts gives the effective pressures

$$\begin{aligned} p^b(T, H) &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi^2 \hbar^2 / 2m}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{1 + e^{(\epsilon - A^b(T, H))/k_B T}}, \\ p^u(T, H) &= \frac{1}{\sqrt{\pi^2 \hbar^2 / 2m}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{1 + e^{(\epsilon - A^u(T, H))/k_B T}}. \end{aligned} \quad (21)$$

The integrals in (21) can be calculated explicitly using Sommerfeld expansion at low temperatures. We assume that there exist two Fermi seas, i.e., a Fermi sea of bound pairs with a cut-off potential $A^b(T, H)/2$ and a Fermi sea of unpaired fermions with a cut-off potential $A^u(T, H)$. After some lengthy iteration with the relations (15) we obtain the free energy

$$\begin{aligned} F(T, H) &\approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n^3 P^3}{6m} \left[1 - \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^u} \right)^2 - \frac{\pi^4}{60} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^u} \right)^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} \left(1 + \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^u} \right)^2 + \frac{2\pi^4}{15} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^u} \right)^4 \right) \right] \\ &\quad + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^3 (1-P)^3}{2m} \left[1 - \frac{\pi^2}{16} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^b} \right)^2 - \frac{\pi^4}{960} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^b} \right)^4 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{(1-P)}{|\gamma|} + \frac{4P}{|\gamma|} \right) \left(1 + \frac{\pi^2}{16} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^b} \right)^2 + \frac{\pi^4}{120} \left(\frac{k_B T}{\mu_0^b} \right)^4 \right) \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} n P H - \frac{\hbar^2}{2m} n (1-P) \frac{c^2}{4}, \end{aligned} \quad (22)$$

where $\mu_0^u = \hbar^2 \pi^2 n^2 P^2 / 2m$ and $\mu_0^b = \hbar^2 \pi^2 n^2 (1-P)^2 / 32m$. We see clearly that the free energy reduces to the ground state energy (9) as $T \rightarrow 0$.

For the temperature $k_B T \ll E_F$, where E_F is the Fermi energy, the spin wave fluctuation is frozen out due to the large magnetic field. The leading low temperature correction to the free energy (22) is

$$F(T, H) = E_0(H) - \frac{\pi C k_B^2 T^2}{6\hbar} \left(\frac{1}{v_b} + \frac{1}{v_u} \right), \quad (23)$$

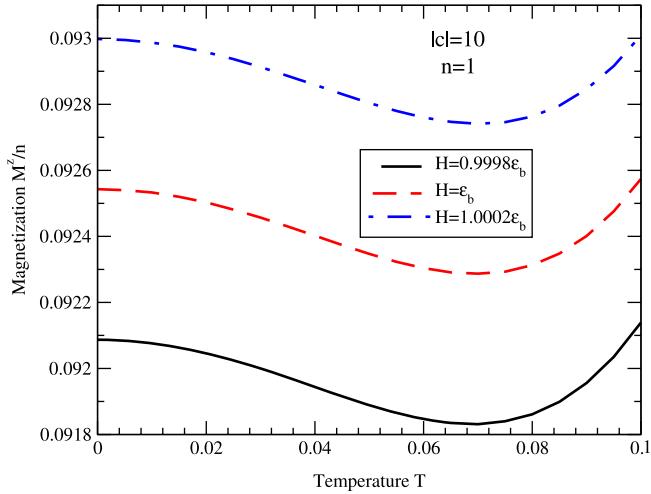


Figure 3. Magnetization m^z versus temperature at different external field values (in the units $2m = \hbar = 1$). The minimum of the magnetization is clearly observed for each field value.

which belongs to the universality class of the Gaussian model with central charge $C = 1$ [42]. In the above equation, the ground state energy $E_0(H)$ is as given in (9), subject to an additional term $-nPH/2$. The group velocities for bound pairs and unpaired fermions are

$$v_b \approx \frac{v_F(1-P)}{4} \left(1 + \frac{(1-P)}{|\gamma|} + \frac{4P}{|\gamma|} \right), \quad v_u \approx v_F P \left(1 + \frac{4(1-P)}{|\gamma|} \right), \quad (24)$$

respectively. Here the Fermi velocity is $v_F = \hbar\pi n/m$. The above result indicates that the low energy physics for 1D strongly attractive fermions in the gapless phase can be described by a two-component Tomonaga–Luttinger liquid model as long as the ferromagnetic spin–spin interaction is frozen out.

In order to recognize a Tomonaga–Luttinger liquid signature in the gapless phase in the low temperature limit, we examine the temperature dependent relations for the magnetization. In general [43], one should expect a magnetization minimum due to a crossover from a Tomonaga–Luttinger liquid with a linear dispersion to a state governed by the nonrelativistic dispersion $\epsilon \propto k^2$. This magnetization minimum does exist in the gapless phase in attractively interacting fermions. We plot the magnetization versus temperature from the free energy (22) in figure 3, where we observe a clear minimum of the magnetization for different magnetic fields. This comes about due to a crossover from the hardcore bosonic signature of the Tomonaga–Luttinger liquid to polarized free fermions. For further understanding this signature, we derive the magnetization from (23) where we consider the low temperature limit, i.e., $T \rightarrow 0$ (in natural units)

$$m^z = m_0^z - \frac{\pi T^2}{6} \left(\frac{1}{v_b^2} \frac{\partial v_b}{\partial H} + \frac{1}{v_u^2} \frac{\partial v_u}{\partial H} \right), \quad (25)$$

where $m_0^z = \partial E_0(H)/\partial H$. The finite temperature contribution to the magnetization at low temperatures depends on the signs from the term in the brackets of equation (25). This part indicates the existence of a minimum of the magnetization. In the gapless phase

two Fermi liquids are coupled through pair–unpaired fermion scattering. The linear field dependent magnetization is a consequence of the fact that the total number of fermions is fixed.

So far we have considered the simplest 1D exactly solvable model in the scenario of ultracold Fermi gases. Generalizations to three and more components can be performed and are discussed in the next sections.

3. Three-component attractive Fermi gas with polarization

3.1. The model

To describe a three-component Fermi gas, the same type of Hamiltonian (1), with a kinetic and a contact potential interacting term, can be considered. However, now the N fermions can occupy three possible hyperfine levels ($|1\rangle$, $|2\rangle$ and $|3\rangle$) and the Zeeman term is expressed in terms of two external fields. The Hamiltonian reads [20]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) + \sum_{i=1}^3 N^i \epsilon_Z^i(\mu_B^i, B). \quad (26)$$

The last term denotes the Zeeman energy, where N^i is the number of fermions in state $|i\rangle$ with Zeeman energy ϵ_Z^i determined by the magnetic moments μ_B^i and the magnetic field B . This term can also be written as $-H_1(N^1 - N^2) - H_2(N^2 - N^3) + N\bar{\epsilon}$, where the unequally spaced Zeeman splitting in three hyperfine levels can be specified by two independent parameters $H_1 = \bar{\epsilon} - \epsilon_Z^1(\mu_B^1, B)$ and $H_2 = \epsilon_Z^3(\mu_B^3, B) - \bar{\epsilon}$, with $\bar{\epsilon}$ the average Zeeman energy. We use the same notation and conventions as in the previous case.

The Hamiltonian (26) exhibits $SU(3)$ symmetry and was solved by Sutherland in the sixties by means of the nested BA [20]. The energy eigenspectrum is again given in terms of the quasimomenta $\{k_i\}$ of the fermions by (2), but now satisfying [20, 21]

$$\begin{aligned} \exp(i k_j L) &= \prod_{\ell=1}^{M_1} \frac{k_j - \Lambda_\ell + i c/2}{k_j - \Lambda_\ell - i c/2}, \\ \prod_{\ell=1}^N \frac{\Lambda_\alpha - k_\ell + i c/2}{\Lambda_\alpha - k_\ell - i c/2} &= - \prod_{\beta=1}^{M_1} \frac{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + i c}{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - i c} \prod_{\ell=1}^{M_2} \frac{\Lambda_\alpha - \lambda_\ell - i c/2}{\Lambda_\alpha - \lambda_\ell + i c/2}, \\ \prod_{\ell=1}^{M_1} \frac{\lambda_\mu - \Lambda_\ell + i c/2}{\lambda_\mu - \Lambda_\ell - i c/2} &= - \prod_{\ell=1}^{M_2} \frac{\lambda_\mu - \lambda_\ell + i c}{\lambda_\mu - \lambda_\ell - i c} \end{aligned} \quad (27)$$

for $j = 1, \dots, N$, $\alpha = 1, \dots, M_1$, $\mu = 1, \dots, M_2$, with quantum numbers $M_1 = N_2 + 2N_3$ and $M_2 = N_3$. The parameters $\{\Lambda_\alpha, \lambda_m\}$ are the rapidities for the internal hyperfine spin degrees of freedom. For the irreducible representation $[3^{N_3} 2^{N_2} 1^{N_1}]$, a three-column Young tableau encodes the numbers of unpaired fermions ($N_1 = N^1 - N^2$), bound pairs ($N_2 = N^2 - N^3$) and trions ($N_3 = N^3$).

The ground state energy per unit length

$$\begin{aligned} \frac{E}{L} \approx & \frac{\pi^2 n_1^3}{3} \left(1 + \frac{8n_2 + 4n_3}{|c|} \right) - \frac{n_2 c^2}{2} + \frac{\pi^2 n_2^3}{6} \left(1 + \frac{12n_1 + 6n_2 + 16n_3}{3|c|} \right) - 2n_3 c^2 \\ & + \frac{\pi^2 n_3^3}{9} \left(1 + \frac{12n_1 + 32n_2 + 18n_3}{9|c|} \right) \end{aligned} \quad (28)$$

was obtained in [44] by solving the BA equations (27). Here $n_a = N_a/L$, $a = 1, 2, 3$ are the densities of unpaired fermions, bound pairs and trions, respectively, with the constraint $n = n_1 + 2n_2 + 3n_3$.

The phase diagram of the system for the strongly attractive interaction regime can also be obtained using the dressed energy formalism. For this model, a richer scenario, with more quantum phases, is expected. Indeed, as we shall discuss further below, a trion phase, which consists of three-body bound states, along with a number of mixed phases, is found [44].

3.2. Dressed energy formalism and phase diagrams at zero temperature

In the thermodynamic limit the TBA equations are found by minimizing the Gibbs free energy $G = E + n_1 H_1 + n_2 H_2 - \mu N - TS$. In the limit $T \rightarrow 0$, the dressed energy equations obtained [26, 44, 45] are

$$\begin{aligned} \epsilon^{(3)}(\lambda) &= 3\lambda^2 - 2c^2 - 3\mu - a_2 * \epsilon^{(1)}(\lambda) - [a_1 + a_3] * \epsilon^{(2)}(\lambda) - [a_2 + a_4] * \epsilon^{(3)}(\lambda) \\ \epsilon^{(2)}(\Lambda) &= 2\Lambda^2 - 2\mu - \frac{c^2}{2} - H_2 - a_1 * \epsilon^{(1)}(\Lambda) - a_2 * \epsilon^2(\Lambda) - [a_1 + a_3] * \epsilon^{(3)}(\Lambda) \\ \epsilon^{(1)}(k) &= k^2 - \mu - H_1 - a_1 * \epsilon^{(2)}(k) - a_2 * \epsilon^{(3)}(k). \end{aligned} \quad (29)$$

Here $\epsilon^{(a)}$ are the dressed energies and $a_j * \epsilon^{(a)}(x) = \int_{-Q_a}^{+Q_a} a_j(x-y) \epsilon^{(a)}(y) dy$. The negative part of the dressed energies $\epsilon^{(a)}(x)$ for $x \leq |Q_a|$ correspond to the occupied states in the Fermi seas of trions, bound pairs and unpaired fermions, with the positive part of $\epsilon^{(a)}$ corresponding to the unoccupied states. The integration boundaries Q_a characterize the ‘Fermi surfaces’ at $\epsilon^{(a)}(\pm Q_a) = 0$. The zero-temperature Gibbs free energy per unit length can be written in terms of the dressed energies as

$$G = \sum_{a=1}^3 \frac{a}{2\pi} \int_{-Q_a}^{+Q_a} \epsilon^{(a)}(x) dx, \quad (30)$$

from which physical quantities are obtained through the thermodynamic relations

$$-\frac{\partial G}{\partial \mu} = n, \quad -\frac{\partial G}{\partial H_1} = n_1, \quad -\frac{\partial G}{\partial H_2} = n_2. \quad (31)$$

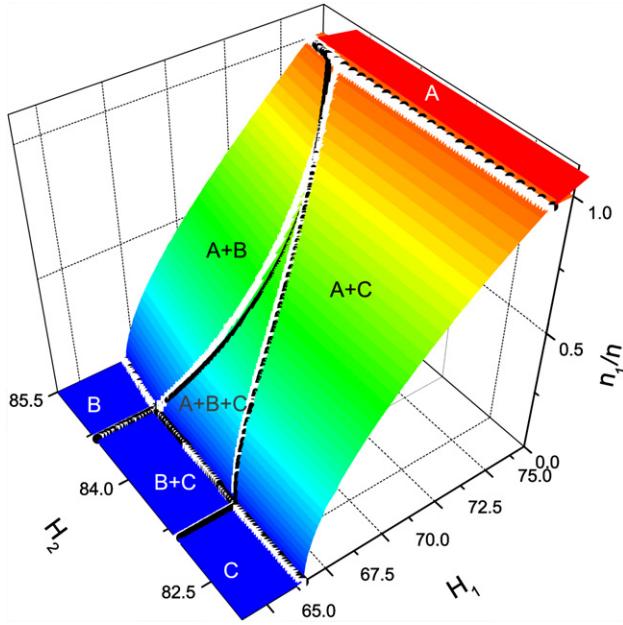


Figure 4. Phase diagram showing the polarization n_1/n versus the fields H_1 and H_2 for strong interaction with $|c| = 10$ and $n = 1$. There are three pure phases: an unpaired phase A, a pairing phase B and a trion phase C and four different mixtures of these states. The black lines are plotted from the analytical results (32) while the white dots correspond to the numerical solutions of the dressed energy equations (29). The numerical phase transition boundaries coincide well with the analytical results.

The dressed energy equations (29) can be analytically solved just in some special limits, such as the strongly attractive coupling regime. This was discussed in [44], where the analytical expressions

$$\begin{aligned}
 H_1 &= \pi^2 n_1^2 \left(1 - \frac{4n_1}{9|c|} + \frac{8n_2}{|c|} + \frac{4n_3}{|c|} \right) + \frac{10\pi^2 n_2^3}{27|c|} \\
 &\quad - \frac{\pi^2 n_3^2}{9} \left(1 + \frac{4n_1}{3|c|} + \frac{32n_2}{9|c|} + \frac{4n_3}{3|c|} \right) + \frac{2c^2}{3}, \\
 H_2 &= \frac{\pi^2 n_2^2}{2} \left(1 + \frac{4n_1}{|c|} + \frac{40n_2}{27|c|} + \frac{16n_3}{3|c|} \right) + \frac{16\pi^2 n_1^3}{9|c|} \\
 &\quad - \frac{2\pi^2 n_3^2}{9} \left(1 + \frac{4n_1}{3|c|} + \frac{32n_2}{9|c|} + \frac{8n_3}{9|c|} \right) + \frac{5c^2}{6},
 \end{aligned} \tag{32}$$

for the energy transfer relations were found (in units of $\hbar^2/2m$). These equations determine the full phase diagram and the critical field values activated by the fields H_1 and H_2 .

Here we numerically solve these equations to confirm the analytical expressions for the physical quantities and the resulting phase diagrams of the model. Basically, for each value of the integration boundaries Q_a , $a = 1, 2, 3$, the equations (29) are converted into a finite size single matrix equation that can be solved using the condition $\epsilon^{(a)}(\pm Q_a) = 0$

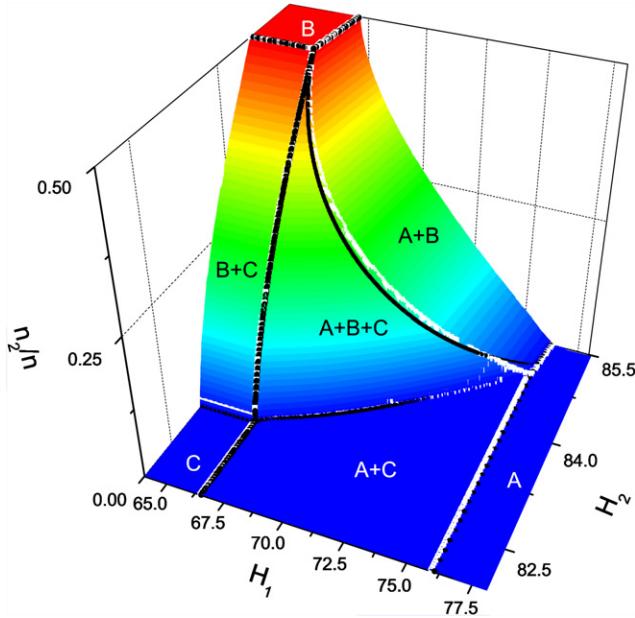


Figure 5. Phase diagram showing the polarization n_2/n versus the fields H_1 and H_2 for strong interaction with $|c| = 10$ and $n = 1$. The black lines plotted from the analytical results (32) are in good agreement with the numerical solutions (white dots) of the dressed energy equations (29).

to get the dressed energies, the fields and the chemical potential. Then the Gibbs free energy is obtained and from it the polarizations and the linear density are found. Each phase can be identified by properly separating the input into distinct sets containing different combinations of vanishing/non-vanishing integration boundaries. For example, in the pure unpaired phase we have $\{Q_2 = Q_3 = 0, Q_1 \neq 0\}$, in the mixed phase composed of unpaired fermions and bound pairs $\{Q_3 = 0, Q_1 \neq 0, Q_2 \neq 0\}$ and so forth. There are seven different combinations and consequently, seven different phases, which are computed and the results collected to generate the complete phase diagrams.

Figures 4 and 5 show the polarizations n_1/n and n_2/n in terms of the fields H_1 and H_2 . There are three pure phases: an unpaired phase A , a pairing phase B and a trion phase C and four different mixtures of these states. A good agreement is observed between the analytical predictions obtained from equations (32) represented by black lines and the numerical solutions obtained by integrating the dressed energy equations (29) represented by white dots.

The ground state energy versus the fields H_1 and H_2 can be determined from the ground state energy (28) with the densities n_1 and n_2 obtained from equation (32). Figure 6 shows the energy surface for all possible phases shown in figures 4 and 5. This figure demonstrates the interplay between different physical ground states. For certain values of H_1 and H_2 , a mixture of unpaired fermions, BCS-like pairs and trions ($A+B+C$) populates the ground state.

For low temperature, a similar investigation employing the polylog function can also be performed [41].

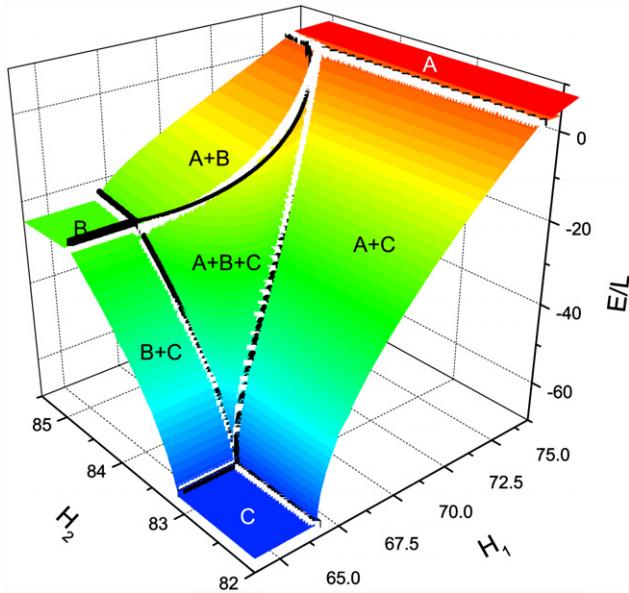


Figure 6. Ground state energy versus Zeeman splitting for strong interaction $|c| = 10$ and $n = 1$. Good agreement is found between the analytical results (32) represented by black lines and the numerical solutions obtained by integrating the dressed energy equations (29), represented by white dots.

4. Conclusion and perspectives

We have examined the two- and three-component attractive 1D Fermi gases with population imbalance via their TBA solution. For the two-component model, we reviewed the strong coupling expansion and the identification of quantum phases. New results for the universal finite temperature corrections were also discussed. For the three-component model, numerical solution of the dressed energy equations confirm that the analytical expressions for the critical fields and the resulting phase diagrams at zero temperature are highly accurate in the strong coupling regime. Both models exhibit rich phase diagrams with a variety of quantum phases. Just as the three distinct phases of the two-component model—the BCS-like paired, fully polarized and partially polarized phases—have been detected by Liao *et al* [15] in a recent experiment with ultracold ${}^6\text{Li}$ atoms in an array of 1D tubes, it is to be hoped that the more exotic phases of the three-component model—including the trion phase—will be detectable in future experiments.

From the experimental point of view [15], the array of 1D tubes is created within 2D optical lattices. In order to make the lowest transverse mode populated in each tube, the thermal energy $k_B T$ and the Fermi energy are required to be much smaller than the transverse confinement energy. In this sense, the system is well controllable and practicable only for the strongly attractive regime in the quasi-1D trapping. Precisely in this regime, the analytical results may provide direct application to fitting the experimental data, such as the density profiles and phase diagram [46].

Multi-component Fermi gases with more than three species can also be trapped and manipulated. For this type of Fermi gas, bound multi-body clusters are expected to appear above certain critical interaction strengths [47]. The thermodynamic properties and phase

diagrams of 1D attractive multi-component Fermi gases can also be investigated through the solvable models exhibiting $SU(N)$ symmetry [40]. Closed form expressions for the thermodynamics and equation of state of such models will provide further insight towards understanding the nature of many-body effects and different pairing states with higher spin symmetry. The trapping potentials can be accommodated into the equation of state within the local density approximation. It is clear that the Bethe ansatz will continue to prosper as an essential tool for their description.

Acknowledgments

A Foerster and C C N Kuhn are supported by CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico). The work of M T Batchelor and X-W Guan is partially supported by the Australian Research Council.

References

- [1] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E and Cornell E A, 1995 *Science* **269** 198
- [2] Bradley C C, Sackett C A, Tollett J J and Hulet R G, 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1687
- [3] Davis K B, Mewes M-O, Andrews M R, van Druten N J, Durfee D S, Kurn D M and Ketterle W, 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969
- [4] Regal C A, Ticknor C, Bohn J L and Jin D S, 2003 *Nature* **424** 47
- [5] Regal C A, Greiner M and Jin D S, 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 040403
- [6] Zwierlein M W, Abo-Shaeer J R, Schirotzek A, Schunck C H and Ketterle W, 2005 *Nature* **435** 1047
- [7] Fulde P and Ferrell R A, 1964 *Phys. Rev.* **135** A550
Larkin A I and Ovchinnikov Yu N, 1965 *Sov. Phys. JETP* **20** 762
- [8] Liu W V and Wilczek F, 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 047002
- [9] Zwierlein M W, Schirotzek A, Schunck C H and Ketterle W, 2006 *Science* **311** 492
- [10] Partridge G B, Li W, Liao Y A and Hulet R G, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 190407
- [11] Kinoshita T, Wenger T and Weiss D S, 2004 *Science* **305** 1125
- [12] Kinoshita T, Wenger T and Weiss D S, 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 190406
- [13] Moritz H, Stoferle T, Günter K, Köhl M and Esslinger T, 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 210401
- [14] Haller E, Gustavsson M, Mark M J, Danzl J G, Hart R, Pupillo G and Nagerl H C, 2009 *Science* **325** 1224
- [15] Liao Y, Rittner A, Paprotta T, Li W, Patridge G, Hulet R, Baur S and Mueller E, 2010 *Nature* **467** 567
- [16] Lieb E H and Liniger W, 1963 *Phys. Rev.* **130** 1605
- [17] Yang C N, 1967 *Phys. Rev. Lett.* **19** 1312
- [18] Gaudin M, 1967 *Phys. Lett. A* **24** 55
- [19] Batchelor M T, 2007 *Phys. Today* **60** 36
- [20] Sutherland B, 1968 *Phys. Rev. Lett.* **20** 98
- [21] Takahashi M, 1970 *Prog. Theor. Phys.* **44** 899
- [22] Batchelor M T, Bortz M, Guan X-W and Oelkers N, 2006 *J. Phys.: Conf. Ser.* **42** 5
- [23] Iida T and Wadati M, 2005 *J. Phys. Soc. Japan* **74** 1724
- [24] Yang C N and Yang C P, 1969 *J. Math. Phys.* **10** 1115
- [25] Takahashi M, 1971 *Prog. Theor. Phys.* **46** 1388
- [26] Takahashi M, 1999 *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [27] Guan X-W, Batchelor M T, Lee C and Bortz M, 2007 *Phys. Rev. B* **76** 085120
- [28] Batchelor M T, Guan X-W, Oelkers N and Tsuboi Z, 2007 *Adv. Phys.* **56** 465
- [29] He J S, Foerster A, Guan X-W and Batchelor M T, 2009 *New J. Phys.* **11** 073009
- [30] Parish M M, Baur S K, Mueller E J and Huse D A, 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 250403
- [31] Zhao E and Liu W V, 2008 *Phys. Rev. A* **78** 063605
- [32] Rizzi M, Polini M, Cazalilla M A, Bakhtiari M R, Tosi M P and Fazio R, 2008 *Phys. Rev. B* **77** 245105
- [33] Batrouni G G, Huntley M H, Rousseau V G and Scalettar R T, 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 116405
- [34] Orso G, 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 070402
- [35] Hu H, Liu X J and Drummond P, 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 070403
- [36] Iida T and Wadati M, 2007 *J. Stat. Mech.* **P06011**
- [37] Iida T and Wadati M, 2008 *J. Phys. Soc. Japan* **77** 024006

Exactly solvable models and ultracold Fermi gases

- [38] Kakashvili P and Bolech C J, 2009 *Phys. Rev. A* **79** 041603
- [39] Zhao E, Guan X-W, Liu W V, Batchelor M T and Oshikawa M, 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 140404
- [40] Guan X-W, Lee J Y, Batchelor M T, Yin X-G and Chen S, 2010 *Phys. Rev. A* **82** 021606
- [41] He P, Yin X, Guan X-W, Batchelor M T and Wang Y, 2010 arXiv:1009.2283
- [42] Affleck I, 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 746
- [43] Maeda Y, Hotta C and Oshikawa M, 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 057205
- [44] Guan X-W, Batchelor M T, Lee C and Zhou H-Q, 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 200401
- [45] Schlottmann P, 1997 *Int. J. Mod. Phys. B* **11** 355
- [46] Yin X-G, Guan X-W, Chen S and Batchelor M T, in preparation
- [47] Luu T and Schwenk A, 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 1973

Universality class of quantum criticality for strongly repulsive spin-1 bosons with antiferromagnetic spin-exchange interaction

C. C. N. Kuhn,^{1,2} X. W. Guan,^{2,*} A. Foerster,¹ and M. T. Batchelor^{2,3}

¹*Instituto de Fisica da UFRGS, Av. Bento Goncalves 9500, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brazil*

²*Department of Theoretical Physics, Research School of Physics and Engineering, Australian National University, Canberra, Australian Capital Territory 0200, Australia*

³*Mathematical Sciences Institute, Australian National University, Canberra, Australian Capital Territory 0200, Australia*

(Received 31 January 2012; published 9 April 2012)

Using the thermodynamic Bethe ansatz equations we study the quantum phase diagram, thermodynamics, and criticality of one-dimensional (1D) spin-1 bosons with strongly repulsive density-density and antiferromagnetic spin-exchange interactions. We analytically derive a high-precision equation of state from which the Tomonaga-Luttinger-liquid physics and quantum critical behavior of the system are computed. We obtain explicit forms for the scaling functions near the critical points yielding the dynamical exponent $z = 2$ and correlation length exponent $\nu = 1/2$ for the quantum phase transitions driven by either the chemical potential or the magnetic field. Consequently, we further demonstrate that quantum criticality of the system can be mapped out from the finite temperature density and magnetization profiles of the 1D trapped gas. Our results provide the physical origin of quantum criticality in a 1D many-body system beyond the Tomonaga-Luttinger-liquid description.

DOI: [10.1103/PhysRevA.85.043606](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.85.043606)

PACS number(s): 03.75.Ss, 03.75.Hh, 02.30.Ik, 34.10.+x

I. INTRODUCTION

The study of spinor Bose gases is an active area of research in the field of cold atoms [1,2]. In an optical trap, the laser-atom interaction is determined by the induced electric dipole moment, thus the atoms are confined independently of their spin orientations. This has provided exciting opportunities of simulating quantum dynamics of spinor Bose-Einstein condensates in which the “vector” property of spinor atoms can be preserved. Several experimental groups have successfully demonstrated spinor BECs of ²³Na [3,4] and ⁸⁷Rb [5–7] atoms in optical traps. In particular, the exquisite tunability with ultracold atoms confined to low dimensions has provided unprecedented opportunities for testing the theory of one-dimensional (1D) exactly solvable many-body systems [8–17]. These experimental developments have stimulated an extensive study of related exactly solvable models with δ -function interactions, see recent reviews [18,19].

Quantum spinor gases with multispin states exhibit richer quantum effects than their single-component counterparts. Spinor Bose gases with spin-independent short-range interactions have a ferromagnetic ground state, i.e., the ground state is always fully polarized [20,21]. In contrast to the two-component Fermi gases [22], the two-component spinor Bose gas with spin-independent *s*-wave scattering [23–25] has a ferromagnetic ground state as long as the interaction is fully spin independent. However, 1D spinor Bose gases with short-range density-density and spin-exchange interactions [26,27] can display a different ground state, i.e., either a ferromagnetic or an antiferromagnetic ground state solely depending on the spin-exchange interaction. In this context, the spin-1 spinor Bose gas with a short-range δ -function interaction and antiferromagnetic spin-spin interaction is particularly interesting due to the existence of various phases of quantum liquids associated with the Bethe ansatz (BA)

solutions [26,28–30]. At zero temperature, this model exhibits three phases in the chemical potential–magnetic field plane. These are (i) a spin-singlet phase of pairs of bosons with hyperfine states $|F = 1, m_F = \pm 1\rangle$ or two $|F = 1, m_F = 0\rangle$ bosons, (ii) a ferromagnetic phase of fully polarized atoms in the hyperfine state $|F = 1, m_F = 1\rangle$, and (iii) a mixed phase of spin-singlet pairs and unpaired single atoms, see Fig. 1.

Spinor Bose gases exhibit various phases of strongly correlated quantum liquids and are thus particularly valuable to investigating quantum magnetism and criticality. Near a quantum critical point, the many-body system is expected to show universal scaling behavior in the thermodynamic quantities due to the collective nature of many-body effects. Thus a universal and scale-invariant description of the system is expected through the power-law scaling of thermodynamic properties [31,32]. Most recently, quantum criticality and universal scaling behavior have been experimentally investigated in low-dimensional cold atomic matter [33,34]. These advances build on theoretical schemes for mapping out quantum criticality in cold-atom systems [35–37]. In this framework, exactly solvable models of cold atoms, exhibiting quantum phase transitions, provide a rigorous way to treat quantum criticality in archetypical quantum many-body systems, such as the Gaudin-Yang Fermi gas [38], the Lieb-Liniger Bose gas [39], and a mixture of bosons and fermions [40].

Despite much work on the 1D spin-1 bosons with strongly repulsive density-density and antiferromagnetic spin-exchange interactions [26,28,29], there has been no study of the quantum criticality of the model by using the exact solution. Contrary to the impression one might have, exact solvability does not guarantee that physical quantities of interest can be actually calculated by the BA solutions. The thermodynamic Bethe ansatz (TBA) equations for this model [29] involve an infinite number of coupled nonlinear integral equations that impose a number of challenges to accessing the physics of the model.

In the present paper, building on the method proposed in the study of quantum criticality of the Gaudin-Yang Fermi

*xwe105@physics.anu.edu.au

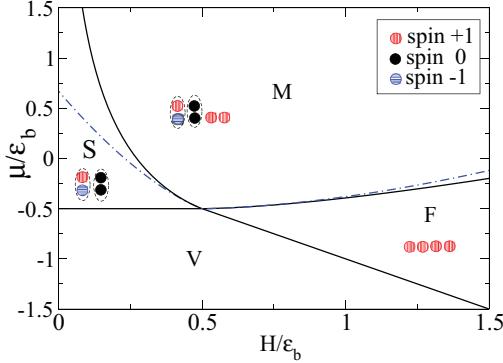


FIG. 1. (Color online) Phase diagram in the μ - H plane showing the spin-singlet phase S of paired bosons, ferromagnetic phase F of spin-aligned bosons, and a mixed phase M of pairs and unpaired bosons. V stands for the vacuum. The S - M and F - M boundaries are determined by the critical fields in Eqs. (8) and (10), respectively. The V - S and V - F boundaries are given in Eq. (6). The dashed-dotted lines are the extrapolation of the phase boundaries of Eqs. (11) and (12) in the strong coupling regime.

gas [38] and the Lieb-Liniger Bose gas [39], we analytically study the quantum phase diagram, universal thermodynamics, and criticality of spin-1 bosons with strongly repulsive density-density and antiferromagnetic spin-exchange interactions. We derive a high-precision equation of state of the system in experimental accessible conditions, i.e., in the strong coupling regime and low temperatures. We also analytically derive the Tomonaga-Luttinger-liquid (TLL) thermodynamics, quantum critical exponents, and universal scaling functions near the critical points associated with quantum phase transitions driven by the chemical potential and magnetic field. These scaling forms for the thermodynamic properties across the phase boundaries illustrate the physical origin of quantum criticality in this system, where the singular part of the thermodynamic properties involves a sudden change of density of state for either pairs or unpaired single atoms.

The paper is organized as follows. In Sec. II, we present the model and its corresponding TBA equations. In Sec. III, we analytically determine the phase diagram of the model at zero temperature. In Sec. IV, we derive the equation of state and universal TLL thermodynamics in the physical regime, i.e., for strong coupling and low temperatures. In Sec. V, we investigate quantum critical behavior driven by the chemical potential and magnetic field. The scaling functions near the critical points are obtained analytically. Section VI is the conclusion.

II. MODEL

We consider N particles of mass m confined in 1D to a length L with δ -interacting type density-density and spin-exchange interactions between two atoms. The Hamiltonian is given by [1,26]

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i < j} [c_0 + c_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] \delta(x_i - x_j) + E_z, \quad (1)$$

where \mathbf{S}_i is the spin-1 operator with a z component ($s = 1, 0, -1$). The interaction parameters are $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3$ and $c_2 = (g_2 - g_0)/3$, where $g_S = 4\pi\hbar^2 a_S/m$. Here m is the particle mass and a_S represents the s -wave scattering length in the total spin $S = 0, 2$ channels. $E_z = -HS^z$ stands for the Zeeman energy, where H is the external field and S^z the total spin in the z component. In the above equation, we have set $\hbar = 2m = 1$.

Using the BA hypothesis, Cao *et al.* [26] solved the model (1) with the antiferromagnetic spin-exchange interaction for $c = c_0 = c_2 > 0$. The energy eigenspectrum is given in terms of the quasimomenta $\{k_j\}$ of the particles through $E = \sum_{j=1}^N k_j^2$, obeying the following set of coupled BA equations [26]

$$\begin{aligned} \exp(ik_j L) &= \prod_{\ell=1}^N \frac{k_j - k_\ell + 4c'i}{k_j - k_\ell - 4c'i} \prod_{\alpha=1}^M \frac{k_j - \Lambda_\alpha - 2c'i}{k_j - \Lambda_\alpha + 2c'i}, \\ \prod_{\ell=1}^N \frac{\Lambda_\alpha - k_\ell + 2c'i}{\Lambda_\alpha - k_\ell - 2c'i} &= - \prod_{\beta=1}^M \frac{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta + 2c'i}{\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta - 2c'i}. \end{aligned} \quad (2)$$

Here $c' = c/4$, $j = 1, \dots, N$, $\alpha = 1, \dots, M$, and $\{\Lambda_\alpha\}$ are the rapidities for the internal spin degrees of freedom. The quantum number M is a conserved quantity obeying the relation $M = N - S^z$. In this model, the antiferromagnetic interaction leads to an effective attraction in the spin-singlet channel so that the singlet bosonic pairs comprise a spin-singlet ground state. In the thermodynamic limit $N, L \rightarrow \infty$, the sets of solutions $\{k_j\}$ and $\{\Lambda_\alpha\}$ of the BA equations (2) take a certain form, where the k_j 's and Λ_α 's can form complex pairs $k_j = \lambda_j \pm ic'$ and $\Lambda_j = \lambda_j \pm ic'$, where λ_j is real. Notice that each pair of k_j 's share the same real part as a corresponding pair of Λ_j 's. The bound states are associated with a pair of $|F = 1, m_F = \pm 1\rangle$ bosons or two $|F = 1, m_F = 0\rangle$ bosons. In addition to that, we also have real k_j 's and Λ strings of the form $\Lambda_\alpha^{n,j} = \Lambda_\alpha^n + i(n+1-2j)c'$, $j = 1, \dots, n$ describing spin-wave bound states.

At finite temperatures, the physical states become degenerate. The equilibrium state can be obtained by the condition of minimizing the Gibbs free energy $G = E + E_z - \mu N - TS$, where μ is the chemical potential and S the entropy, see Yang and Yang's grand canonical description [41] of the BA equations for the integrable Bose gas. The Zeeman energy $E_z = -HS_z$ and entropy S are given in terms of the densities of charge bound states and spin strings described above which are subject to the BA equations (2). Minimizing the Gibbs free energy leads to a set of coupled nonlinear integral equations, i.e., the TBA equations (see [29] for details)

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= k^2 - \mu - H - Ta_4 * \ln(1 + e^{-\frac{\varepsilon_1(k)}{T}}) \\ &\quad + T[a_1 - a_5] * \ln(1 + e^{-\frac{\varepsilon_2(k)}{T}}) \\ &\quad - T \sum_{n=1}^{\infty} [a_{n-1} + a_{n+1}] * \ln(1 + e^{-\frac{\phi_n(k)}{T}}), \\ \varepsilon_2(k) &= 2(k^2 - c'^2 - \mu) + T[a_1 - a_5] * \ln(1 + e^{-\frac{\varepsilon_1(k)}{T}}) \\ &\quad + T[a_2 - a_4 - a_6] * \ln(1 + e^{-\frac{\varepsilon_2(k)}{T}}), \end{aligned}$$

$$\phi_n(k) = n + T[a_{n-1} + a_{n+1}] * \ln(1 + e^{-\frac{\varepsilon_1(k)}{T}}) + T \sum_{n=1}^{\infty} T_{mn} * \ln(1 + e^{-\frac{\phi_n(k)}{T}}). \quad (3)$$

Here $n = 1, 2, \dots, \infty$ and the symbol $*$ denotes the convolution $(f * g(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x - x')g(x')dx'$, the functions $a_n = \frac{1}{\pi} \frac{n|c'|}{(nc')^2 + x^2}$ and T_{nm} are given in Ref. [29]. These TBA equations are expressed in terms of the dressed energies $\varepsilon_1(k)$, $\varepsilon_2(k)$, and $\phi_n(k)$ for unpaired states, paired states, and spin strings, respectively. They depend on the chemical potential μ , the external field H , and spin fluctuations which are ferromagnetically coupled to the unpaired Fermi sea.

The pressure per unit length of the system is given by $p = p_1 + p_2$ with

$$p_1 = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{-\varepsilon_1(k)/T}) dk, \quad (4)$$

$$p_2 = \frac{T}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{-\varepsilon_2(k)/T}) dk,$$

corresponding to the pressures for unpaired bosons and spin-singlet pairs, respectively.

III. PHASE DIAGRAM IN THE μ - H PLANE

The ground-state properties and phase diagram at zero temperature can be determined by the dressed energy equations

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= k^2 - \mu - H + a_4 * \varepsilon_1(k) + [a_5 - a_1] * \varepsilon_2(k), \\ \varepsilon_2(k) &= 2(k^2 - c^2 - \mu) + [a_5 - a_1] * \varepsilon_1(k) \\ &\quad + [a_6 + a_4 - a_2] * \varepsilon_2(k), \end{aligned} \quad (5)$$

which are obtained from the TBA equations (3) in the limit $T \rightarrow 0$. The negative part of the dressed energies $\varepsilon_a(k)$, $a = 1, 2$ for $k \leq Q_a$ corresponds to occupied states, while the positive part of ε_a corresponds to unoccupied states. The integration boundaries Q_a characterize the “Fermi surfaces” defined by $\varepsilon_a(Q_a) = 0$. In a canonical ensemble the bosonic pairs form a spin-singlet ground state when the external field is less than a lower critical field. In this phase, the low-energy physics can be characterized by a spin-charge separation theory of the $U(1)$ TLL describing the charge sector and a $O(3)$ nonlinear sigma model describing the spin sector [28]. However, if the external field exceeds an upper critical field, we have solely ferromagnetic single bosons with aligned spins along the external field. For an intermediate magnetic field, the spin-singlet pairs and spin-aligned bosons form a two-component TLL with magnetization [29]. However, in realistic experiments with cold atoms, 1D systems can be realized by tightly confining the atomic cloud in two (radial) dimensions and weakly confining it along the axial direction in a harmonic trap. Therefore, the phase diagram in the μ - H plane is essential for understanding quantum criticality of the trapped gas at finite temperatures.

We may determine the phase boundaries by analyzing the band fillings in the dressed energy equations (5). The V - F phase boundary is established by the condition $\varepsilon_1(k) \leq 0$ and $\varepsilon_2(k) > 0$. Then from Eq. (5) we have $\mu_{c1} = -H$. The V - S phase boundary is determined by $\varepsilon_1(k) > 0$ and $\varepsilon_2(k) \leq 0$,

which results in $\mu_{c2} = -\epsilon_b/2$, where $\epsilon_b = \hbar^2 c^2/(16m)$ is the binding energy of the bound pair. For convenience we shall use the dimensionless units in the study of quantum criticality of the system, i.e., $\tilde{\mu} \equiv \mu/\epsilon_b$ and $h = H/\epsilon_b$. Thus the critical fields for the phase boundaries V - F and V - S read

$$\tilde{\mu}_{c1} = -h, \quad \tilde{\mu}_{c2} = -\frac{1}{2}. \quad (6)$$

The F - M phase boundary is obtained by the requirement $\varepsilon_1(\pm Q_1) = 0$ and $\varepsilon_2(k) \leq 0$, yielding the set of equations

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_1(x) &= 8x^2 - \tilde{\mu}_{c3} - h + \frac{1}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x')}{1 + (x - x')^2} dx', \\ \tilde{Q}_1^2 &= \frac{\tilde{\mu}_{c3}}{8} + \frac{h}{8} - \frac{1}{8\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x')}{1 + (\tilde{Q}_1 - x')^2} dx', \end{aligned} \quad (7)$$

which give the critical field for the phase transition from a ferromagnetic phase of spin-aligned bosons into a mixed phase of the pairs and unpaired bosons,

$$\tilde{\mu}_{c3} = -\frac{1}{2} + \frac{2}{5\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x)}{1 + 16x^2/25} dx - \frac{2}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_1}^{\tilde{Q}_1} \frac{\tilde{\varepsilon}_1(x)}{1 + 16x^2} dx, \quad (8)$$

where $\tilde{Q}_1 = Q_1/c$ and $\tilde{\varepsilon}_1(x)$ is given by Eq. (7).

The S - M phase boundary is determined by the conditions $\varepsilon_1(k) \leq 0$ and $\varepsilon_2(\pm Q_2) = 0$, from which we obtain the set of equations,

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_2(x) &= 2 \left(8x^2 - \frac{1}{2} - \tilde{\mu}_{c4} \right) + \frac{1}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + (x - x')^2} dx' \\ &\quad + \frac{2}{3\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(x - x')^2/9} dx' \\ &\quad - \frac{2}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(x - x')^2} dx', \\ \tilde{Q}_2^2 &= \frac{1}{16} + \frac{\tilde{\mu}_{c4}}{8} - \frac{1}{24\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(\tilde{Q}_2 - x')^2/9} dx' \\ &\quad - \frac{1}{16\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + (\tilde{Q}_2 - x')^2} dx' \\ &\quad + \frac{1}{8\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x')}{1 + 4(\tilde{Q}_2 - x')^2} dx', \end{aligned} \quad (9)$$

which provide the critical fields for a phase transition from the spin-singlet phase of paired bosons into a mixed phase of pairs and unpaired bosons,

$$\tilde{\mu}_{c4} = -h + \frac{4}{5\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x)}{1 + 16x^2/25} dx - \frac{4}{\pi} \int_{-\tilde{Q}_2}^{\tilde{Q}_2} \frac{\tilde{\varepsilon}_2(x)}{1 + 16x^2} dx. \quad (10)$$

Here $\tilde{Q}_2 = Q_2/c$ and $\tilde{\varepsilon}_2(x)$ is given by Eq. (9).

In order to investigate quantum criticality of the system in the strong coupling regime, we need closed form expressions for the critical fields. By Taylor expansion of Eqs. (8) and (10), we obtain the critical field values

$$\tilde{\mu}_{c3} = -\frac{1}{2} + \frac{8\sqrt{2}}{15\pi} \left(h - \frac{1}{2} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{104}{75\pi^2} \left(h - \frac{1}{2} \right)^2, \quad (11)$$

$$\tilde{\mu}_{c4} = -h + \frac{32\sqrt{2}}{15\pi} \left(\frac{1}{2} - h \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{2912}{225\pi^2} \left(\frac{1}{2} - h \right)^2, \quad (12)$$

which are in good agreement with the numerical results obtained from Eqs. (8) and (10) in the strong coupling regime. These asymptotic results [Eqs.(11) and (12)] can also be obtained by converting the critical fields obtained in the H - n plane [29] into the μ - H plane, where the effective chemical potentials $\mu_1 = \mu + H$ and $\mu_2 = \mu + \epsilon_b/2$ for unpaired and paired bosons are presented explicitly in Ref. [29].

In the next section we will derive analytical expressions for the equation of state and universal TLL thermodynamics in the physical regime where $t = T/\epsilon_b \ll 1$, i.e., for the strong coupling and low-temperature regimes.

IV. EQUATION OF STATE AND TLL THERMODYNAMICS

The thermodynamics and the high precision of the equation of state of a system provide the key information that can be used to map out quantum critical phenomena and to make comparisons between theory and experiment. Recently, the equation of state of a two-component ultracold Fermi gas has been measured [42,43] using theoretical schemes [44]. Such experimental advances provide exciting opportunities to test universal TLL and quantum critical phenomena in low-dimensional many-body systems.

A. Equation of state

The lack of analytic solutions of the TBA equations limits the ability to make physical predictions of the model at finite temperatures. In fact, the thermodynamic properties of the model at finite temperature are notoriously difficult to extract due to the presence of the bosonic nature and the spin-spin exchange interaction. Building on the method presented in Ref. [38] and considering the physical region (strong coupling $|c| \gg 1$ and low temperatures), we find that spin fluctuations are strongly suppressed by a strong field, i.e., $H \gg T$. Therefore we can analytically extract the spin-wave bound-state contributions to the unpaired dressed energy, see the third equation in Eqs. (3). Moreover, we notice that the convolution terms converge rapidly once $\varepsilon_{1,2}(k) > 0$ in the TBA equations. Therefore, we are allowed to carry out a Taylor expansion with respect to c in the kernel functions a_n in the TBA equations at low temperatures. Then, integrating by parts, we may obtain the dressed energies in terms of polylogarithm functions up to order $1/|c|^3$,

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) \approx & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \mu - H - \frac{2|c|p_1}{c^2 + k^2} + \frac{4|c|p_2}{c^2 + 16k^2} \\ & - \frac{20|c|p_2}{25c^2 + 16k^2} - \frac{T^{\frac{5}{2}}}{2\sqrt{\pi}|c|^3(\frac{\hbar^2}{2m})^{\frac{3}{2}}} \text{Li}_{\frac{5}{2}}(-e^{\frac{A_1^0}{T}}) \\ & + \frac{1984T^{\frac{5}{2}}}{125\sqrt{2\pi}|c|^3(\frac{\hbar^2}{2m})^{\frac{3}{2}}} \text{Li}_{\frac{5}{2}}(-e^{\frac{A_2^0}{T}}) \\ & - \text{Te}^{-\frac{H}{T} - \frac{\tilde{K}}{4}} \left[\left(1 - \frac{2k^2}{c^2} \right) I_0 \left(\frac{\tilde{K}}{4} \right) + \frac{2k^2}{c^2} I_1 \left(\frac{\tilde{K}}{4} \right) \right], \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(k) \approx & \frac{2\hbar^2}{2m} k^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^2}{8} - 2\mu + \frac{8|c|p_1}{c^2 + 16k^2} \\ & - \frac{40|c|p_1}{25c^2 + 16k^2} + \frac{3968T^{\frac{5}{2}}}{125\sqrt{\pi}|c|^3(\frac{\hbar^2}{2m})^{\frac{3}{2}}} \text{Li}_{\frac{5}{2}}(-e^{\frac{A_1^0}{T}}) \\ & + \frac{2|c|p_2}{c^2 + 4k^2} - \frac{|c|p_2}{c^2 + k^2} - \frac{6|c|p_2}{9c^2 + 4k^2} \\ & + \frac{181T^{\frac{5}{2}}}{108\sqrt{2\pi}|c|^3(\frac{\hbar^2}{2m})^{\frac{3}{2}}} \text{Li}_{\frac{5}{2}}(-e^{\frac{A_2^0}{T}}). \end{aligned} \quad (14)$$

Here $\text{Li}_s(z) = \sum_{k=1}^{\infty} z^k / k^s$ is the polylogarithm function. The terms $\tilde{K} = 8p_1/(T|c|)$ and $I_n(z) = \sum_{\gamma=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{\gamma+2\gamma}}{\gamma!(n+\gamma)!}$ are obtained from the so-called “string” or spin-wave contributions.

Using the above dressed energies and integrating by parts, we may calculate the pressure (4) in a straightforward way, with the result

$$p_1 \approx -\frac{T^{\frac{3}{2}} f_{\frac{3}{2}}^1}{(\frac{4\pi\hbar^2}{2m})^{\frac{1}{2}}} \left[1 - \frac{p_1}{|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2} + \frac{3968p_2}{125|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2} \right], \quad (15)$$

$$p_2 \approx -\frac{T^{\frac{3}{2}} f_{\frac{3}{2}}^2}{(\frac{2\pi\hbar^2}{2m})^{\frac{1}{2}}} \left[1 + \frac{3968p_1}{125|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2} + \frac{181p_2}{108|c|^3} \frac{2m}{\hbar^2} \right], \quad (16)$$

where we have denoted $f_s^i = \text{Li}_s(-e^{\frac{A_i^0}{T}})$ with $i = 1, 2$ and

$$\begin{aligned} A_1 = & \mu + H + \frac{2p_1}{|c|} - \frac{16p_2}{5|c|} + \text{Te}^{-\frac{H}{T}} e^{-\frac{\tilde{K}}{4}} I_0 \left(\frac{\tilde{K}}{4} \right) \\ & + \frac{T^{\frac{5}{2}}}{|c|^3(\frac{\hbar^2}{2m})^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}} f_{\frac{5}{2}}^1 - \frac{1984}{125\sqrt{2\pi}} f_{\frac{5}{2}}^2 \right], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} A_2 = & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^2}{8} + 2\mu - \frac{32p_1}{5|c|} - \frac{p_2}{3|c|} \\ & - \frac{T^{\frac{5}{2}}}{|c|^3(\frac{\hbar^2}{2m})^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{3968}{125\sqrt{\pi}} f_{\frac{5}{2}}^1 + \frac{181}{108\sqrt{2\pi}} f_{\frac{5}{2}}^2 \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Thus an infinite number of TBA equations have been simplified to two coupled equations, making the thermodynamics of the model analytically accessible.

The above expressions for the pressures in Eqs. (15) and (16) provide the precise equation of state of the system from which universal TLL thermodynamics and scaling functions near critical points can be further derived analytically. We present a high-precision equation of state in the later discussions of the singularities of thermodynamic properties near the quantum critical point as the temperature tends to zero. To evaluate physical properties we substitute Eqs. (17) and (18) into Eqs. (15) and (16). This provides two coupled equations for p_1 and p_2 , which can be solved by iteration. We discuss the quantum criticality of the system using these pressures in the next section.

B. Universal TLL thermodynamics

In general, the free energy of a 1D many-body system at low temperatures can be naturally attributed to low-lying excitations near the Fermi points. From calculations of the finite temperature corrections to the free energy, one can extract

universal TLL thermodynamics. This low-energy physics can also be obtained from conformal field theory [45]. Here we further develop an efficient way to obtain the universal TLL thermodynamics in the mixed phase of the pairs and unpaired bosons from the TBA equations (3). For temperatures $T \ll 1$ and the strong coupling regime $|c| \gg 1$, the gapless phase is in the region $H \sim c^2 \gg T$. Therefore, we can ignore the spin-wave bound-state contributions in this phase. The first few terms coming from an asymptotic expansion in the TBA equations (3) are given in terms of $1/|c|$ corrections by

$$\varepsilon_1(k) \approx \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \mu - H - \frac{2p_1}{|c|} + \frac{16p_2}{5|c|}, \quad (19)$$

$$\varepsilon_2(k) \approx \frac{2\hbar^2}{2m} k^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^2}{8} - 2\mu + \frac{32p_1}{5|c|} + \frac{p_2}{3|c|}. \quad (20)$$

Higher order corrections can be calculated in a straightforward manner [see the analysis in Eqs. (15) and (16)]. However, they are not necessary in the present discussion. From Eq. (4) we obtain the pressures for spin-aligned single bosons and spin-singlet pairs

$$p_1 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{-1/2} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon_1^0} d\varepsilon_1^0}{1 + e^{(\varepsilon_1^0 - A_1^0)/T}}, \quad (21)$$

$$p_2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{-1/2} \frac{\sqrt{2}}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon_2^0} d\varepsilon_2^0}{1 + e^{(\varepsilon_2^0 - A_2^0)/T}}, \quad (22)$$

where

$$A_1^0 \approx \mu + H + \frac{2p_1}{|c|} - \frac{16p_2}{5|c|}, \quad (23)$$

$$A_2^0 \approx 2\mu + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^2}{8} - \frac{32p_1}{5|c|} - \frac{p_2}{3|c|}. \quad (24)$$

The integrals in Eqs. (21) and (22) can be calculated explicitly via the Sommerfeld expansion. We assume that there are two “Fermi seas,” i.e., a Fermi sea of bound pairs with an effective chemical potential A_2^0 and a Fermi sea of unpaired bosons with an effective chemical potential A_1^0 . From Eqs. (19)–(24) and the relations $n_1 = \frac{\partial p}{\partial H}$ and $n = n_1 + 2n_2 = \frac{\partial p}{\partial \mu}$, by a cumbersome iteration we can obtain closed forms for the pressures

$$p_1 = \frac{2\pi^2 n_1^3}{3} \left(1 - \frac{6n_1}{|c|} + \frac{96n_2}{5|c|} \right) + \frac{T^2}{6n_1} \left(1 + \frac{2n_1}{|c|} - \frac{32n_2}{5|c|} \right), \quad (25)$$

$$p_2 = \frac{\pi^2 n_2^3}{3} \left(1 + \frac{48n_1}{5|c|} + \frac{n_2}{|c|} \right) + \frac{T^2}{3n_2} \left(1 - \frac{16n_1}{5|c|} - \frac{n_2}{3|c|} \right). \quad (26)$$

The Helmholtz free energy per unit length is given by $f = \mu\mu - p$. After a lengthy iteration, we obtain a universal leading temperature correction to the free energy of the form

$$f = f_0 - \frac{\pi T^2}{6} \left(\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right), \quad (27)$$

with f_0 the ground state already obtained in Ref. [29]. Here

$$v_1 = 2\pi n_1 \left(1 + \frac{2(32n_2 - 10n_1)}{5|c|} \right) \quad (28)$$

and

$$v_2 = \pi n_2 \left(1 + \frac{2(48n_1 + 5n_2)}{15|c|} \right) \quad (29)$$

are the charge velocities for unpaired and paired bosons. The entropy per unit length is given by $s = -\frac{\partial f}{\partial T}$ where

$$s = \frac{\pi T}{3} \left(\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right). \quad (30)$$

We observe that in this gapless phase, spin-wave bound-state fluctuations are suppressed due to a strong external field. The suppression of spin fluctuations leads to a universality class of a two-component TLL in the mixed phase of pairs and unpaired bosons, which we denote by TLL_M . At low temperatures, the spin-singlet phase persists as a single component TLL (denoted by TLL_S) below a crossover temperature. The fully polarized single atoms can persist in a TLL phase (denoted by TLL_F) below another crossover temperature. However, the TLL is not appropriate for describing quantum criticality, since it does not include proper thermal fluctuations for the quantum critical regime. In general the TLL persists below the crossover temperature at which the relation of the linear temperature-dependent entropy (or specific heat) breaks down.

In Fig. 2 we present the entropy as a function of the temperature using these two different approaches: the polylogarithm function result [Eqs. (15)–(18)] and the Sommerfeld expansion (30). The crossover temperature t^* determines the boundaries between the TLL regime and the quantum critical regime; see the contour plots of entropy in the $t-\mu$ plane for two different values of the external field in Fig. 3. The crossover boundaries are established by the points at which the TLL entropy (30) breaks down, i.e., the entropy is no longer linear temperature dependent. At finite temperatures, the system exhibits the characteristic V-shaped behavior of quantum criticality.

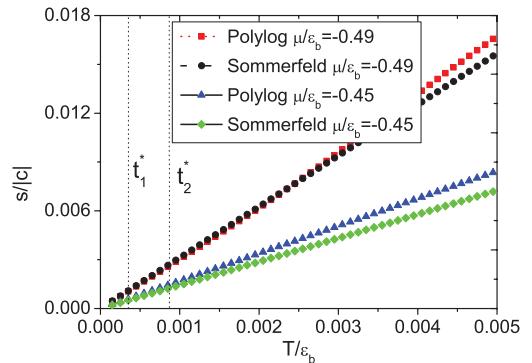


FIG. 2. (Color online) Entropy vs temperature from TLL entropy [Eq. (30)] and entropy calculated from the equation of state [Eqs. (15)–(18)] for $\mu = -0.49$ and $\mu = -0.45$. The universal linear temperature-dependent TLL entropy is broken down at the crossover temperatures t^* which separate the TLL phase and the quantum critical regime, see Fig. 3.

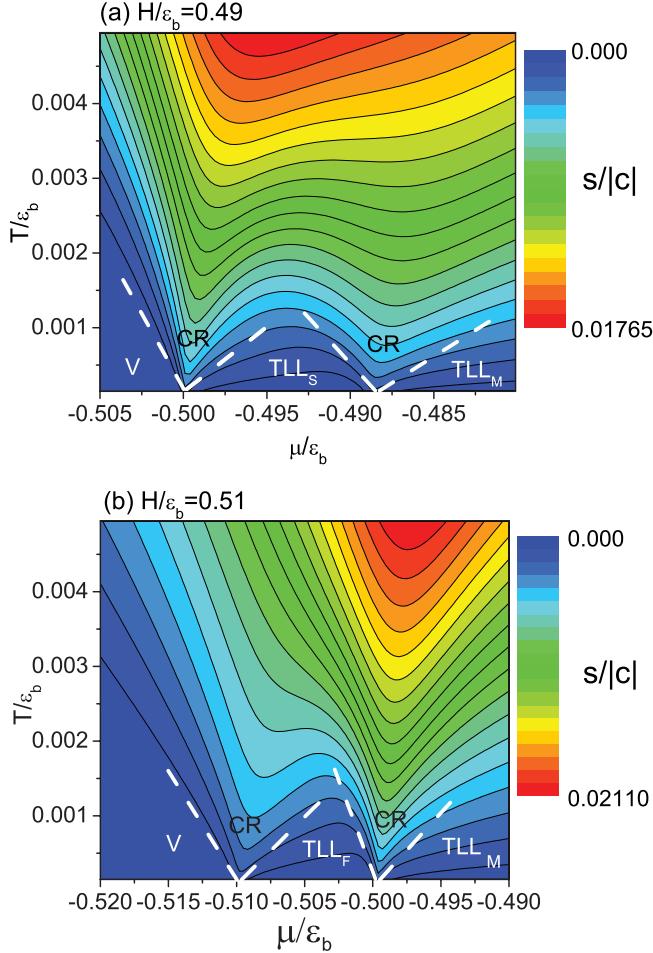


FIG. 3. (Color online) Contour plot of entropy S in the t - μ plane from the equations of state (15) and (16) for two values of the external magnetic field (a) $h = 0.49$ and (b) $h = 0.51$. The dashed lines are the crossover temperatures determined in Fig. 2. The intersection points between two dashed lines are the critical points in the μ - H plane, see Fig. 1. (a) The dashed line separates the TLL_S and TLL_M from the quantum critical regimes. (b) The dashed line separates the TLL_F and TLL_M from the quantum critical regimes. The left-most-dashed line in (a) and (b) separates the vacuum V from the TLL_S and TLL_F, respectively.

V. QUANTUM CRITICALITY

Quantum criticality describes the critical behavior near a quantum phase transition, i.e., it describes collective behavior of a large number of interacting particles at temperatures sufficiently low, such that quantum mechanics plays a crucial role in determining the distinguishing characteristics [31]. The quantum phase transition occurs at absolute zero temperature as the parameters of the system are varied. In the critical regime, a universal and scale-invariant description of the system is expected through the power-law scaling of thermodynamical properties. From the phase diagram of spin-1 bosons, see Fig. 1, we observe that the quantum phase transition occurs as the driving parameters $\tilde{\mu}$ and \tilde{h} cross the phase boundaries at zero temperature. Although there is no true finite temperature quantum phase transition in a 1D model, quantum criticality of a 1D many-body system is associated

with a universal crossover T^* that separates the excitation spectrum from relativistic to nonrelativistic dispersion [46,47]. In the present spin-1 model of bosons, we can interpret the spin-singlet phase as a Tonks-Girardeau (TG) gas of hard-core bosons with mass $2m$ and the spin-aligned ferromagnetic phase as a TG gas of single atoms with mass m . The mixed phase of two coupled TG gases is made of particles with mass m and $2m$.

A. Criticality driven by a chemical potential

Quantum critical behavior is uniquely characterized by the critical exponents depending only on the dimensionality and the symmetry of the excitation spectrum. This is reflected by singularities in the thermodynamic quantities, such as density n , compressibility $\kappa = \partial n / \partial \mu$, and magnetization M . They can be obtained from the derivatives of the pressure p with respect to μ and H . In order to identify universal scaling of the thermodynamic properties in the quantum critical regime, we will only take into account the first few terms in the equations of state (15) and (16). To this end, the total pressure is simplified as

$$\tilde{p} = -\frac{t^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{2} f_{\frac{3}{2}}^1 + \frac{1}{\sqrt{2}} f_{\frac{3}{2}}^2 \right), \quad (31)$$

where we have defined a dimensionless pressure $\tilde{p} = p/|c|\epsilon_b$ with the potentials

$$\tilde{A}_1 = \tilde{\mu} + h + 2\tilde{p}_1 - \frac{16\tilde{p}_2}{5}, \quad (32)$$

$$\tilde{A}_2 = 1 + 2\tilde{\mu} - \frac{32\tilde{p}_1}{5} - \frac{\tilde{p}_2}{3}, \quad (33)$$

and we have denoted the function $f_s^i = \text{Li}_s(-e^{\frac{A_i}{T}})$.

By iterating equations (31)–(33), we obtain the dimensionless density $\tilde{n} \equiv n/|c|$, where

$$\tilde{n} = -\frac{\sqrt{t}}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{2} f_{1/2}^1 \Delta_1 + \sqrt{2} f_{1/2}^2 \Delta_2 \right), \quad (34)$$

with

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= 1 - \frac{t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{t}{8\pi} (f_{1/2}^1)^2 + \frac{8t^{1/2}}{5\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \\ &\quad + \frac{2t}{15\pi} (f_{1/2}^2)^2 + \frac{12t}{25\pi\sqrt{2}} f_{1/2}^1 f_{1/2}^2, \\ \Delta_2 &= 1 + \frac{4t^{1/2}}{5\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 - \frac{t}{5\pi} (f_{1/2}^1)^2 + \frac{t^{1/2}}{12\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \\ &\quad + \frac{t}{144\pi} (f_{1/2}^2)^2 + \frac{101t}{75\pi\sqrt{2}} f_{1/2}^1 f_{1/2}^2. \end{aligned}$$

The total density (34) depends on the density of single atoms and the density of paired atoms. Furthermore, using the standard thermodynamic relations, we obtain the magnetization $\tilde{M} \equiv M/|c|$,

$$\begin{aligned} \tilde{M} &= -\frac{\sqrt{t}}{2\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{1}{2} f_{1/2}^1 \left[1 - \frac{t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{t}{8\pi} (f_{1/2}^1)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{32t}{25\pi\sqrt{2}} f_{1/2}^1 f_{1/2}^2 \right] + \sqrt{2} f_{1/2}^2 \left[\frac{4t^{1/2}}{5\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{t}{5\pi} (f_{1/2}^1)^2 + \frac{t}{15\pi\sqrt{2}} f_{1/2}^1 f_{1/2}^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (35)$$

and the susceptibility $\tilde{\chi} \equiv \chi \epsilon_b / |c|$,

$$\tilde{\chi} = -\frac{1}{2\sqrt{2\pi t}} \left\{ \frac{1}{2} f_{-1/2}^1 \left[1 - \frac{3t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{3t}{4\pi} (f_{1/2}^1)^2 + \frac{8t^{1/2}}{5\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 + \frac{2t}{15\pi} (f_{1/2}^1)^2 + \frac{36t}{25\pi\sqrt{2}} f_{1/2}^1 f_{1/2}^2 \right] \right. \\ \left. + f_{-1/2}^2 \frac{32t}{25\pi\sqrt{2}} (f_{1/2}^1)^2 \right\}. \quad (36)$$

By a lengthy calculation, the compressibility $\tilde{\kappa} \equiv \kappa \epsilon_b / |c|$ is given by

$$\tilde{\kappa} = -\frac{1}{2\sqrt{2\pi t}} \left\{ \frac{1}{2} f_{-1/2}^1 \left[(\Delta_1)^2 - \frac{t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 \left(1 - \frac{3t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{16t^{1/2}}{25\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \right) + \frac{2t^{1/2}}{5\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \left(1 - \frac{3t^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{197t^{1/2}}{60\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \right) \right] \right. \\ \left. + 2\sqrt{2} f_{-1/2}^2 \left[(\Delta_2)^2 + \frac{4t^{1/2}}{5\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 \left(1 + \frac{11t^{1/2}}{10\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{t^{1/2}}{4\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \right) + \frac{t^{1/2}}{12\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \left(1 + \frac{424t^{1/2}}{25\sqrt{2\pi}} f_{1/2}^1 + \frac{t^{1/2}}{4\sqrt{\pi}} f_{1/2}^2 \right) \right] \right\}. \quad (37)$$

These thermodynamic properties pave the way to extracting universal scaling functions in the vicinity of the critical points $\tilde{\mu}_c$. Following the procedure discussed in Ref. [38], quantum criticality of these thermodynamic quantities can be obtained in the limit $T \rightarrow 0$ and $T > |\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_c|$ across each of the phase boundaries, with the following results:

$$V - F : \begin{cases} \tilde{n} \simeq -\frac{\sqrt{t}}{4\sqrt{2\pi}} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c1}}{t}}), \\ \tilde{M} \simeq -\frac{\sqrt{t}}{4\sqrt{2\pi}} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c1}}{t}}), \end{cases} \quad (38)$$

$$V - S : \begin{cases} \tilde{n} \simeq -\frac{\sqrt{t}}{2\sqrt{\pi}} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c2})}{t}}), \\ \tilde{M} \simeq \frac{2t}{5\pi\sqrt{2}} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c2})}{t}}) \sim 0, \end{cases} \quad (39)$$

$$F - M : \begin{cases} \tilde{n} \simeq \tilde{n}_{03} - \lambda_1 \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c3})}{t}}), \\ \tilde{M} \simeq \tilde{M}_{03} + \lambda_2 \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c3})}{t}}), \end{cases} \quad (40)$$

$$S - M : \begin{cases} \tilde{n} \simeq \tilde{n}_{04} - \lambda_3 \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c4})}{t}}), \\ \tilde{M} \simeq -\lambda_4 \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}}(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c4})}{t}}). \end{cases} \quad (41)$$

Here $\tilde{M}_{03} = \tilde{n}_{03}$, \tilde{n}_{04} , λ_i (with $i = 1, \dots, 4$), a , and b are constants, independent of $\tilde{\mu}$ and t . They are given explicitly by

$$\begin{aligned} \tilde{n}_{03} &= \frac{\sqrt{a}}{2\pi\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\sqrt{a}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{a}{2\pi^2} \right), \\ \tilde{n}_{04} &= \frac{\sqrt{b}}{\pi} \left(1 - \frac{\sqrt{b}}{6\pi} + \frac{b}{36\pi^2} \right), \\ \lambda_1 &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{16\sqrt{a}}{5\pi\sqrt{2}} - \frac{8a}{25\pi^2} \right), \\ \lambda_2 &= \frac{4\sqrt{a}}{5\sqrt{2}\pi^{3/2}} \left(1 - \frac{3\sqrt{a}}{5\pi\sqrt{2}} \right), \\ \lambda_3 &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{32\sqrt{b}}{5\pi} + \frac{848b}{75\pi^2} \right), \\ \lambda_4 &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{16\sqrt{b}}{5\pi} + \frac{8b}{15\pi^2} \right), \end{aligned} \quad (42)$$

with

$$\begin{aligned} a &= \left(h - \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{13\sqrt{2}}{15\pi} \sqrt{h - \frac{1}{2}} \right), \\ b &= 2 \left(\frac{1}{2} - h \right) \left(1 + \frac{91\sqrt{2}}{45\pi} \sqrt{\frac{1}{2} - h} \right). \end{aligned}$$

In the above equations \tilde{n}_{03} and \tilde{n}_{04} are the background densities near the critical points μ_3 and μ_4 , respectively. At quantum criticality, the above densities can be cast into a universal scaling form (see [31,32,36]), e.g.,

$$n(\mu, T) = n_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{1}{vz}} \mathcal{G} \left(\frac{\mu - \mu_c}{T^{\frac{1}{vz}}} \right). \quad (43)$$

Here the dimensionality $d = 1$ and the scaling function $\mathcal{G}(x) = \lambda \text{Li}_{\frac{1}{2}}(x)$ with a constant λ . Consequently the dynamical critical exponent $z = 2$ and the correlation length exponent $v = 1/2$ can be read off from the universal scaling form (43). We observe that the spin-1 Bose gas belongs to the same universality class as spin-1/2 attractive fermions [38] due to the hard-core nature of the two coupled Tonks-Girardeau gases.

In Figs. 4 and 5 we plot the “scaled density” $T^{-(\frac{d}{z}+1-\frac{1}{vz})} [n(\mu, T) - n_0]$ versus $\tilde{\mu}$ for different values of the temperature near the critical points $\tilde{\mu}_{c1}, \tilde{\mu}_{c2}, \tilde{\mu}_{c3}$, and $\tilde{\mu}_{c4}$. We observe that after an appropriate subtraction of the background density all curves at different temperatures intersect at the critical points, which is the hallmark of criticality. In the regime of low polarization, i.e., $P < P_c$, the true phase transitions from the vacuum into the spin-singlet paired phase and from the pure paired phase into the mixture of spin-singlet pairs and spin-aligned bosons occur as the chemical potential passes the lower critical point $\tilde{\mu}_{c2}$ [Eq. (6)] and the upper critical point $\tilde{\mu}_{c4}$ [Eq. (12)], respectively, see Fig. 4.

For large polarization, i.e., $P > P_c$, the phase transitions from vacuum into the ferromagnetic spin-aligned boson phase and from the spin-aligned boson phase into the mixture of spin-singlet pairs and spin-aligned bosons occur as the chemical potential varies across the lower critical point

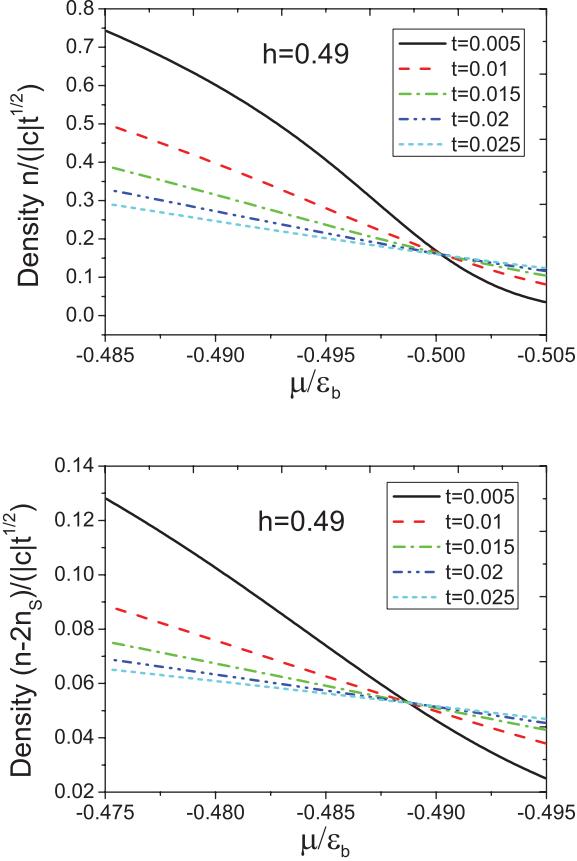


FIG. 4. (Color online) Scaled density vs chemical potential for $h = 0.49$ at different temperatures $T/\epsilon_b = 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$, and 0.025 . The density curves at different temperatures intersect at the critical points. This feature can be used to map out the phase boundary $V-S$ at $\tilde{\mu}_{c2} = -0.5$ [Eq. (6)] in upper panel and the phase boundary $S-M$ at $\tilde{\mu}_{c4} \approx -0.489$ [Eq. (12)] in the lower panel.

$\tilde{\mu}_{c1}$ [Eq. (6)] and the upper critical point $\tilde{\mu}_{c3}$ [Eq. (11)], respectively, see Fig. 5. The universal scaling behavior and the zero-temperature phase diagram can be identified from the finite temperature density profiles of the trapped gas where the local chemical potentials are replaced by the harmonic trapping potential.

Furthermore, we mention that similar calculations of the scaling function can be constructed for the compressibility across all phase boundaries,

$$\begin{aligned} V-F: \quad & \tilde{\kappa} \simeq -\frac{1}{4\sqrt{2\pi t}} \text{Li}_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c1}}{t}}\right), \\ V-S: \quad & \tilde{\kappa} \simeq -\frac{1}{\sqrt{\pi t}} \text{Li}_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c2})}{t}}\right), \\ F-M: \quad & \tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{03} - \frac{\lambda_5}{\sqrt{t}} \text{Li}_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{2(\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c3})}{t}}\right), \\ S-M: \quad & \tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{04} - \frac{\lambda_6}{\sqrt{t}} \text{Li}_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{\tilde{\mu}-\tilde{\mu}_{c4}}{t}}\right). \end{aligned} \quad (44)$$

Here $\tilde{\kappa}_{03}, \tilde{\kappa}_{04}$ are the background compressibilities in the vicinities of the critical points $\tilde{\mu}_{c3}$ [Eq. (11)] and $\tilde{\mu}_{c4}$ [Eq. (12)], whereas λ_5 and λ_6 are temperature-independent

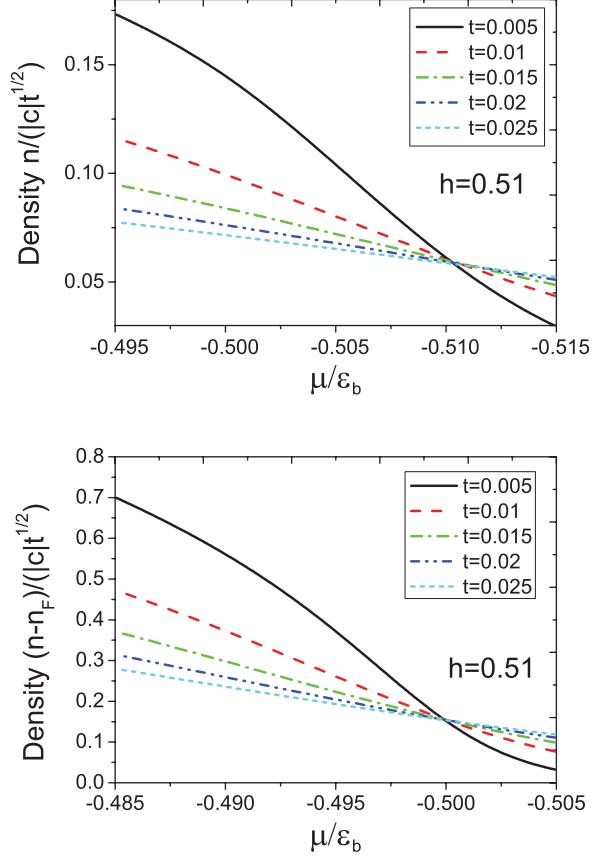


FIG. 5. (Color online) Scaled density vs chemical potential for $h = 0.51$ at different temperatures $T/\epsilon_b = 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$, and 0.025 . The density curves at different temperatures intersect at the critical points. This feature can be used to map out the phase boundary $V-F$ at $\tilde{\mu}_{c1} = -h$ [Eq. (6)] in upper panel and the phase boundary $F-M$ at $\tilde{\mu}_{c3} \approx -0.499$ [Eq. (11)] in the lower panel.

constants

$$\tilde{\kappa}_{03} = \frac{1}{4\pi\sqrt{2a}} \left(1 + \frac{3\sqrt{a}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{3a}{\pi^2}\right), \quad (45)$$

$$\tilde{\kappa}_{04} = \frac{1}{\pi\sqrt{b}} \left(1 - \frac{\sqrt{b}}{2\pi} + \frac{b}{6\pi^2}\right), \quad (46)$$

$$\lambda_5 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{24\sqrt{a}}{5\pi\sqrt{2}} + \frac{36a}{25\pi^2}\right), \quad (47)$$

$$\lambda_6 = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{36\sqrt{b}}{5\pi} + \frac{414b}{25\pi^2}\right). \quad (48)$$

Again, the critical exponents $z = 2$ and $\nu = 1/2$ can be read off the universal scaling function $\mathcal{F}(x) = \lambda \text{Li}_{-\frac{1}{2}}(x)$ in the universal form

$$\kappa(\mu, T) = \kappa_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{2}{\nu z}} \mathcal{F}\left(\frac{\mu - \mu_c}{T^{\frac{1}{\nu z}}}\right). \quad (49)$$

B. Criticality driven by a magnetic field

The quantum phase transitions driven by a magnetic field are particularly interesting. In the phase diagram of Fig. 1, for fixed chemical potential we can vary the external field H to pass the phase boundaries $S-M$ and $M-F$. At finite temperatures,

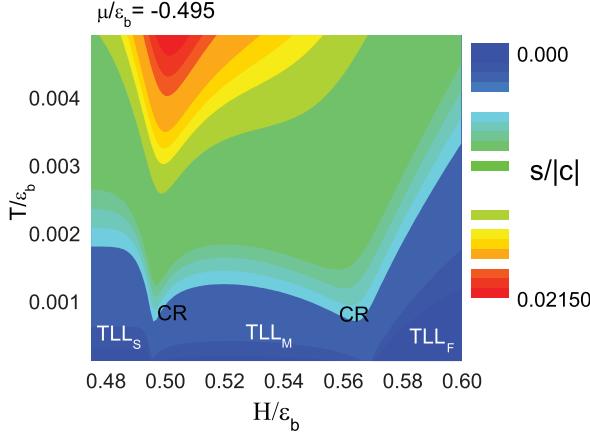


FIG. 6. (Color online) Contour plot of the entropy S vs the external field H for fixed chemical potential $\tilde{\mu} = -0.495$ in the T - H plane. The dashed lines are determined by comparing the result from the equation of state [Eqs. (15) and (16)] and the TLL entropy (30). The crossover temperatures separate the quantum critical regimes from the TLL phases.

the three zero-temperature quantum phases, i.e., the phase of singlet pairs, ferromagnetic phase of spin-aligned atoms, and the mixed phase of pairs and single atoms, become the relativistic TLL of a bound pair (TLL_S), TLL of single atoms (TLL_F), and a two-component TLL (TLL_M) of paired and single atoms, respectively. We obtain the critical fields by converting the critical fields [Eqs. (12) and (11)]

$$h_{c1} = -\tilde{\mu} + \frac{32\sqrt{2}}{15\pi} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{3}{2}} - \frac{32}{45\pi^2} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (50)$$

$$h_{c2} = -\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \left(\frac{15\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} - \frac{5}{8} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right). \quad (51)$$

These critical fields and the crossover temperatures can be observed in the contour plot of the entropy in the T - H plane, see Fig. 6. The low-energy TLL physics breaks down at the crossover temperature (dashed lines) where the dispersion of either bound pairs or unpaired single atoms becomes nonrelativistic. In particular, in the vicinity of the quantum critical points h_{c1} and h_{c2} , the system exhibits two different quantum critical regimes. From Eqs. (34), (35), and (37), we find the scaling function in the critical regime near the critical point (50)

$$S-M : \begin{cases} \tilde{n} \simeq \tilde{n}_{05} - \lambda_7 \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{h-h_{c1}}{t}} \right), \\ \tilde{M} \simeq -\lambda_8 \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{h-h_{c1}}{t}} \right), \\ \tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{05} - \frac{\lambda_9}{\sqrt{t}} \text{Li}_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{h-h_{c1}}{t}} \right), \end{cases} \quad (52)$$

where the constants are given by

$$\begin{aligned} \tilde{n}_{05} &= \frac{\sqrt{d}}{\pi} \left(1 - \frac{\sqrt{d}}{6\pi} + \frac{d}{36\pi^2} \right), \\ \tilde{\kappa}_{05} &= \frac{1}{\pi\sqrt{d}} \left(1 - \frac{\sqrt{d}}{2\pi} + \frac{d}{6\pi^2} \right), \\ \lambda_7 &= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{32\sqrt{d}}{5\pi} + \frac{848d}{75\pi^2} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lambda_8 &= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{16\sqrt{d}}{5\pi} + \frac{8d}{15\pi^2} \right), \\ \lambda_9 &= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(1 - \frac{36\sqrt{d}}{5\pi} + \frac{414d}{25\pi^2} \right), \end{aligned}$$

with

$$\begin{aligned} d &= 2 \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right) \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\tilde{\mu} + \frac{1}{2}} \right), \\ e &= \frac{1}{2} \left(\frac{15\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}}. \end{aligned}$$

In the vicinity of the quantum critical points h_{c2} , we obtain the scaling forms

$$F-M : \begin{cases} \tilde{n} \simeq \tilde{n}_{06} - \lambda_{10} \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\alpha(h-h_{c2})}{t}} \right), \\ \tilde{M} \simeq \tilde{M}_{06} + \lambda_{11} \sqrt{t} \text{Li}_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\alpha(h-h_{c2})}{t}} \right), \\ \tilde{\kappa} \simeq \tilde{\kappa}_{06} - \frac{\lambda_{12}}{\sqrt{t}} \text{Li}_{-\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\alpha(h-h_{c2})}{t}} \right), \end{cases} \quad (53)$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{n}_{06} &= \frac{\sqrt{e}}{2\pi\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\sqrt{e}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{e}{2\pi^2} \right), \\ \tilde{\kappa}_{06} &= \frac{1}{4\pi\sqrt{2e}} \left(1 + \frac{3\sqrt{e}}{\pi\sqrt{2}} + \frac{3e}{\pi^2} \right), \\ \lambda_{10} &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{16\sqrt{e}}{5\pi\sqrt{2}} - \frac{8e}{25\pi^2} \right), \\ \lambda_{11} &= \frac{4\sqrt{e}}{5\sqrt{2}\pi^{3/2}} \left(1 - \frac{3\sqrt{e}}{5\pi\sqrt{2}} \right), \\ \lambda_{12} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{24\sqrt{e}}{5\pi\sqrt{2}} + \frac{36e}{25\pi^2} \right), \end{aligned} \quad (54)$$

with

$$\alpha = -\frac{8}{5\pi} \left(\frac{15\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (55)$$

In this case, the background density $\tilde{M}_{06} = \tilde{n}_{06}$ is equal to the total density at the critical point. The density (or magnetization) and compressibility can be recast into the universal scaling form

$$M(h, T) = n_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{1}{vz}} \mathcal{G} \left(\frac{\alpha(h-h_c)}{T^{\frac{1}{vz}}} \right), \quad (56)$$

$$\kappa(\mu, T) = \kappa_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{2}{vz}} \mathcal{F} \left(\frac{\alpha(h-h_c)}{T^{\frac{1}{vz}}} \right), \quad (57)$$

with the same critical exponents as those for quantum criticality driven by the chemical potential, i.e., the dynamical critical exponent $z = 2$ and the correlation length exponent $v = 1/2$.

In Fig. 7 we show the magnetization as a function of the external field for different temperatures for a fixed chemical potential. All curves intersect at the critical point h_{c1} without background magnetization. However, these curves intersect at the upper critical point h_{c2} with appropriate subtraction of the background magnetization. We can obtain

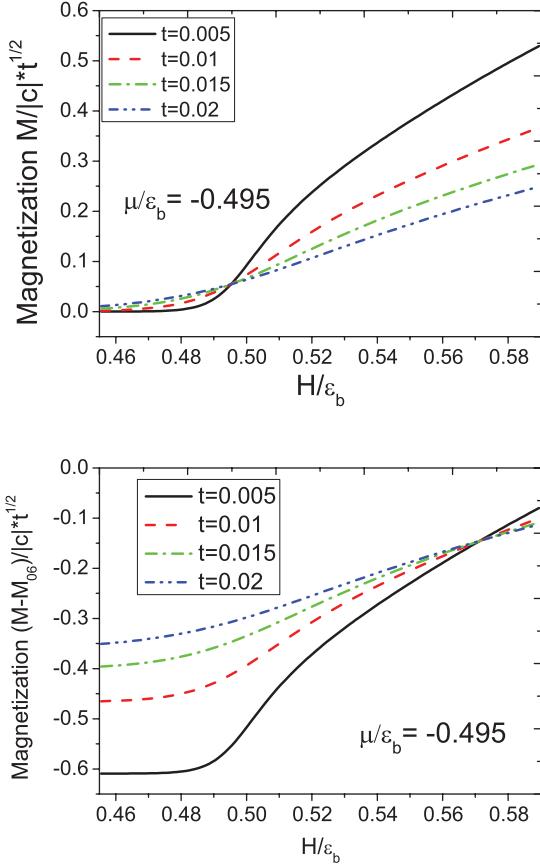


FIG. 7. (Color online) Magnetization vs external field for $\bar{\mu} = -0.495$. Upper panel: the intersection point of the magnetization curves at different temperatures gives the critical external field h_{c1} at the boundary S - M . Lower panel: after a proper subtraction of the background magnetization $\tilde{M}_{06} = n(t)$, the intersection point of the magnetization curves at different temperatures gives the critical external field h_{c2} at the boundary F - M .

similar scaling behavior for the densities near the critical points h_{c1} and h_{c2} like that presented in Figs. 4 and 5. It turns out that magnetization can be used to map out the bulk phase diagram through the 1D trapped gas at finite temperatures.

VI. CONCLUSION

Using the TBA equations, we have studied the quantum phase diagram, thermodynamics, and quantum critical behavior of one-dimensional spin-1 bosons with strongly repulsive density-density and antiferromagnetic spin-exchange interactions. We have determined with high precision the equation of state from which the TLL thermodynamics, universal scaling functions, and critical exponents have been obtained. The universality class of quantum criticality has also been discussed.

The scaling forms of the density, compressibility, magnetization, and susceptibility associated with the phase transitions driven by the chemical potential and magnetic field were rescaled to the universality class of quantum criticality of free fermions with critical exponent $z = 2$ and correlation length exponent $\nu = 1/2$. It thus turns out that the quantum criticality of the spin-1 Bose gas belongs to the same universality class as spin-1/2 attractive fermions [38] due to the hard-core nature of the two coupled Tonks-Girardeau gases. We have also shown that the quantum criticality in 1D systems involves a universal crossover from a TLL with linear dispersion to free fermions with a quadratic dispersion near the critical point. These scaling forms for the thermodynamic properties across the phase boundaries illustrate the physical origin of quantum criticality in this system, where the singular part of the thermodynamic properties involves a sudden change of density of state for either pairs or unpaired single atoms. The phase diagram, the TLL thermodynamics, and critical properties of the bulk system can be mapped out from the density and magnetization profiles of the trapped spinor gas at finite temperatures. Our results open the way to further study of such universal features of 1D many-body physics in experiments with ultracold atoms.

ACKNOWLEDGMENTS

This work has been partially supported by the Australia Research Council. C.C.N.K. thanks CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) for financial support. He also thanks the Department of Theoretical Physics for their hospitality. A.F. thanks CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) for financial support.

-
- [1] T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 742 (1998); T.-L. Ho and S. K. Yip, *ibid.* **84**, 4031 (2000).
 - [2] T. Ohmi and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1822 (1988).
 - [3] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2027 (1998).
 - [4] H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, J. Stenger, S. Inouye, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2228 (1999).
 - [5] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2498 (1999).
 - [6] M. D. Barrett, J. A. Sauer, and M. S. Chapman, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 01040 (2001).
 - [7] M.-S. Chang, Q. Qin, W. Zhang, L. You, and M. S. Chapman, *Nat. Phys.* **1**, 111 (2005).
 - [8] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 250402 (2003).
 - [9] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hansch, and I. Bloch, *Nature* **429**, 277 (2004).
 - [10] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Science* **305**, 1125 (2004).
 - [11] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 190406 (2005).
 - [12] T. Kinoshita *et al.*, *Nature* **440**, 900 (2006).

- [13] A. H. van Amerongen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 090402 (2008).
- [14] T. Kitagawa *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 255302 (2010).
- [15] J. Armijo, T. Jacqmin, K. V. Kheruntsyan, and I. Bouchoule, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 230402 (2010); J. Armijo, T. Jacqmin, K. Kheruntsyan, and I. Bouchoule, *Phys. Rev. A* **83**, 021605(R) (2011).
- [16] E. Haller *et al.*, *Science* **325**, 1224 (2009).
- [17] Y. Liao *et al.*, *Nature* **467**, 567 (2010).
- [18] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1215 (2008).
- [19] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac, and M. Rigol, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1405 (2011).
- [20] E. Eisenberg and E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 220403 (2002).
- [21] K. Yang and Y.-Q. Li, *Int. J. Mod. Phys. B* **17**, 1027 (2003).
- [22] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1312 (1967); M. Gaudin, *Phys. Lett. A* **24**, 55 (1967).
- [23] B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 98 (1968).
- [24] Y.-Q. Li, S.-J. Gu, Z.-J. Ying, and U. Eckern, *Europhys. Lett.* **61**, 368 (2003).
- [25] X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and M. Takahashi, *Phys. Rev. A* **76**, 043617 (2007).
- [26] J. Cao, Y. Jiang, and Y. Wang, *Europhys. Lett.* **79**, 30005 (2007).
- [27] Y. Jiang, J. Cao, and Y. Wang, *J. Phys. A* **44**, 345001 (2011).
- [28] F. H. L. Essler, G. V. Shlyapnikov, and A. M. Tsvelik, *J. Stat. Mech.* (2009) P02027.
- [29] J. Y. Lee, X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and C. Lee, *Phys. Rev. A* **80**, 063625 (2009).
- [30] G. V. Shlyapnikov and A. M. Tsvelik, *New J. Phys.* **13**, 065012 (2011).
- [31] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University, Cambridge, England, 1999).
- [32] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [33] N. Gemelke, X. Z. Zhang, C.-L. Hung, and C. Chin, *Nature* **460**, 995 (2009); C.-L. Hung, X. Z. Zhang, N. Gemelke, and C. Chin, *ibid.* **470**, 236 (2011).
- [34] P. Cladé, C. Ryu, A. Ramanathan, K. Helmerson, and W. D. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 170401 (2009); N. Gemelke, X. Zhang, C.-L. Hung, and C. Chin, *Nature* **460**, 995 (2009).
- [35] M. Campostrini and E. Vicari, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 240601 (2009); **103**, 269901(E) (2009).
- [36] Q. Zhou and T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 245702 (2010).
- [37] K. R. A. Hazzard and E. J. Mueller, *Phys. Rev. A* **84**, 013604 (2011).
- [38] X.-W. Guan and T.-L. Ho, *Phys. Rev. A* **84**, 023616 (2011).
- [39] X.-W. Guan and M. T. Batchelor, *J. Phys. A* **44**, 102001 (2011).
- [40] X. Yin, X.-W. Guan, Y. Zhang, and S. Chen, *Phys. Rev. A* **85**, 013608 (2012).
- [41] C. N. Yang and C. P. Yang, *J. Math. Phys.* **10**, 1115 (1969).
- [42] N. Navon, S. Nascimbene, F. Chevy, and C. Salomon, *Science* **328**, 729 (2010).
- [43] M. Horikoshi, S. Nakajima, M. Ueda, and T. Mukaiyama, *Science* **327**, 442 (2010).
- [44] T.-L. Ho and Q. Zhou, *Nat. Phys.* **6**, 131 (2009).
- [45] H. W. J. Blöte, J. L. Cardy, and M. P. Nightingale, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 742 (1986); I. Affleck, *ibid.* **56**, 746 (1986).
- [46] Y. Maeda, C. Hotta, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 057205 (2007).
- [47] E. Zhao, X.-W. Guan, W. V. Liu, M. T. Batchelor, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 140404 (2009).

Quantum criticality of spin-1 bosons in a one-dimensional harmonic trap

C. C. N. Kuhn,^{1,2} X. W. Guan,² A. Foerster,¹ and M. T. Batchelor^{2,3}

¹*Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, RS, Brazil*

²*Department of Theoretical Physics, Research School of Physics and Engineering, Australian National University*

³*Mathematical Sciences Institute, Australian National University, Canberra ACT 0200, Australia*

(Received 17 November 2011; published 17 July 2012)

We investigate universal thermodynamics and quantum criticality of spin-1 bosons with strongly repulsive density-density and antiferromagnetic spin-exchange interactions in a one-dimensional harmonic trap. From the equation of state, we find that a partially polarized core is surrounded by two wings composed of either spin-singlet pairs or a fully spin-aligned Tonks-Girardeau gas depending on the polarization. We describe how the scaling behavior of density profiles can reveal the universal nature of quantum criticality and map out the quantum phase diagram. We further show that at quantum criticality the dynamical critical exponent $z = 2$ and correlation length exponent $\nu = 1/2$. This reveals a subtle resemblance to the physics of the spin-1/2 attractive Fermi gas.

DOI: 10.1103/PhysRevA.86.011605

PACS number(s): 67.85.-d, 03.75.Hh, 03.75.Ss, 05.30.Fk

Alkali bosons with hyperfine spins in an optical trap provide exciting opportunities to simulate a variety of macroscopic quantum phenomena. In the spinor gas, the spin-dipolar collisions significantly change the spin states producing rich Zeeman effects. In particular, spinor Bose gases with density-density interaction and antiferromagnetic spin-exchange interaction [1,2] exhibit various phases of strongly correlated quantum liquids and are thus particularly valuable to study quantum magnetism and criticality. The experimental study of quantum criticality and universal scaling behavior has recently been initiated in low-dimensional cold atomic matter [3,4]. These advances build on theoretical schemes for mapping out quantum criticality in cold-atom systems [5–7]. In this framework, exactly solved models of cold atoms, exhibiting quantum phase transitions, provide a rigorous way to investigate quantum criticality [8].

One-dimensional (1D) spinor Bose gases with short-range δ -function interaction and antiferromagnetic spin-exchange interaction are particularly interesting due to the existence of various phases of quantum liquids associated with exact Bethe ansatz solutions [9–12]. The antiferromagnetic interaction leads to an effective attraction in the spin-singlet channel that gives rise to a quasicondensate of singlet bosonic pairs when the external field is less than a lower critical field at zero temperature. In this phase, the low-energy physics can be characterized by a spin-charge separation theory of the U(1) Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) describing the charge sector and a O(3) nonlinear σ model describing the spin sector [10]. However, if the external field exceeds an upper critical field, we have a solely ferromagnetic quasicondensate of unpaired bosons with spins aligned along the external field. For an intermediate magnetic field, the spin-singlet pairs and spin-aligned bosons form a two-component TLL with a magnetization (see Fig. 1).

Quantum critical phenomena in the spin-1 Bose gas associated with phase transitions at zero temperature can be explored by varying the magnetic field and chemical potential. In this Rapid Communication we use the exact thermodynamic Bethe ansatz (TBA) solution for spin-1 bosons to illustrate the microscopic origin of the quantum criticality of different spin states in a 1D harmonic trap.

The model and equation of state. We consider N particles of mass m confined in one dimension to a length L with δ -interacting-type density-density and spin-exchange interactions between two atoms. The Hamiltonian is [1,9]

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i < j} [c_0 + c_2 S_i S_j] \delta(x_i - x_j) + E_z, \quad (1)$$

where S_i is a spin-1 operator with z component ($s = 1, 0, -1$), $E_z = -HS^z$ is the Zeeman energy, with H the external field and S^z the total spin in the z component. The 1D interaction parameters $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3$ and $c_2 = (g_2 - g_0)/3$ with $g_S = -2\hbar^2/mas$. Here m is the particle mass and a_S represents the 1D s -wave scattering length in the total spin $S = 0, 2$ channels. Following Refs. [13,14] the effective 1D coupling constant g_S can be expressed in terms of the known 3D scattering lengths.

Extending Yang's method [15], Cao *et al.* [9] solved the model (1) for the case $c = c_0 = c_2$. For convenience, we define the linear density $n = N/L$ and use dimensionless quantities $\tilde{\mu} = \mu/\varepsilon_b$, $h = H/\varepsilon_b$, $t = T/\varepsilon_b$, and $\tilde{p} = p/|c|\varepsilon_b$. Here energy and length are measured in units of the binding energy $\varepsilon_b = \hbar^2 c^2 / 16m$ and c^{-1} , respectively. We set $\hbar = 2m = 1$ in the following.

The model (1) has two conserved quantities, S^z and the total particle number N . The number of particles in a particular spin state ($s = 1, 0, -1$) is no longer conserved. For instance the scattering between two particles of spin $s = \pm 1$ can produce two particles of spin $s = 0$ and vice versa. Therefore, the model can have two types of pairing between two spin ± 1 atoms or between two spin-0 atoms (see Refs. [1,9,11]).

The ground-state properties of the system were studied in Refs. [10–12]. Analytic results can be extracted from the TBA equations for strong coupling $\gamma \gg 1$ and low temperature $t \ll 1$ (see Ref. [16] for details). The pressure of the system can be written as $\tilde{p} = \tilde{p}_1 + \tilde{p}_2$ in terms of the pressure \tilde{p}_1 for unpaired and \tilde{p}_2 for paired bosons (Boltzmann constant $k_B = 1$)

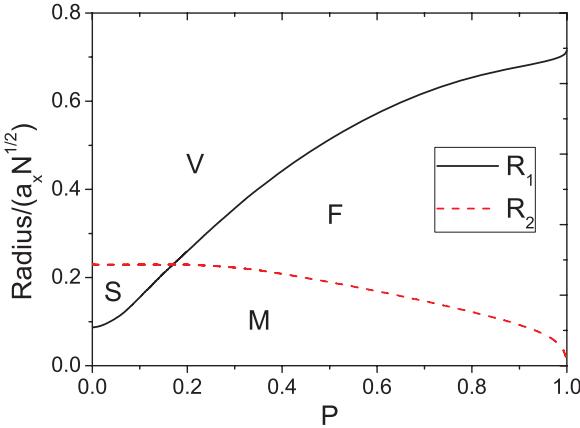


FIG. 1. (Color online) Phase diagram of the spin-1 Bose gas at $T = 0$ in terms of the rescaled axial radius $R/a_x N^{1/2}$ versus the polarization $P = N_1/N$ for $N/(a_x^2 c^2) = 0.05$. The lines R_1 and R_2 denote the phase boundaries of vanishing density of singlet pairs and vanishing density of spin-aligned bosons. The model exhibits three quantum phases: spin-singlet-paired bosons S , ferromagnetic spin-aligned bosons F , and a mixed phase of the pairs and unpaired bosons. V stands for the vacuum.

where

$$\begin{aligned}\tilde{p}_1 &= -\frac{t^{3/2}}{4\sqrt{2\pi}} f_{\frac{3}{2}}^1 \left(1 + \frac{t^{3/2}}{32\sqrt{2\pi}} f_{\frac{3}{2}}^1 - \frac{124t^{3/2}}{125\sqrt{\pi}} f_{\frac{3}{2}}^2 \right), \\ \tilde{p}_2 &= -\frac{t^{3/2}}{4\sqrt{\pi}} f_{\frac{3}{2}}^2 \left(1 - \frac{124t^{3/2}}{125\sqrt{2\pi}} f_{\frac{3}{2}}^1 - \frac{181t^{3/2}}{3456\sqrt{\pi}} f_{\frac{3}{2}}^2 \right).\end{aligned}\quad (2)$$

Here $f_n^j = \text{Li}_n(-e^{A_j/t})$ with $j = 1, 2$ denotes the standard polylog function $\text{Li}_n(x)$, with

$$\begin{aligned}A_1 &= \tilde{\mu} + h + 2\tilde{p}_1 - \frac{16\tilde{p}_2}{5} \\ &\quad + \frac{t^{5/2}}{16\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} f_{\frac{5}{2}}^1 - \frac{1984}{125\sqrt{2\pi}} f_{\frac{5}{2}}^2 \right) + f_s, \\ A_2 &= 1 + 2\tilde{\mu} - \frac{32\tilde{p}_1}{5} - \frac{\tilde{p}_2}{3} \\ &\quad - \frac{t^{5/2}}{16\sqrt{2}} \left(\frac{3968}{125\sqrt{\pi}} f_{\frac{5}{2}}^1 + \frac{181}{108\sqrt{2\pi}} f_{\frac{5}{2}}^2 \right).\end{aligned}\quad (3)$$

The terms $f_s = te^{-h/t} e^{-2\tilde{p}_1/t} I_0(2\tilde{p}_1/t)$ with $I_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2k}}{k!^2}$ are extracted from the spin wave bound states [16].

The above result for the pressure serves as the equation of state, from which thermodynamic quantities such as the particle density n , the density of unpaired bosons n_1 , the density of spin-singlet pairs n_2 , the entropy, and the compressibility of the system can be determined through the standard thermodynamic relations. Moreover, the equation of state allows an exact description of TLLs and quantum criticality of the system.

Phase diagram and density profiles. In order to study quantum criticality in the spin-1 Bose gas in a 1D harmonic trap, the equation of state (2) can be reformulated within the local density approximation (LDA) by a replacement $\mu(x) = \mu(0) - \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2$ in which x is the position and ω_x is

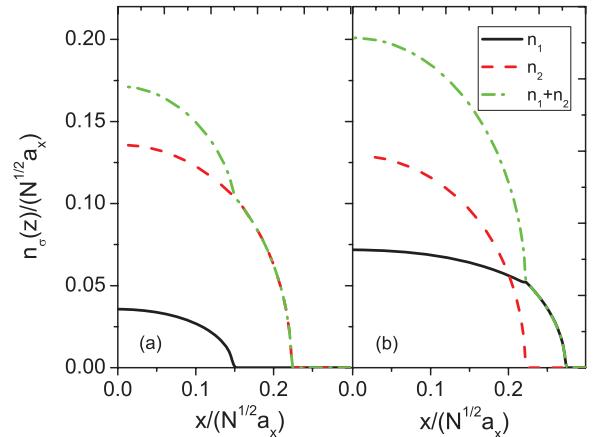


FIG. 2. (Color online) The density distribution profiles for trapped bosons at zero temperature with $N/a_x^2 c^2 \simeq 0.05$ for (a) $P \approx 12.22\%$ (or $h = 0.49$) and (b) $P \approx 22.33\%$ (or $h = 0.51$).

the trapping frequency (see Ref. [17]). Using the dimensionless chemical potential $\tilde{\mu}(\tilde{x}) = \tilde{\mu}(0) - 8\tilde{x}^2$, where $\tilde{x} = x/a_x^2 |c|$ is a rescaled distance and $a_x = \sqrt{\hbar/m\omega_x}$ is the harmonic characteristic radius, the total particle number and the polarization are given by

$$\begin{aligned}\frac{N}{a_x^2 c^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{n}(\tilde{x}) d\tilde{x}, \\ P &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{n}_1(\tilde{x}) d\tilde{x} / [N/(a_x^2 c^2)].\end{aligned}\quad (4)$$

We extract the phase boundaries from the equation of state (2) within the LDA (4) in the limit $t \rightarrow 0$ (see Fig. 1). The line R_1 (R_2) indicates the vanishing density of unpaired bosons (spin-singlet pairs). The intersection of the phase boundaries occurs at $h = 0.5$ and $\mu = 0.5$ yielding the critical polarization $P_c \approx 16.97\%$. This phase diagram resembles that of the spin-1/2 attractive Fermi gas, recently confirmed by Liao *et al.* [18]. Here the critical properties of the spin-1 Bose gas are described by two Tonks-Girardeau gases with masses m and $2m$, which are likely to mimic the free fermions and bosonic bound pairs in the spin-1/2 attractive Fermi gas.

Figure 2 shows the density distribution profiles in the limit $t \rightarrow 0$ for $N/a_x^2 c^2 \simeq 0.05$ for (a) low polarization ($P < P_c$) $P \approx 12.22\%$ and (b) large polarization ($P > P_c$) $P \approx 22.33\%$. We find a partially polarized core surrounded by two wings composed of either spin-singlet pairs or a fully spin-aligned Tonks-Girardeau gas. The threshold values of the phase boundaries are consistent with the phase diagram Fig. 1. Our result convincingly indicates that spinor Bose gases in a 1D harmonic trap constitute an excellent quantum simulator of strongly correlated TLLs which could be probed by *in situ* imaging, analogously to the trapped Fermi gas [18].

Quantum criticality. The equation of state (2), capturing the entire thermal fluctuation in the quantum critical regimes, illustrates the microscopic origin of the quantum criticality. The thermodynamic functions can be cast in a universal scaling form [19,20]. For example, the density and compressibility are

given by

$$n(\mu, T, x) = n_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{1}{vz}} \mathcal{G} \left(\frac{\mu(x) - \mu_c}{T^{\frac{1}{vz}}} \right), \quad (5)$$

$$\kappa(\mu, T, x) = \kappa_0 + T^{\frac{d}{z}+1-\frac{2}{vz}} \mathcal{F} \left(\frac{\mu(x) - \mu_c}{T^{\frac{1}{vz}}} \right), \quad (6)$$

with dimensionality $d = 1$. Here we find the scaling functions $\mathcal{G}(x) = \lambda_\alpha \text{Li}_{1/2}(-e^x)$ and $\mathcal{F}(x) = \lambda_\beta \text{Li}_{-1/2}(-e^x)$, from which follow the dynamical critical exponent $z = 2$ and correlation length exponent $v = 1/2$ for different phases of the spin states. In the above, n_0 , κ_0 , λ_α , and λ_β are constants associated with the background near the critical points (see details in Ref. [16]). Moreover, quantum criticality driven by the external field H leads to similar scaling, where now $\mathcal{G}(x) = \lambda_g \text{Li}_{1/2}(-e^{\Lambda_0 x})$ and $\mathcal{F}(x) = \lambda_f \text{Li}_{-1/2}(-e^{\Lambda_0 x})$ with a dimensionless factor Λ_0 and the same critical exponents [16]. Here $\lambda_{g,f}$ are different constants associated with critical points.

The critical exponents appearing in the scaling functions are analytically determined from the exact Bethe ansatz solution. We observe that the 1D spin-1 Bose gas belongs to the same universality class as spin-1/2 attractive fermions [8] due to the hard-core nature of the two coupled Tonks-Girardeau gases. This demonstrates a significant feature of 1D many-body physics—quantum criticality involves a universal crossover from a TLL with linear dispersion to free fermions with a quadratic dispersion in the low-energy physics [21]. In addition, the critical exponents of 1D spin-1 bosons have the same values as the critical exponents of the Mott transition in 1D and 2D Bose-Hubbard models (see Refs. [22,23]).

The universal scaling behavior of the homogenous system can be mapped out through the density profiles of the trapped gas at finite temperatures. Although a finite-size scaling effect is evident in the scaling analysis [5,6,24], the finite-size error lies within the current experimental accuracy [23]. Here we show that all thermodynamic observables are given in terms of the rescaled temperature and chemical potential. Thus one can either lower the temperature or increase the interaction strength (by tuning the transverse frequency) such that all data curves for the physical properties in the trapped gas collapse at different temperatures into a single curve with a proper scaling. This collapse signature can be used to confirm the quantum critical law, see the experimental measurements given in Ref. [23].

In the regime of low polarization ($P < P_c$), the phase transitions from the vacuum into the spin-singlet paired phase and from the pure paired phase into the mixture of spin-singlet pairs and spin-aligned bosons occur as the chemical potential passes the lower critical point $\tilde{\mu}_{c2} = -0.5$ and the upper critical point $\tilde{\mu}_{c4} = -h + \frac{32\sqrt{2}}{15\pi}(\frac{1}{2} - h)^{\frac{3}{2}} + \frac{2912}{225\pi^2}(\frac{1}{2} - h)^2$, respectively.

The universal scaling behavior can be identified following the scheme proposed in Ref. [6] by plotting the “rescaled density” versus the chemical potential for different values of temperature. Figures 3(a) and 3(b) show the rescaled density normalized by $N^{1/2}/a_x$ versus the rescaled distance at different temperatures. All curves intersect at the critical points $\tilde{\mu}_{c2}$ and $\tilde{\mu}_{c4}$ after a subtraction of the background density n_0 . We also see in Fig. 3 that all data points collapse onto a

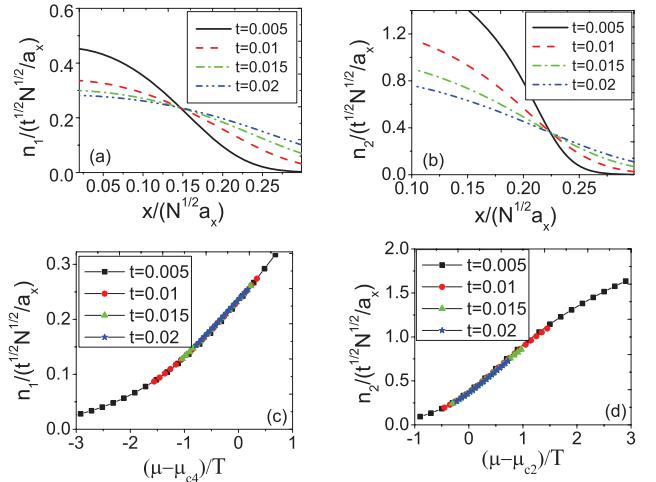


FIG. 3. (Color online) Quantum criticality for low polarization. The rescaled density profiles are plotted within LDA near the critical points (a) $\tilde{\mu}_{c4}$ and (b) $\tilde{\mu}_{c2}$ at different temperatures $t = 0.005, 0.01, 0.015$, and 0.02 . All curves intersect at the critical points. The rescaled density vs (c) $[\mu(x) - \mu_{c4}]/T^{zv}$ and (d) $[\mu(x) - \mu_{c2}]/T^{zv}$ at different temperatures $t = 0.005, 0.01, 0.015$, and 0.02 . All data points collapse onto a single curve.

single curve near (c) $\tilde{\mu}_{c4}$ and (d) $\tilde{\mu}_{c2}$, which is the scaling function for these quantum critical points.

For large polarization ($P > P_c$), the phase transitions from vacuum into the ferromagnetic spin-aligned boson phase and from the spin-aligned boson phase into the mixture of spin-singlet pairs and spin-aligned bosons occur as the chemical potential varies across the lower critical point $\tilde{\mu}_{c1} = -h$ and the upper critical point $\tilde{\mu}_{c3} = -\frac{1}{2} + \frac{8\sqrt{2}}{15\pi}(h - \frac{1}{2})^{\frac{3}{2}} + \frac{104}{75\pi^2}(h - \frac{1}{2})^2$, respectively. A similar analysis is presented in Fig. 4 near the critical points $\tilde{\mu}_{c1}$ and $\tilde{\mu}_{c3}$.

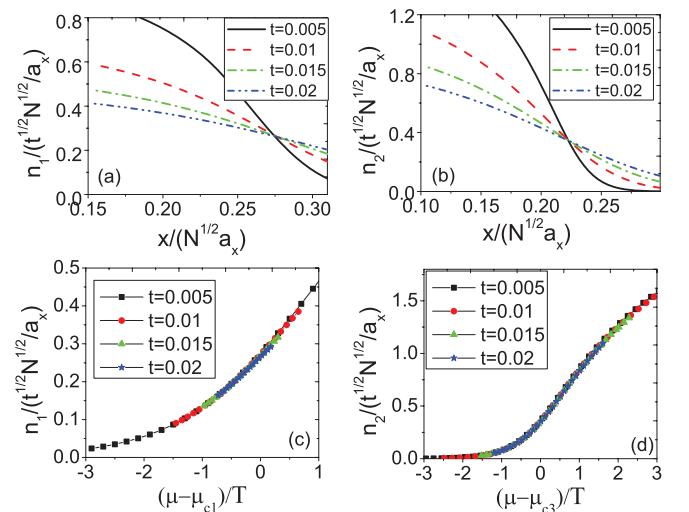


FIG. 4. (Color online) Quantum criticality for high polarization. The rescaled density profiles are plotted within LDA near the critical points (a) $\tilde{\mu}_{c1}$ and (b) $\tilde{\mu}_{c3}$. The rescaled density vs (c) $[\mu(x) - \mu_{c1}]/T^{zv}$ and (d) $[\mu(x) - \mu_{c3}]/T^{zv}$. As in Fig. 3 the curves and data points are indicative of scaling behavior at quantum criticality.

Similar plots can be made for the rescaled compressibility in agreement with the universal scaling result (6). The compressibility curves at different temperatures collapse into a single curve obeying the scaling law. The compressibility always develops a peak near the phase boundary on the side with higher density of state. However, the experimental measurement of the compressibility is more difficult than the density profiles. Nevertheless, progress in measuring the compressibility of an ultracold Fermi gas has recently been made [25].

In conclusion, we have discussed the equation of state, the density profiles, TLL thermodynamics, and universal scaling at quantum criticality for the spin-1 Bose gas with strongly repulsive density-density and antiferromagnetic spin-exchange interactions in a 1D harmonic trap. We have shown that the quantum criticality of different spin states belongs to the universality class with critical exponents $z = 2$ and

$\nu = 1/2$. This remains true in general for the 1D model even for the nonintegrable case $c_0 \neq c_2$. We have also demonstrated that the phase diagram, the TLLs, and critical properties of the bulk system can be mapped out from the density profiles of the trapped spinor gas at finite temperatures. Current experiments [3,4,18,26] are capable of measuring such universal features of 1D many-body physics.

This work has been partially supported by the Australian Research Council. C.C.N.K. thanks Coordenacao de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) for financial support. He also thanks the Department of Theoretical Physics, Research School of Physics and Engineering at The Australian National University for their hospitality. A.F. thanks Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) for financial support.

-
- [1] T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 742 (1998); T.-L. Ho and S. K. Yip, *ibid.* **84**, 4031 (2000).
 - [2] T. Ohmi and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1822 (1988).
 - [3] N. Gemelke, X. Z. Zhang, C.-L. Hung, and C. Chin, *Nature (London)* **460**, 995 (2009); C.-L. Hung, X. Z. Zhang, N. Gemelke, and C. Chin, *ibid.* **470**, 236 (2011).
 - [4] P. Cladé, C. Ryu, A. Ramanathan, K. Helmerson, and W. D. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 170401 (2009); N. Gemelke, X. Zhang, C.-L. Hung, and C. Chin, *Nature (London)* **460**, 995 (2009).
 - [5] M. Campostrini and E. Vicari, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 240601 (2009).
 - [6] Q. Zhou and T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 245702 (2010).
 - [7] K. R. A. Hazzard and E. J. Mueller, *Phys. Rev. A* **84**, 013604 (2011).
 - [8] X.-W. Guan and T.-L. Ho, *Phys. Rev. A* **84**, 023616 (2011); X.-W. Guan and M. T. Batchelor, *J. Phys. A* **44**, 102001 (2011).
 - [9] J. Cao, Y. Jiang, and Y. Wang, *Europhys. Lett.* **79**, 30005 (2007).
 - [10] F. H. L. Essler, G. V. Shlyapnikov, and A. M. Tsvelik, *J. Stat. Mech.* (2009) P02027.
 - [11] J. Y. Lee, X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and C. Lee, *Phys. Rev. A* **80**, 063625 (2009).
 - [12] G. V. Shlyapnikov and A. M. Tsvelik, *New J. Phys.* **13**, 065012 (2011).
 - [13] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).
 - [14] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini, and B. E. Granger, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 030402 (2004).
 - [15] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1312 (1967).
 - [16] C. C. N. Kuhn, X.-W. Guan, A. Foerster, and M. T. Batchelor, *Phys. Rev. A* **85**, 043606 (2012).
 - [17] X.-G. Yin, X.-W. Guan, S. Chen, and M. T. Batchelor, *Phys. Rev. A* **84**, 011602(R) (2011).
 - [18] Y. Liao, A. Rittner, T. Paprotta, W. Li, G. Patridge, R. Hulet, S. Baure, and E. Mueller, *Nature (London)* **467**, 567 (2010).
 - [19] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
 - [20] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
 - [21] Y. Maeda, C. Hotta, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 057205 (2007).
 - [22] M. Campostrini and E. Vicari, *Phys. Rev. A* **81**, 063614 (2010).
 - [23] X. Zhang, C.-L. Hung, S.-K. Tung, N. Gemelke, and C. Chin, *New J. Phys.* **13**, 045011 (2011); X. Zhang, C.-L. Hung, S.-K. Tung, and C. Chin, *Science* **335**, 1070 (2012).
 - [24] G. Ceccarelli, C. Torrero, and E. Vicari, *Phys. Rev. A* **85**, 023616 (2012).
 - [25] Y.-R. Lee, M.-S. Heo, J.-H. Choi, T. T. Wang, C. A. Christensen, T. M. Rvachov, and W. Ketterle, *Phys. Rev. A* **85**, 063615 (2012).
 - [26] J. Armijo, T. Jacqmin, K. V. Kheruntsyan, and I. Bouchoule, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 230402 (2010).

11 W narrow linewidth laser source at 780nm for laser cooling and manipulation of Rubidium

S. S. Sané,¹ S. Bennetts,¹ J. E. Debs,¹ C. C. N. Kuhn^{2,3},
G. D. McDonald,¹ P. A. Altin,¹ J. D. Close,¹ and N. P. Robins^{1,*}

¹*Quantum Sensors Lab, Department of Quantum Science,
Australian National University, Canberra, 0200, Australia*

²*Instituto de Física-UFRGS, Porto Alegre, RS, Brazil*

³*Department of Theoretical Physics, Australian National University, Canberra, 0200,
Australia*

**nick.robins@anu.edu.au*

<http://atomlaser.anu.edu.au>

Abstract: We present a narrow linewidth continuous laser source with over 11 W output power at 780 nm, based on single-pass frequency doubling of an amplified 1560 nm fibre laser with 36% efficiency. This source offers a combination of high power, simplicity, mode quality and stability. Without any active stabilization, the linewidth is measured to be below 10 kHz. The fibre seed is tunable over 60 GHz, which allows access to the D₂ transitions in ⁸⁷Rb and ⁸⁵Rb, providing a viable high-power source for laser cooling as well as for large-momentum-transfer beamsplitters in atom interferometry. Sources of this type will pave the way for a new generation of high flux, high duty-cycle degenerate quantum gas experiments.

© 2012 Optical Society of America

OCIS codes: (020.3320) Laser cooling; (020.1335) Atom optics; (140.3515) Lasers, frequency doubled.

References and links

1. S. Jollenbeck, J. Mahnke, R. Randoll, W. Ertmer, J. Arlt, and C. Klempert. “Hexapole-compensated magneto-optical trap on a mesoscopic atom chip,” *Phys. Rev. A* **83**, 043406 (2011).
2. M. Olshanii and D. Weiss, “Producing Bose-Einstein condensates using optical lattices,” *Phys. Rev. Lett.* **89**, 090404 (2002).
3. H. Muller, S. Chiow, Q. Long, S. Herrmann, and S. Chu. “Atom interferometry with up to 24-photon-momentum-transfer beam splitters,” *Phys. Rev. Lett.* **100**, 180405 (2008).
4. S. Dimopoulos, P. W. Graham, J. M. Hogan, M. A. Kasevich, and S. Rajendran. “Atomic gravitational wave interferometric sensor,” *Phys. Rev. D* **78**, 122002 (2008).
5. S. S. Szigeti, J. E. Debs, J. J. Hope, N. P. Robins, and J. D. Close. “Why momentum width matters for atom interferometry with Bragg pulses,” *New J. Phys.* **14**, 023009 (2012).
6. K. B. MacAdam, A. Steinbach, and C. Wieman. “A narrow-band tunable diode laser system with grating feedback, and a saturated absorption spectrometer for Cs and Rb,” *Am. J. Phys.* **60**, 1098 (1992).
7. L. Ricci, M. Weidmüller, T. Esslinger, A. Hemmerich, C. Zimmermann, V. Vuletic, W. König, and T. W. Hänsch. “A compact grating-stabilized diode laser system for atomic physics,” *Opt. Comm.* **117**, 541 (1995).
8. L. R. Taylor, Y. Feng, and D. B. Calia, “50W CW visible laser source at 589nm obtained via frequency doubling of three coherently combined narrow-band Raman fibre amplifiers,” *Opt. Express* **18**, 8540-8555 (2010).
9. Y. Feng, L. R. Taylor, and D. B. Calia, “25 W Raman-fiber-amplifier-based 589 nm laser for laser guide star,” *Opt. Express* **17**, 19021–19026 (2009).
10. S. Chiow, S. Herrmann, H. Muller, and S. Chu. “6 W, 1 kHz linewidth, tunable continuous-wave near-infrared laser,” *Opt. Express* **17**, 5246 (2009).

11. S.-Y. Lan, P.-C. Kuan, B. Estey, P. Haslinger, and H. Müller. "Influence of the Coriolis force in atom interferometry," accepted Phys. Rev. Lett. (2012).
 12. B. V. Zhdanov, J. Sell, and R. J. Knize, "Multiple laser diode array pumped Cs laser with 48W output power," Electr. Lett. **44**, 582–583 (2008).
 13. J. Walling, O. Peterson, and R. Morris, "Tunable CW alexandrite laser," IEEE J. Quantum Electron. **16**, 120–121 (1980).
 14. J. Zweiback and W. F. Krupke "28W average power hydrocarbon-free rubidium diode pumped alkali laser," Opt. Express **18**, 1444–1449 (2010).
 15. R. J. Thompson, M. Tu, D. C. Aveline, N. Lundblad, and L. Maleki., "High power single frequency 780nm laser source generated from frequency doubling of a seeded fiber amplifier in a cascade of PPLN crystals," Opt. Express **11**, 1709 (2003).
 16. F. Lienhart, S. Boussen, O. Carat, N. Zahzam, Y. Bidel, and A. Bresson. "Compact and robust laser system for rubidium laser cooling based on the frequency doubling of a fiber bench at 1560 nm," Appl. Phys. B **89**, 177 (2007).
 17. V. Ménoret, R. Geiger, G. Stern, N. Zahzam, B. Battelier, A. Bresson, A. Landragin, and P. Bouyer. "Dual-wavelength laser source for onboard atom interferometry," Opt. Lett. **36**, 4128 (2011).
 18. NP Photonics, The Rock.
 19. IPG photonics.
 20. PPLN crystal supplied by Coversion Ltd.
 21. J. Feng, Y. Li, X. Tian, J. Liu, and K. Zhang. "Noise suppression, linewidth narrowing of a master oscillator power amplifier at 1.56nm and the second harmonic generation output at 780nm," Opt. Express **16**, 11871 (2008).
 22. F. Kéfélian, H. Jiang, P. Lemonde, and G. Santarelli, "Ultralow-frequency-noise stabilization of a laser by locking to an optical fiber-delay line," Opt. Lett. **34**, 914–916 (2009).

1. Introduction

The rapid progress of atomic physics over the past few decades has largely hinged upon the development of high power, narrow linewidth laser sources for manipulating and probing atoms. Increased laser power allows for higher flux and collection efficiency in magneto-optical traps [1], as well as further improvements in lattice-based cooling techniques [2]. In atom interferometry, narrow linewidth, high power near-resonant lasers are a prerequisite to achieving higher sensitivities with large-momentum-transfer beamsplitting [3–5].

The most common atomic species used for making alkali gas Bose-Einstein condensates (BECs) is ^{87}Rb . This is due in part to its excellent scattering properties which allow efficient evaporative cooling, but also because of the availability of inexpensive 780nm CD burner laser diode sources which can be stabilized using an external cavity grating [6,7]. Today, for a modest cost, a grating stabilised diode master laser/tapered amplifier configuration will produce a cw source with a 10's of kHz linewidth and up to 2W of output power. However, the spatial mode quality is typically poor, leading to usable powers of < 500 mW after spatial filtering. These power levels and linewidths are not adequate for next generation high flux Rb BEC and interferometers and thus an alternate approach is required.

In recent years a great deal of effort has focused on the development of high power narrow linewidth CW sources at 589 nm primarily for sodium guide star applications, but also for laser cooling. Currently doubling raman fibre lasers in an external resonant cavity have demonstrated powers of 50W [8] and doubling efficiencies of 86% at 25W [9]. Another approach by Chiow et al. used a modified Coherent 899 Ti:sapphire laser to achieve 6W of light at 852 nm by injection locking. Frequency stabilization to a high-finesse optical cavity resulted in a linewidth of < 1 kHz [10]. This technology allowed for efficient high-order Bragg diffraction in the largest area atom interferometer produced to date [11]. Diode pumped alkali vapour lasers have now demonstrated 48W in Cs [12].

At the 780nm Rb wavelength, tunable Ti:sapphire and Alexandrite lasers have demonstrated up to 6W, offering the option of injection locking [13]. Zweiback *et. al* have demonstrated 28W from a diode pumped alkali vapour laser [14]. By cascading two PPLN crystals, Thompson et al. were able to obtain 20% SHG efficiency and generate 900mW of light at 780 nm [15].

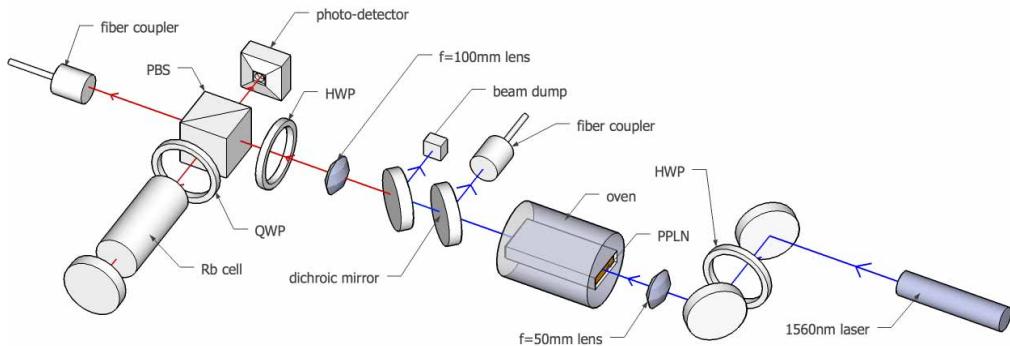


Fig. 1. Schematic of the experimental setup. The seed and fiber amplifier are not shown in the diagram. PPLN - periodically-poled lithium niobate crystal, HWP - half-wave plate, QWP - quarter-wave plate, PBS - polarizing beamsplitter. After the oven, the 780nm and 1560nm light are separated by the dichroic mirrors.

Recently the atomic physics community has also begun to investigate the possibility of using compact cw frequency-doubled sources for portable atom interferometry based sensors [16,17].

In this paper we present a compelling argument to move to a doubled laser system in atomic physics labs working with Rubidium. We have produced a 11.4 W cw laser at 780.24 nm with a 6 kHz linewidth by single-pass frequency doubling in a single PPLN crystal. The doubling efficiency is 36%. The setup is simple and robust, relying on a narrow-linewidth fiber laser [18] to provide a highly stable seed, and a low noise 30 W fibre amplifier [19] to generate the high powers required for efficient doubling.

2. Apparatus

The experimental setup is shown in Fig. 1. The source is an amplified NP Photonics Rock fibre laser with a centre wavelength of 1560.48 nm and a tuning range of ± 30 GHz. Only ± 150 MHz tuning is readily available via piezo control, otherwise the laser must be tuned with temperature. This laser has a specified linewidth of < 5 kHz integrated over 100 ms. The output frequency appears nearly insensitive to acoustic noise, particularly compared to an external cavity diode laser. We do observe a slow thermal drift of the seed laser, which is easily counteracted by a low bandwidth servo loop with an error signal provided by saturation spectroscopy of Rubidium with the doubled light. The 1560.48 nm seed is amplified by an IPG Photonics fiber amplifier with a maximum output power of 30 W. The amplified beam has a $1/e^2$ diameter of 1.1 mm and is linearly polarized.

Using a single plano-convex lens with a 50 mm focal length, this beam is focused into the centre of a 40 mm long periodically-poled lithium niobate (PPLN) crystal. The crystal is 1 mm thick and has five 1 mm wide gratings, each with a different domain period [20]. In this work we have used a grating with a $19.5 \mu\text{m}$ domain period. The crystal is housed inside a temperature-stabilized oven on a three-axis translation stage, and held at 81.60°C for optimal phase matching. The polarization of the light incident on the crystal is controlled using a $\lambda/2$ waveplate, which is optimized to achieve maximum doubling efficiency.

The linearly polarised 780 nm light exiting the crystal is filtered by two dichroic mirrors and collimated with a 100 mm lens. This light is analyzed via saturated absorption spectroscopy using rubidium vapor, which also provides the locking signal for the seed laser (a fibre modula-

tor is used to generate the necessary frequency sidebands for locking). The remaining 1560 nm light reflected by the dichroic mirrors can be used for dipole trapping. The optical setup is robust and compact, and does not require any active control of the optical components, with the exception of temperature-stabilizing the PPLN crystal.

3. Results

The power in the second harmonic is plotted as a function of input power in Fig. 2. A maximum efficiency of 36% is achieved, giving 11.4 W of output power at 780 nm. These data were taken without any adjustment of the crystal temperature or alignment. This efficiency compares very favourably with more complex and lower power cavity-enhanced doubling systems at these wavelengths [21]. The inset in Fig. 2 shows the spatial mode of the 780 nm light, after collimation from the doubler. By tuning the seed laser temperature and piezo, we can scan through all of the rubidium D₂ transitions without a noticeable change in power.

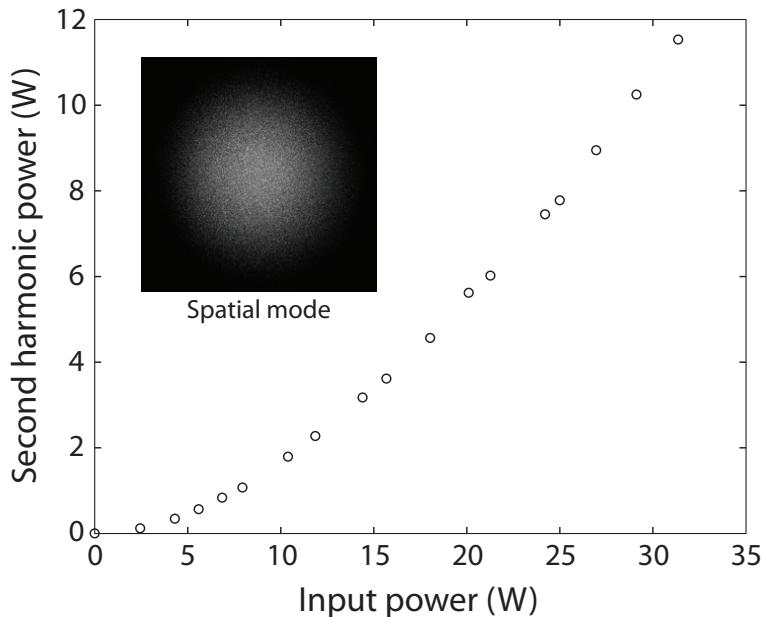


Fig. 2. Measured second harmonic power as a function of input power from a single 40 mm PPLN crystal. The maximum output power is 11.4 Watts at 780 nm. The inset shows the spatial mode of the output.

To measure the linewidth of the 780 nm beam, a small portion of output power is directed through a fiber-coupled electro-optic phase modulator (modulation frequency 50 MHz) and then into an acoustically isolated unequal path length Mach-Zehnder interferometer [22]. One arm of the interferometer is passed through a 10 m single-mode optical fibre, giving a fringe spacing of 21 MHz. The output of the interferometer is monitored on a fast photodetector, and demodulation and low-pass filtering is used to generate an error signal which can be straightforwardly calibrated to the fringe spacing. The frequency noise spectrum obtained at the zero-crossing of the error signal is given in Fig. 3. Above 10 kHz, the measurement is limited by detector and electronic noise, aside from a peak at 500 kHz which corresponds to a noise feature in the seed laser. By integrating the noise spectrum over the range plotted in Fig. 3, we determine the linewidth of the frequency-doubled light to be 6 kHz over 100 ms, which is comparable to that of the NPP seed laser specified as < 5 kHz.

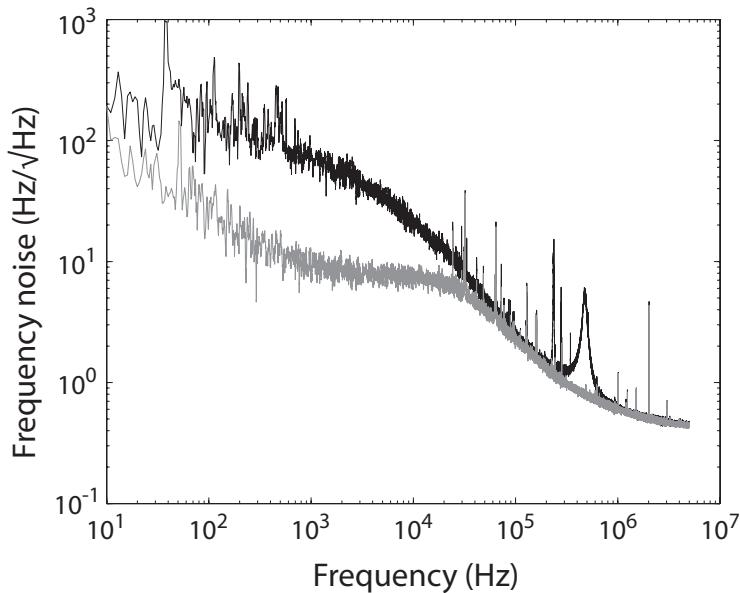


Fig. 3. Frequency noise spectrum measured using an unequal path length Mach-Zehnder interferometer as described in the text. The gray curve shows the detector noise. Integrating from 10 Hz to 5 MHz gives a linewidth of 6 kHz.

4. Conclusion

We have presented a frequency-doubled laser source at 780 nm, which provides over 11 W of continuous power in a high quality Gaussian mode with a linewidth of 6 kHz integrated over 100ms. We believe this to be the highest reported power at this wavelength. The system does not require locking to a high finesse cavity or using multiple crystals as in previous efficient frequency doubling experiments, which makes the apparatus robust and remarkably simple to set up. At the time of publication the laser has been in continuous use for greater than 2200 hours, with no decrease in power or realignment of the doubler required. This system has applications in a variety of atomic physics experiments, including for high-order Bragg diffraction in precision atom interferometry.

Acknowledgments

The authors would like to thank Tim Lam for his assistance with the linewidth measurement and Nikita Simakov for useful discussions. NPR thanks Nina and Alexander Robins for experimental support work. Specific product citations are for the purpose of clarification only and are not an endorsement by the authors or the ANU. This work was supported in part by the Australian Research Council Discovery program.