



Instituto de Física Teórica  
Universidade Estadual Paulista

---

---

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

## Universalidade em Sistemas de 3 e 4 Bósons

Daneele Saraçol Ventura

Orientador

*Marcelo Takeshi Yamashita*

Julho de 2011

# Agradecimentos

Agradeço à minha família, em especial à minha mãe Lúcia Saraçol, ao meu irmão Bruno Saraçol Ventura e aos meus avós Dilma e Valério Saraçol pelo apoio incondicional. Também agradeço a todos os meus tios, primos e aos meus sogros Izabel e Norberto Tusnski pelo carinho.

Ao meu noivo Luis Ricardo Tusnski por todas as conversas, conselhos e apoio em todos os momentos.

Ao meu orientador, Marcelo Yamashita, pela dedicação e presença constantes.

Aos professores Yasuyuki Suzuki, Tobias Frederico e Lauro Tomio pelas discussões e orientações que foram muito importantes para o desenvolvimento deste trabalho.

Por fim, à CAPES pelo apoio financeiro e ao IFT por ter dado as condições para a realização deste trabalho.

# Resumo

Neste trabalho investigamos a universalidade em sistemas de três e quatro bósons através do cálculo das suas energias de ligação e dos raios quadráticos médios. Utilizando duas funções de escala calculadas com um potencial de alcance zero e um potencial de alcance finito corrigimos em primeira ordem em  $r_0/a$  ( $r_0$  e  $a$  são, respectivamente, o alcance efetivo do potencial e o comprimento de espalhamento de dois corpos) o ponto onde os estados excitados de três corpos desaparecem. Estudamos também as estruturas dos estados de quatro corpos associados ao estado fundamental de três corpos para energia de dois corpos igual a zero. Esses estados são formados predominantemente por uma configuração do tipo 3+1. Os cálculos foram realizados no espaço das configurações usando um método variacional.

**Palavras-chave:** Poucos corpos; Universalidade; Efeito de alcance; Método variacional

**Áreas do conhecimento:** Física de Poucos Corpos; Física de Efimov

# Abstract

In this work we investigated the universality in three- and four-boson systems calculating their energies and root-mean-square radii. Using two scaling functions calculated with a zero and a finite range potentials, we corrected to first order in  $r_0/a$  ( $r_0$  and  $a$  are, respectively, the effective range of the potential and the two-body scattering length) the point where the three-body excited states disappear. We also studied the structures of the four-body states tied to the three-body ground state for a two-body energy equal zero. These states are predominantly composed by a 3+1 configuration. The calculations were performed in the configuration space using a variational method.

**Keywords:** Few Body; Universality; Range Effect; Variational Method

**Areas of knowledge:** Few-body systems; Efimov Physics

## Lista de Figuras

1	Sistemas de Coordenadas . . . . .	10
2	Fluxograma do método variacional estocástico. . . . .	16
3	Estado fundamental do sistema de três partículas $\alpha$ em função do tamanho da base. . . . .	17
4	Sistema de quatro corpos considerando seis coordenadas relativas. . .	20
5	Amplitude do tipo K e H . . . . .	20
6	Estado fundamental e primeiro estado excitado do sistema de quatro partículas $\alpha$ em função do tamanho da base. . . . .	24
7	Energias dos estados ligados de três bósons. . . . .	31
8	Diferença entre as curvas de alcance zero e alcance finito. . . . .	32
9	Representa uma ressonância de Feshbach. . . . .	34
10	Amplitude espectroscópica para o caso em que os sistemas de três e quatro corpos estão sob o potencial $V_1$ . . . . .	42
11	Amplitude espectroscópica para o caso em que os sistemas de três e quatro corpos estão sob o potencial $V_2$ . . . . .	43
12	Gráfico da amplitude espectroscópica reescalado de forma que $\bar{Y}(r)$ e $\bar{r}$ são adimensionais para as funções dos estados fundamentais de três e quatro corpos. . . . .	44
13	Gráfico da amplitude espectroscópica reescalado de forma que $\bar{Y}(r)$ e $\bar{r}$ são adimensionais para as funções do estado fundamental de três e primeiro estado excitado de quatro corpos. . . . .	45

## Lista de Tabelas

1	Exemplo do processo de Refinamento . . . . .	18
2	Energias e raios quadráticos médios de uma alfa até o centro de massa dos sistemas de duas, três e quatro partículas alfas. . . . .	23
3	Resultados das energias e raios quadráticos médios de uma partícula até o centro de massa do sistema para os estados fundamental e excitado de três bósons idênticos sob o potencial $V_1$ e $V_2$ . . . . .	29
4	Energias de ligação e raios quadráticos médios de uma partícula até o centro de massa do sistema para os estados fundamentais e excitados dos sistemas de três e quatro bósons interagindo através do potencial $V_1$ e $V_2$ . . . . .	37
5	Razão das energias e raios quadráticos médios de uma partícula até o centro de massa dos estados fundamental e excitado de três bósons sob o potencial $V_1$ e $V_2$ . . . . .	37
6	Razão entre as energias de ligação do estado fundamental e primeiro estado excitado de quatro corpos com a energia do estado fundamental de três corpos sob o potencial $V_1$ e $V_2$ . . . . .	38

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Método Variacional</b>	<b>5</b>
2.1	Princípio Variacional . . . . .	6
2.2	Método Variacional Estocástico . . . . .	14
2.2.1	Otimização da Base . . . . .	15
2.2.2	Refinamento . . . . .	17
2.2.3	Otimização dos estados excitados . . . . .	18
2.3	Progressão Geométrica . . . . .	19
2.3.1	Quatro corpos - H e K . . . . .	20
2.3.1.1	Função base tipo K . . . . .	20
2.3.1.2	Função base tipo H . . . . .	21
2.4	Exemplo de Aplicação: Partículas Alfas . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Efeito de Alcance e Universalidade</b>	<b>25</b>
3.1	Universalidade . . . . .	25
3.1.1	Efeito Efimov e Colapso Thomas . . . . .	27
3.2	Efeito de alcance - Alcance zero e Finito . . . . .	30
3.3	Ressonância de Feshbach e Armadilhas . . . . .	33

<b>4</b>	<b>Estrutura dos estados ligados de quatro bósons para <math>E_2 = 0</math></b>	<b>35</b>
4.1	Energias de ligação de três e quatro bósons . . . . .	36
4.2	Amplitude Espectroscópica . . . . .	38
4.2.1	Resultados da Amplitude Espectroscópica . . . . .	41
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>46</b>
	<b>Referências</b>	<b>49</b>
	<b>Apêndice A – Elementos de Matriz</b>	<b>53</b>
A.1	Overlap . . . . .	53
A.2	Energia Cinética . . . . .	55
A.3	Potencial . . . . .	59
A.3.1	Potencial de Ali-Bodmer . . . . .	61
A.3.2	Potencial Gaussiano . . . . .	61
A.3.3	Potencial de Coulomb . . . . .	62
A.3.4	Poço de potencial . . . . .	62
A.4	Raio Quadrático Médio . . . . .	63
	<b>Apêndice B – Comprimento de Espalhamento</b>	<b>65</b>
	<b>Apêndice C – Método Numerov</b>	<b>67</b>



# Capítulo 1

## Introdução

Diferentemente de uma aproximação do tipo campo médio, onde não olhamos os constituintes do sistema como entidades individuais, podemos classificar como sistemas de poucos corpos aqueles formados por um número pequeno de constituintes bem definidos. Este número pode variar dependendo das limitações computacionais e técnicas para resolver os problemas, tal como descrito em [Yamashita, 2008]. Desta forma, baseados neste trabalho, podemos chamar de poucos corpos sistemas com até quatro partículas, muito embora vários trabalhos tenham sido feitos para cinco e seis corpos [Yamashita et al., 2010].

Obviamente, esses sistemas possuem características diferentes dependendo do número de seus constituintes. Assim, na grande maioria dos casos, se conhecemos os observáveis de um sistema de  $N$  corpos não podemos imediatamente inferir sobre todas as características de um sistema de  $N + 1$  corpos, pois este terá suas próprias peculiaridades. Uma das causas desse comportamento é o aumento do número de correlações entre as partículas, ou seja, como as partículas interagem entre si.

Um dos trabalhos fundamentais que aborda as correlações existentes entre sistemas de poucos nucleons é o trabalho de Thomas [Thomas, 1935]. Thomas verificou que a energia do trítio tende para infinito quando o alcance da interação de dois corpos (nêutron-próton) tende a zero com uma energia de ligação de dois corpos fixa. Atualmente esse efeito é chamado de colapso Thomas e está intimamente ligado ao acúmulo de estados de três corpos quando a energia de ligação de dois corpos é zero - conhecido como efeito Efimov [Efimov, 1970]. Esses estados de três corpos são fracamente ligados e caracterizam-se principalmente por possuírem um comprimento

de espalhamento de dois corpos,  $a$ , que se estende muito além do alcance efetivo do potencial,  $r_0$ . Desta maneira, a conexão entre o efeito Efimov e o colapso Thomas pode ser feita imediatamente observando-se que em ambos os casos é necessário que a relação  $\frac{a}{r_0} \gg 1$  seja satisfeita [Frederico et al., 1999]. A diferença é que no colapso Thomas o alcance da interação tende a zero e no efeito Efimov o comprimento de espalhamento\* tende a infinito. Vale ressaltar que esses efeitos acontecem somente na dimensão  $d = 3$ , sendo que para o efeito Efimov ocorrer é necessário que ao menos dois dos subsistemas de dois corpos tenham um comprimento de espalhamento infinito [Nielsen et al., 2001].

Através do estudo desses efeitos podemos perceber que quando a função de onda se estende muito além do alcance da interação temos propriedades que são independentes dos detalhes do potencial de curto alcance, além disso, essas propriedades dependem de poucos parâmetros. Assim, foram introduzidos dois conceitos na física de poucos corpos: escala e universalidade. Escala é um grupo de algumas quantidades físicas como, por exemplo, as energias de ligação do sistema, que governam o comportamento dos observáveis no sistema [Frederico et al., 1999]. Discussões interessantes envolvendo escalas surgem quando consideramos sistemas fracamente ligados. Esses sistemas são principalmente descritos pela cauda da função de onda e não dependem da forma do potencial de interação entre as partículas [Delfino et al., 2000, Jensen et al., 2004]. Neste contexto, o termo universalidade se refere a propriedades do sistema que não dependem dos detalhes da interação [Frederico et al., 2011], ou seja, alguns sistemas que são diferentes a curtas distâncias possuem um comportamento idêntico a longas [Braaten & Hammer, 2006]. A universalidade geralmente está presente em sistemas em que o comprimento de espalhamento é muito maior que o alcance da interação, ou seja, sistemas fracamente ligados interagindo através de um potencial de curto alcance, como por exemplo, sob um potencial do tipo poço quadrado [Jensen et al., 1997]. Podemos colocar que os conceitos de universalidade e invariância de escala resumem o nosso entendimento da subárea da física quântica que ficou conhecida como “Física de Efimov” [Yamashita et al., 2010, Frederico et al., 2011].

Vários trabalhos, considerados hoje como marcos do estudo de universalidade e correlações entre os observáveis, se seguiram ao estudo de Thomas. O trabalho de

---

\*Ver apêndice B.

Phillips [Phillips, 1968] trata das correlações entre as energias de ligação do trítio e do comprimento de espalhamento nucleon-déuteron para o estado dubleto. Essa correlação independe do tipo de potencial utilizado desde que este reproduza os mesmos observáveis de baixas energias de dois nucleons. Outra correlação interessante foi tratada por Coester [Coester et al., 1970], estudando a energia de ligação da matéria nuclear para diferentes potenciais de dois corpos que reproduzem o mesmo deslocamento de fase. E em [Tjon, 1975] temos uma correlação entre observáveis de três e quatro nucleons, onde foram consideradas as energias de ligação de partículas alfas e do trítio com diferentes interações de dois corpos. Hoje, mencionamos as figuras principais destes trabalhos como as linhas de Phillips, Coester e Tjon.

O estudo das correlações e do efeito Efimov não se resume apenas a sistemas de três corpos, ele também aparece em sistemas com um número maior de constituintes. Recentemente J. von Stecher, D’Incao e Greener [von Stecher et al., 2009] afirmaram que abaixo de cada estado Efimov existem dois estados de quatro corpos universais tendo as energias uma razão fixa com o respectivo estado ligado de três corpos. Esses resultados foram parcialmente observados no experimento da referência [Ferlandino et al., 2009], que também concorda de certa maneira com os resultados da referência [Platter et al., 2004], onde foi mostrado que são necessárias apenas as escalas de dois e três corpos para descrever os observáveis de quatro corpos. Esta análise, porém, pode ser um caso particular de uma situação muito mais geral que ocorre quando o sistema de quatro corpos está próximo à ressonância de Feshbach [Chin et al., 2010, Nakajima et al., 2010]. Neste caso, pode aparecer uma nova escala de quatro corpos independente do sistema de três corpos [Yamashita et al., 2006, Hadizadeh et al., 2011] e a relação universal encontrada em [von Stecher et al., 2009] será modificada.

Neste trabalho temos como objetivo entender como se comportam as correlações entre os observáveis de sistemas de poucos corpos. Para isso, vamos estudar a universalidade em sistemas de três e quatro bósons idênticos usando um método variacional considerando o momento angular total igual a zero ( $L = 0$ ). A utilização apenas da onda  $S$  para o estudo de sistemas fracamente ligados de poucos corpos tem sido feita frequentemente, já que, além de simplificar o problema consideravelmente, ela ainda permite uma compreensão satisfatória de toda a física envolvida. O formalismo que utilizaremos neste trabalho será feito no espaço das coordenadas.

Isto, de certa maneira, facilita a visualização do problema, já que estamos lidando diretamente com as distâncias entre as partículas e não com os momentos.

Esta dissertação está organizada da seguinte maneira. No capítulo 2 vamos tratar do método variacional mostrando as bases matemáticas do princípio variacional. Depois usaremos o método variacional e discutiremos duas maneiras de realizar a escolha da base, estocástica e progressão geométrica, para minimizar os autovalores da equação de Schrödinger. Apresentaremos, também, cálculos de observáveis de sistemas de duas, três e quatro partículas alfas que realizamos para verificar os programas numéricos que construímos.

Já no capítulo 3 vamos falar da universalidade e sua importância em sistemas de poucos corpos. Também trataremos de dois efeitos importantes que aparecem em sistemas de poucos corpos fracamente ligados, o efeito Efimov e o colapso Thomas, que mencionamos anteriormente. E ainda mostraremos uma expressão retirada dos nossos cálculos que fornece a correção de alcance nos resultados de alcance zero.

No capítulo 4 mostraremos os nossos resultados para as energias de ligação e raios quadráticos médios de sistemas de três e quatro corpos para energia de dois corpos igual a zero. A universalidade desses sistemas é testada utilizando-se dois potenciais gaussianos: um puramente atrativo e outro com uma leve repulsão a curtas distâncias. Através do cálculo das amplitudes espectroscópicas investigamos a possível aglomeração dos estados de quatro corpos em uma configuração do tipo  $3+1$ .

Por fim, no último capítulo, colocamos as conclusões a que chegamos com este trabalho.

## Capítulo 2

### Método Variacional

Existem vários métodos para resolver a equação de Schrödinger. Todavia, a solução exata desta equação depende de condições bem especiais o que geralmente não é possível quando se deseja resolver algum problema mais “realístico”. Nesses casos, necessitamos de algum método de aproximação, que em geral, são divididos em dois grupos: os métodos perturbativos e os métodos não perturbativos.

Os métodos perturbativos têm como base uma expansão em série de potências de algum parâmetro que possa ser considerado “pequeno”. O objetivo destes métodos é estabelecer um conjunto de procedimentos que permita escrever expansões desse tipo independentemente do uso da solução exata [de Toledo Piza, 2003].

Dentro do grupo dos métodos não perturbativos temos o método variacional que trataremos neste capítulo. Diferentemente dos métodos perturbativos, no método variacional não é necessário identificarmos parâmetros “pequenos” para guiar a busca pela melhor solução, pois em geral o método variacional é aplicado quando a solução exata do problema considerado pode ser caracterizada através de uma condição de extremo. As dificuldades que surgem nesse método estão relacionadas com a verificação da convergência.

Neste capítulo vamos detalhar o método variacional utilizado. Na primeira seção apresentaremos as bases matemáticas do princípio variacional. Nas seções 2.2 e 2.3 discutiremos duas maneiras de realizar a escolha da base para minimizar os autovalores da equação de Schrödinger: estocasticamente e através de uma progressão geométrica. E finalizando este capítulo vamos exemplificar o método variacional estocástico usando sistemas de dois, três e quatro partículas alfas.

## 2.1 Princípio Variacional

Considerando um sistema físico arbitrário descrito por um Hamiltoniano ( $H$ ) independente do tempo, hermitiano e assumindo que o seu espectro é discreto e não degenerado, podemos escrever que:

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle , \quad (2.1)$$

onde:  $n = 0, 1, 2, \dots$  e as energias  $E_n$  são reais e ordenadas da seguinte forma  $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$

Apesar de conhecermos o Hamiltoniano do sistema, nem sempre conhecemos  $E_n$  e nem  $\phi_n$ , o que nos impede de diagonalizarmos  $H$  exatamente. Isto é uma das principais dificuldades encontradas na solução de alguns problemas. Como veremos a seguir, é para esses casos que o método variacional se torna muito útil. O método variacional está baseado principalmente no teorema de Ritz e no teorema de Ritz generalizado [Cohen-Tannoudji et al., 1977, Suzuki, 1998].

**Teorema 2.1.1** (*Teorema de Ritz*) Para uma função arbitrária  $\Psi$  no espaço de estado do sistema o valor esperado (valor médio) de  $H$  no estado  $\Psi$  é tal que:

$$E \equiv \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0 , \quad (2.2)$$

onde a igualdade é satisfeita se e somente se  $\Psi$  é autoestado de  $H$  com autovalor  $E_0$  (energia do estado fundamental).

**Prova** Vamos expandir a função  $\Psi$  numa base de autoestados  $\{|\phi_n\rangle\}$  de  $H$  com autovalores  $E_n$ :

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle . \quad (2.3)$$

Assim, com o auxílio da expressão 2.2 podemos escrever que:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 , \quad (2.4)$$

com  $\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2$ .

Para a desigualdade 2.4 ser uma igualdade é necessário e suficiente que todos os

coeficientes  $c_n$  sejam nulos exceto  $c_0$ . Portanto,  $|\Psi\rangle$  é autovetor de  $H$  com autovalor  $E_0$ .

Este teorema mostra que para determinar a energia do estado fundamental  $E_0$  nós podemos minimizar o valor médio de  $H$ , ou seja, escolhemos uma família de funções  $\phi(\alpha)$  que são caracterizadas por um número finito de parâmetros denotados por  $\alpha$ . O valor médio  $E(\alpha)$  do Hamiltoniano dessa função teste é determinado minimizando  $E(\alpha)$  com respeito a  $\alpha$ . Dessa forma, obtemos o valor mínimo de  $E(\alpha)$  que é uma aproximação da energia do estado fundamental  $E_0$ .

O teorema de Ritz não nos garante que o método variacional é válido para os estados excitados. Isto é assegurado pelo teorema de Ritz generalizado que será mostrado a seguir.

**Teorema 2.1.2** (*Generalização do teorema de Ritz*) *O valor esperado do Hamiltoniano  $H$  é estacionário na vizinhança dos seus autovalores discretos.*

**Prova** Vamos calcular o diferencial  $\delta E$  usando a média  $E\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Psi|H|\Psi\rangle$  quando  $\Psi$  é transformado por  $\Psi + \delta\Psi$ , onde  $\delta\Psi$  é uma variação infinitesimal em  $\Psi$ .

Diferenciando ambos os lados de  $E\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Psi|H|\Psi\rangle$ , temos:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle\delta E + E\langle\delta\Psi|\Psi\rangle + E\langle\Psi|\delta\Psi\rangle = \langle\delta\Psi|H|\Psi\rangle + \langle\Psi|H|\delta\Psi\rangle, \quad (2.5)$$

ou seja:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle\delta E = \langle\delta\Psi|H - E|\Psi\rangle + \langle\Psi|H - E|\delta\Psi\rangle. \quad (2.6)$$

Se o valor médio é estacionário  $\delta E = 0$ , portanto, da equação 2.6 obtemos:

$$\langle\delta\Psi|H - E|\Psi\rangle + \langle\Psi|H - E|\delta\Psi\rangle = 0. \quad (2.7)$$

Definindo  $|\varphi\rangle = [H - E]|\Psi\rangle$  e substituindo na expressão acima, obtemos:  $\langle\delta\Psi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\delta\Psi\rangle = 0$ . Como esta relação deve ser satisfeita para qualquer conjunto infinitesimal de  $|\delta\Psi\rangle$ , vamos escolher  $|\delta\Psi\rangle = \delta\lambda|\varphi\rangle$ , onde  $\delta\lambda$  é um número real e infinitesimal.

Assim, podemos escrever a equação 2.7 da seguinte forma:

$$2\langle\varphi|\varphi\rangle\delta\lambda = 0 \implies \langle\varphi|\varphi\rangle = 0 .$$

Portanto,  $[H - E]|\Psi\rangle = 0$  o que implica que  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ . Assim, o valor médio  $E$  é estacionário como queríamos provar. Consequentemente o método variacional pode ser generalizado e aplicado para determinar aproximadamente os autovalores de  $H$  [Cohen-Tannoudji et al., 1977].

Vamos, então, expandir a função de onda do sistema numa combinação linear de funções testes do tipo:

$$\Psi = \sum_{k=1}^{N_B} c_k \phi(\alpha_k) , \quad (2.8)$$

sendo  $N_B$  o número total de bases, funções testes, que combinamos. O método variacional reduz-se, portanto, a um problema de autovalores do Hamiltoniano num espaço de vetor de estado  $\nu_{N_B}$  expandido por um conjunto  $\phi(\alpha_1), \dots, \phi(\alpha_{N_B})$ , ou seja, a um espaço composto por todas as combinações lineares de  $\phi(\alpha_1), \dots, \phi(\alpha_{N_B})$ .

Assim, substituindo 2.8 em 2.2 temos que o valor médio de  $E$  é dado por:

$$E = \frac{c^\dagger H c}{c^\dagger B c} \quad \text{ou} \quad E = \frac{\sum_{i,j} c_i c_j h_{ij}}{\sum_{i,j} c_i c_j b_{ij}} , \quad (2.9)$$

$$\text{onde } h_{ij} = \langle\phi(\alpha_i)|H|\phi(\alpha_j)\rangle \quad \text{e} \quad b_{ij} = \langle\phi(\alpha_i)|\phi(\alpha_j)\rangle . \quad (2.10)$$

A condição de que  $E$  seja estacionário com respeito a uma troca infinitesimal e arbitrária de  $c_k$  leva a um problema de autovalor generalizado do tipo:

$$Hc = EBc \quad ; \quad \sum_{j=1}^{N_B} (h_{ij} - Eb_{ij})c_j = 0 . \quad (2.11)$$

Assim, os parâmetros  $c_{k's}$  podem, então, ser determinado resolvendo-se o problema de autovalor generalizado dado pela equação 2.11.

Vamos considerar agora um sistema independente do tempo com  $N_P$  bósons com massas  $m_1, m_2, \dots, m_{N_P}$  e sendo  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_P}$  os vetores posição das partículas. O



Hamiltoniano pode ser escrito da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^{N_P} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} - T_{cm} + \sum_{j>i=1}^{N_P} V_{ij} , \quad (2.12)$$

onde  $T_{cm}$  é a energia cinética do centro de massa que foi subtraída da energia cinética total.  $V_{ij}$  é o potencial que descreve as interações entre as partículas  $i$  e  $j$ .

Como a função de onda  $\psi$  descreve um sistema de  $N_P$  bósons indistinguíveis ela deve ser simetrizada. A função de onda pode ser escrita como uma soma de funções  $\phi_k$  escolhidas convenientemente:

$$\Psi = \sum_{k=1}^{N_B} N c_k S \phi_k , \quad (2.13)$$

onde  $N$  é a normalização,  $c_k$  são os coeficientes da expansão,  $S$  é o operador que faz a simetrização da função de onda e  $N_B$  é o tamanho da base. A base  $\{\Phi_k\}$  pode ser composta, a princípio, por qualquer função, mas dependendo da função escolhida se torna muito difícil calcular os elementos de matriz de 2.10. Para resolver de forma analítica esses elementos de matriz, o que otimiza o tempo computacional, escolhemos uma base gaussiana.

Então, podemos escrever  $\{\Phi_k\}$  como um produto das funções de onda dos pares de partículas, ou seja:

$$\phi_k = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{j<i=1}^{N_P} \alpha_{ij}^{(k)} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \right] , \quad (2.14)$$

onde os parâmetros variacionais  $\alpha_{ij}$  estão relacionados com a extensão da função de onda de cada par de partículas  $ij$ .

As equações anteriores estão escritas em termos das coordenadas das partículas ( $\vec{r}$ ). Trabalhar nestas coordenadas é vantajoso quando queremos entender o comportamento de cada partícula individualmente, porém o nosso objetivo é entender as correlações entre os constituintes do sistema. Neste caso, é mais vantajoso utilizarmos as coordenadas de Jacobi. A transformação das coordenadas de partícula única para as coordenadas de Jacobi ( $\vec{x}$ ) será tratada a seguir.

Na figura 1 temos o exemplo das (a) coordenadas das partículas e (b) o sistema de

coordenadas de Jacobi, também conhecida como coordenadas relativas, num sistema de 3 corpos.

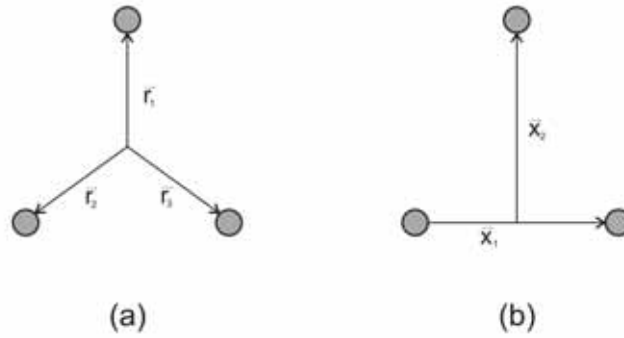


Figura 1: Sistemas de Coordenadas:(a)Das partículas; (b) De Jacobi.

Para fazer a transformação de coordenadas vamos usar as seguintes relações [Suzuki, 1998]:

$$\vec{x}_i = \sum_{j=1}^{N_P} U_{ij} \vec{r}_j \quad \text{e} \quad \vec{r}_i = \sum_{j=1}^{N_P} (U^{-1})_{ij} \vec{x}_j, \quad (2.15)$$

sendo que a matriz de transformação e a matriz inversa são dadas por:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{m_1}{m_{12}} & \frac{m_2}{m_{12}} & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ \frac{m_1}{m_{12\dots N_P-1}} & \frac{m_2}{m_{12\dots N_P-1}} & \dots & \dots & -1 \\ \frac{m_1}{m_{12\dots N_P}} & \frac{m_2}{m_{12\dots N_P}} & \dots & \dots & \frac{m_{N_P}}{m_{12\dots N_P}} \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

$$U^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{m_2}{m_{12}} & \frac{m_3}{m_{123}} & \dots & \frac{m_{N_P}}{m_{12\dots N_P}} & 1 \\ -\frac{m_1}{m_{12}} & \frac{m_3}{m_{123}} & \dots & \frac{m_{N_P}}{m_{12\dots N_P}} & 1 \\ 0 & -\frac{m_{12}}{m_{123}} & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -\frac{m_{12\dots N_P-1}}{m_{12\dots N_P}} & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

onde  $m_{123\dots} = m_1 + m_2 + m_3 + \dots$

Usando as relações 2.15, podemos escrever da seguinte forma o vetor distância

$\vec{r}_i - \vec{r}_j$ :

$$\vec{r}_i - \vec{r}_j = \sum_{k=1}^{N_P} (U^{-1})_{ik} \vec{x}_k - \sum_{k=1}^{N_P} (U^{-1})_{jk} \vec{x}_k \quad (2.18)$$

$$= \sum_{k=1}^{N_P-1} ((U^{-1})_{ik} - (U^{-1})_{jk}) \vec{x}_k \equiv \widetilde{W}^{(ij)} \mathbf{x}, \quad (2.19)$$

sendo  $\widetilde{W}^{(ij)}$  a matriz de transformação do vetor distância,  $\widetilde{\mathbf{x}} = \left( \vec{x}_1 \quad \vec{x}_2 \quad \dots \quad \vec{x}_{N_P-1} \right)$  e o símbolo  $\sim$  significa a transposta.

Com isto, a exponencial da equação 2.14, que iremos usar mais adiante, pode ser escrita em termos das coordenadas de Jacobi como:

$$\phi_k = \exp \left( \sum_{j>i=1}^{N_P} \alpha_{ij}^{(k)} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \right) = \exp \left[ \widetilde{\mathbf{x}} \left( \sum_{j>i=1}^{N_P} \alpha_{ij} W^{(ij)} \widetilde{W}^{(ij)} \right) \mathbf{x} \right], \quad (2.20)$$

ou numa forma mais compacta:

$$\phi_k = e^{-\frac{1}{2} \widetilde{\mathbf{x}} \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{x}}, \quad (2.21)$$

$$\text{onde: } \mathbf{A}^{(k)} = \sum_{j>i=1}^{N_P} \alpha_{ij}^{(k)} W^{(ij)} \widetilde{W}^{(ij)}. \quad (2.22)$$

Portanto, a matriz  $\mathbf{A}$  contém os parâmetros variacionais  $\alpha_{ij}$ . Exemplificando, vamos mostrar  $\mathbf{A}$  no caso de um sistema de três corpos ( $N_P = 3$ ):

$$\mathbf{A} = \alpha_{12} [W^{(12)} \widetilde{W}^{(12)}] + \alpha_{13} [W^{(13)} \widetilde{W}^{(13)}] + \alpha_{23} [W^{(23)} \widetilde{W}^{(23)}], \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A} = & \alpha_{12} \begin{bmatrix} \frac{m_2+m_1}{m_{12}} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \alpha_{13} \begin{bmatrix} \left( \frac{m_2}{m_{12}} \right)^2 & \frac{m_2}{m_{12}} \left( \frac{m_3+m_{12}}{m_{123}} \right) \\ \frac{m_2}{m_{12}} \left( \frac{m_3+m_{12}}{m_{123}} \right) & \left( \frac{m_3+m_{12}}{m_{123}} \right)^2 \end{bmatrix} \\ & + \alpha_{23} \begin{bmatrix} \left( \frac{m_1}{m_{12}} \right)^2 & -\frac{m_1}{m_{12}} \left( \frac{m_3+m_{12}}{m_{123}} \right) \\ -\frac{m_1}{m_{12}} \left( \frac{m_3+m_{12}}{m_{123}} \right) & \left( \frac{m_3+m_{12}}{m_{123}} \right)^2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Esta relação entre  $\mathbf{A}$  e  $\alpha$  será importante mais adiante para entendermos com mais clareza como usamos o método variacional para resolvermos os problemas de poucos corpos.

Agora falaremos sobre a simetrização da função de onda simbolizada por  $S$  na

relação 2.13. Neste trabalho trataremos apenas de sistemas formados por bósons idênticos, portanto a função de onda deve ser simétrica para a troca de duas partículas. Porém, é válido lembrar que se estivéssemos tratando de partículas fermiônicas idênticas teríamos que antissimetrizar a função de onda.

Para simetrizar a função de onda vamos usar uma combinação de permutações  $P$ , sendo  $P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N_P \\ p_1 & p_2 & \dots & p_{N_P} \end{pmatrix}$  um operador de permutação com uma fase adequada que transforma  $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{p_i}$  ( $i$  referente a posição e  $p_i$  referente a partícula  $i$ ) no sistema de coordenadas das partículas [Suzuki, 1998]:

$$P\vec{r} = T_P\vec{r}, \quad (2.24)$$

sendo que a matriz  $T_P$  é dada por  $(T_P)_{ij} = \delta_{jp_i}$  com  $(i, j = 1, \dots, N_P)$ .

Como vamos trabalhar no sistema de coordenadas de Jacobi é importante escrever esta permutação nas coordenadas relativas. Supondo que a permutação  $P$  nesta coordenada também seja uma transformação linear, temos:

$$P\vec{x} = T_P\vec{x}. \quad (2.25)$$

Partindo da equação 2.24 e usando a transformação de coordenadas 2.15, sabendo que  $(T_P)_{ij}$  é igual a  $\delta_{jp_i}$  para as coordenadas das partícula, obtemos:

$$(T_P)_{ij} = \sum_{k=1}^{N_P} U_{ik}(U^{-1})_{pkj}, \quad (2.26)$$

com  $i, j = 1, \dots, N_P - 1$  para o sistema de coordenadas de Jacobi.

Por exemplo, as matrizes  $T_P$  para o caso de um sistema de três partículas com massas idênticas são:

$$\begin{aligned} T_{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & T_{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ T_{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}} &= \begin{pmatrix} 1/2 & -1 \\ -3/4 & -1/2 \end{pmatrix}, & T_{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}} &= \begin{pmatrix} 1/2 & 1 \\ 3/4 & -1/2 \end{pmatrix}, & (2.27) \\ T_{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}} &= \begin{pmatrix} -1/2 & 1 \\ -3/4 & -1/2 \end{pmatrix}, & T_{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}} &= \begin{pmatrix} -1/2 & -1 \\ 3/4 & -1/2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Como já sabemos escrever  $\phi$  em termos das coordenadas de Jacobi, como vimos na relação 2.21, e sabemos como simetrizar a função de onda de  $N_P$  bósons, podemos escrever a função de onda 2.13 da seguinte forma:

$$\Psi = \sum_{k=1}^{N_B} N c_k S e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{x}} A^{(k)} \mathbf{x}}, \quad (2.28)$$

onde  $A = \sum_{j>i=1}^{N_P} \alpha_{ij} W^{(ij)} \widetilde{W^{(ij)}}$  é uma matriz com dimensão  $(N_P - 1) \times (N_P - 1)$ . Notamos que os elementos da diagonal de  $\mathbf{A}$  correspondem a parâmetros não lineares da função base  $(\vec{x}_i \cdot \vec{x}_i)$  e os demais parâmetros  $(\vec{x}_i \cdot \vec{x}_j$  com  $i \neq j$ ) representam as correlações entre as coordenadas relativas das partículas.

Assim, podemos calcular o overlap  $(b_{ij})$  e os elementos de matriz do Hamiltoniano  $h_{ij}$  para termos a equação de autovalor 2.11 do sistema de  $N_P$  bósons com momento angular total igual a zero,  $L = 0$  (sistema simetricamente esférico). Com este método também podemos tratar de problemas que não são simetricamente esféricos. Para isso teríamos que multiplicar a função de onda descrita na equação 2.28 por outra função que descrevesse o comportamento angular e orbital do sistema estudado. Além disso, poderíamos considerar os graus de liberdade internos do sistema, como spin, isospin, entre outros, desta mesma forma.

O overlap total é dado por  $B = \langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{N_B} N S c_i^\dagger c_j \langle \phi_i | \phi_j \rangle$ . Do apêndice A.1 da equação A.8, temos:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \left[ \frac{(2\pi)^{N_P-1}}{\det(A^{(i)} + A^{(j)})} \right]^{\frac{3}{2}}. \quad (2.29)$$

Agora vamos calcular o termo  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{N_B} N S c_i^\dagger c_j \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$ .

Como vimos anteriormente na equação 2.12 o Hamiltoniano pode ser escrito da seguinte forma:

$$H = \sum_{i=1}^{N_P} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} - T_{cm} + \sum_{j>i=1}^{N_P} V_{ij} = T - T_{cm} + V, \quad (2.30)$$

ou seja, um termo de energia cinética menos a energia cinética do centro de massa e um termo referente ao potencial.

Assim, podemos escrever que:

$$h_{ij} = h_{ij}^T + h_{ij}^V, \quad (2.31)$$

sendo:

$$h_{ij}^T = \langle \phi_i | T - T_{cm} | \phi_j \rangle \quad e \quad h_{ij}^V = \langle \phi_i | V | \phi_j \rangle. \quad (2.32)$$

Do apêndice A.2, temos:

$$h_{ij}^T = \frac{3\hbar^2}{2} \text{Tr}[A^{(j)}(A^{(i)} + A^{(j)})A^{(i)}\Lambda] \langle \phi_i | \phi_j \rangle \quad \text{onde} \quad \Lambda_{kl} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} U_{ki} U_{li}, \quad (2.33)$$

e do apêndice A.3, temos:

$$h_{ij}^V = \langle \phi_i | V(\vec{r}_n - \vec{r}_m) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int V(\vec{r}) e^{-\frac{1}{2}C_{nm}r^2} d\vec{r}, \quad (2.34)$$

sendo:  $\frac{1}{C_{nm}} = \widetilde{W^{(ij)}}(A^{(i)} + A^{(j)})^{-1}W^{(ij)}$ . Na equação 2.34 usamos a seguinte identidade:

$$\langle \phi_i | V(\vec{r}_n - \vec{r}_m) | \phi_j \rangle = \int d\vec{r} V(\vec{r}) \langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle. \quad (2.35)$$

Agora que já conhecemos  $b_{ij}$  e  $h_{ij}$ , temos a equação de autovalor do sistema ( $\sum_{j=1}^{N_B} (h_{ij} - E b_{ij}) c_j = 0$ ). Porém, não sabemos quem são os elementos da matriz  $\mathbf{A}$  ou os parâmetros  $\alpha_{ij}$ .

Nas próximas seções mostraremos dois métodos que podem ser usados para escolher os parâmetros  $\alpha_{ij}$ : o método variacional estocástico e a progressão geométrica.

## 2.2 Método Variacional Estocástico

Uma possibilidade para resolver os problemas de poucos corpos é simplesmente diagonalizar diretamente o Hamiltoniano. Neste caso, porém, para obtermos um bom resultado é necessário construir uma base grande o suficiente pra descrever todo o sistema e isso torna o processo de diagonalização do Hamiltoniano extremamente complicado. No método variacional que estamos utilizando o problema de uma base muito grande é contornado, de certa maneira, otimizando-se a base utilizada.

### 2.2.1 Otimização da Base

É importante ressaltar aqui que o sucesso do método variacional depende da escolha dos parâmetros da função  $\phi$  (base). Como já foi colocado, nós utilizamos neste trabalho uma base Gaussiana, pois com ela podemos calcular analiticamente os elementos de matriz como vimos nas equações 2.29, 2.33 e 2.34, o que otimiza o tempo computacional.

Também vimos que podemos escrever a função teste da seguinte forma:

$$\phi_k = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{j<i=1}^{N_P} \alpha_{ij}^{(k)} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \right] = e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{x}} \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{x}}. \quad (2.36)$$

Notemos que os elementos da matriz  $A$  são parâmetros não lineares da base e que essas funções  $\phi_k$  são esfericamente simétricas.

O principal problema da minimização de uma função, geralmente, é a onipresença de mínimos locais. Como o método variacional estocástico faz uma busca totalmente aleatória através da otimização das bases a probabilidade de encontrar o mínimo global é maior do que em outros métodos, mesmo quando o problema apresenta muitos mínimos locais [Cvijovic & Klinowski, 1995, Serra et al., 1997].

Agora vamos descrever o método variacional estocástico que utilizamos neste trabalho.

- Primeiramente sorteamos aleatoriamente os parâmetros  $\alpha_{ij}^{(k)}$  ( $j < i = 1, \dots, N_P$ ) dentro de um intervalo que corresponde ao “alcance” da função de onda que representa o par  $ij$  ( $\frac{1}{\sqrt{\alpha_{ij}}}$  corresponde à “distância” entre as partículas). Com o sorteio dos  $\alpha_{ij}$ , note que construímos uma matriz  $\mathbf{A}^{(k)}$ .
- Quando temos  $k \geq 2$ , ou seja, a partir do processo de otimização da segunda base, é necessário verificar a dependência linear das funções antes de calcular a energia. Assim, calculamos:

$$co = \frac{\langle \phi_n | \phi_k \rangle}{\sqrt{\langle \phi_n | \phi_n \rangle \langle \phi_k | \phi_k \rangle}}, \quad (2.37)$$

onde  $n = 1, \dots, k - 1$ .  $co$  tem que satisfazer a seguinte condição  $co \leq 0.99$  para

todo  $n$ . Se esta condição não for satisfeita sorteamos um novo conjunto de  $\alpha_{ij}^{(k)}$ , ou seja, voltamos ao primeiro passo.

- Calculamos o valor da energia.
- Depois sorteamos outro conjunto de  $\alpha_{ij}^{(k)}$ , construímos a matriz  $\mathbf{A}^{(k)}$ , calculamos a energia e comparamos com a anterior. Guardamos os elementos da matriz  $\mathbf{A}^{(k)}$  que forneceu a menor energia  $E$ .
- Depois de repetir o processo acima várias vezes, aumentamos a base para  $k+1$  mantendo a base anterior  $k$  com os elementos de matriz de  $\mathbf{A}$  que forneceram a menor energia.
- Repetimos todo o processo descrito acima até obter uma convergência suficiente para a energia.

Os passos acima estão expostos na figura 2 na forma de um fluxograma, para facilitar a visualização do método.

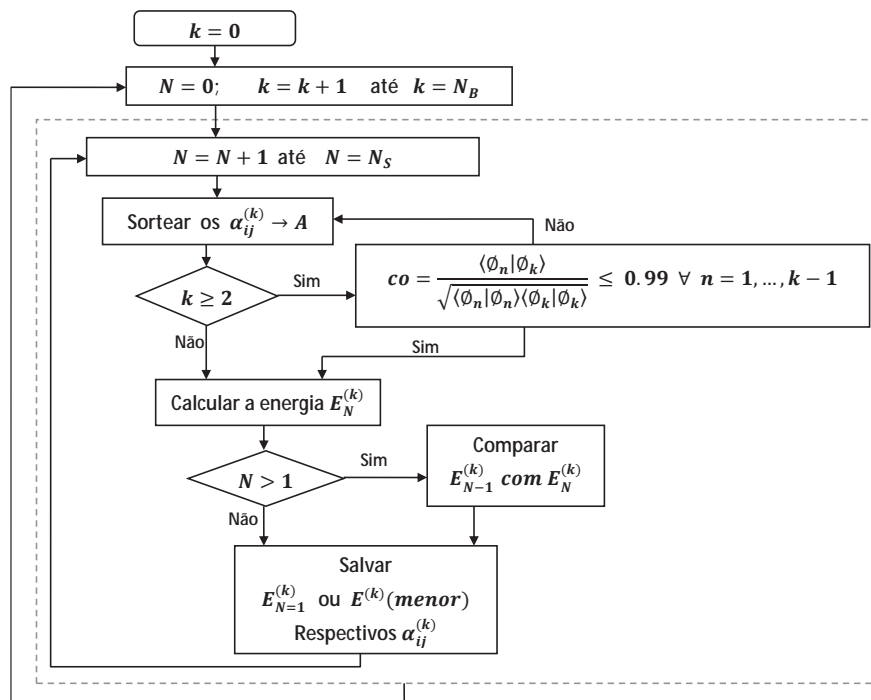


Figura 2: Fluxograma do método variacional estocástico.



Exemplificando esta parte do método, temos na figura 3 o comportamento da convergência de um sistema de três partículas alfas onde cada par interage através do potencial de Ali-Bodmer  $V_a(r) = 500e^{-(0.7r)^2} - 130e^{-(0.475r)^2}$  (MeV) [Ali & Bodmer, 1966], sendo  $r$  a distância entre as partículas alfas. Obtemos para a energia do estado fundamental o valor de  $-5.1807598\text{MeV}$  com boa convergência até a terceira casa decimal.

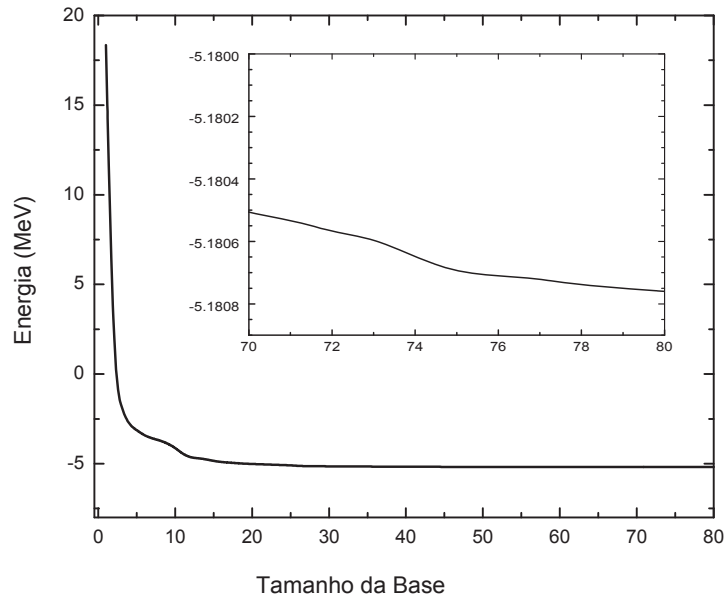


Figura 3: Estado fundamental do sistema de três partículas  $\alpha$  em função do tamanho da base. Na figura menor, que indica uma região ampliada do gráfico, notamos que a energia converge até a terceira casa decimal.

Com este processo obtemos resultados bem precisos, como veremos no exemplo da seção 2.4, mas se quisermos melhorar mais o nosso resultado, podemos fazer um processo chamado de refinamento que iremos tratar a seguir.

### 2.2.2 Refinamento

Como não podemos aumentar o tamanho da base infinitamente o processo de refinamento ajuda a obter um resultado mais acurado. Com o refinamento verificamos se cada base escolhida anteriormente é a melhor, ou seja, se podemos obter com outra base uma energia menor da que se tinha antes para aquele conjunto de

bases.

Quando terminamos o processo da seção anterior temos uma base com  $N_B$  gaussianas com seus parâmetros já selecionados. No refinamento vamos sortear novamente parâmetros  $\alpha_{ij}^{(k)}$ , para construir a matriz  $\mathbf{A}^{(k)}$  e testá-la no lugar de cada base  $k$  ( $k = 1, 2, \dots, N_B$ ), já determinada. Calculamos a energia e novamente comparamos com o valor que tínhamos anteriormente, se o novo resultado for menor que o anterior vamos substituir os parâmetros da base  $k$  por esses novos, senão vamos manter os elementos da matriz  $\mathbf{A}^{(k)}$  anteriores. Repetimos os mesmos passos até a base  $N_B$ .

Podemos também fazer este processo de refinamento várias vezes até obter a precisão desejada.

Fazendo este processo de refinamento no exemplo citado na seção anterior, temos os seguintes resultados:

Valor inicial	-5.1807598 MeV
Primeiro Refinamento	-5.1807803 MeV
Segundo Refinamento	-5.1807811 MeV

Tabela 1: Exemplo do processo de Refinamento

Notamos que o refinamento melhora o resultado por volta da quinta casa decimal. Nos casos que estamos tratando neste trabalho não precisamos de um resultado muito preciso, por isso não fizemos o processo de refinamento.

### 2.2.3 Otimização dos estados excitados

Quando estamos fazendo o processo de otimização para o estado fundamental, os autovalores dos estados excitados nem sempre serão um bom resultado, pois estamos analisando a convergência do estado fundamental e, portanto, não podemos afirmar nada sobre a convergência dos estados excitados.

Para resolver esta questão, quando construímos a função de onda nós inicialmente otimizamos para o estado fundamental e, depois que o resultado converge, continuamos inserindo termos na função de onda teste, só que agora otimizando para, por exemplo, o primeiro estado excitado. Como podemos ver na expressão a seguir:

$$\Psi^{(n)} = NS \left[ \underbrace{c_1^{(n)} \phi_1 + \dots + c_k^{(n)} \phi_k}_{\text{otimização estado fundamental}} + \underbrace{c_{k+1}^{(n)} \phi_{k+1} + \dots + c_{k+k'}^{(n)} \phi_{k+k'}}_{\text{otimização 1º estado excitado}} + \dots \right]$$

Isto é feito sucessivamente até obtermos todos os estados excitados que desejamos. Desta maneira asseguramos que as funções de onda do estado fundamental e dos estados excitados sejam mutuamente ortogonais.

## 2.3 Progressão Geométrica

Outra maneira de escolhermos a base é utilizando uma progressão geométrica. Vamos tratar da aplicação da progressão geométrica no caso em que não consideramos as correlações entre  $\vec{x}_i$  e  $\vec{x}_j$ . Portanto, a matriz  $A^{(k)}$  é diagonal e os elementos da diagonal principal são determinados pela seguinte progressão geométrica:

$$(A_p)_{ii} = \left( \frac{1}{a_i q_i^{l-1}} \right)^2, \quad (2.38)$$

onde  $i = 1, \dots, N_P - 1$ .

Uma vantagem desse método é que temos apenas dois parâmetros ( $a_i$  e  $q_i$ ) para escolher. Além disso, ele também é muito útil quando tratamos de sistemas que possuem uma função de onda muito estendida espacialmente.

Por exemplo, aplicando o método da progressão geométrica num sistema de três partículas alfas escolhendo  $a_{1,2} = 0.1$ ,  $q_{1,2} = 1.25$  e  $l = (1, \dots, 20) \Rightarrow N_B = 400$ , obtemos  $E_3^{(0)} = -5.1736$  MeV. Comparando com o resultado obtido na seção 2.2 ( $E_3^{(0)} = -5.18$  MeV), que foi usado o método variacional estocástico, vimos que temos uma diferença no valor da energia a partir da segunda casa decimal. Assim, se desejamos um resultado mais preciso é conveniente usarmos o método variacional estocástico, lembrando que este geralmente necessita de um maior tempo computacional do que a progressão geométrica.

A seguir vamos mostrar duas formas diferentes de considerar o sistema de coordenadas num problema de quatro partículas usando progressão geométrica.

### 2.3.1 Quatro corpos - H e K

No caso de um sistema de quatro corpos temos, em princípio, seis coordenadas relativas (ver figura 4), porém, podemos separar as coordenadas considerando as amplitudes  $H$  e  $K$  conforme a figura 5. Esta separação pode ser útil para verificarmos eventualmente a contribuição de cada configuração,  $K$  ou  $H$ , de maneira parecida com os cálculos que usualmente são feitos no espaço dos momentos utilizando as equações de Faddeev-Yakubovsky.

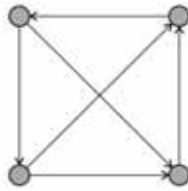


Figura 4: Sistema de quatro corpos considerando seis coordenadas relativas.

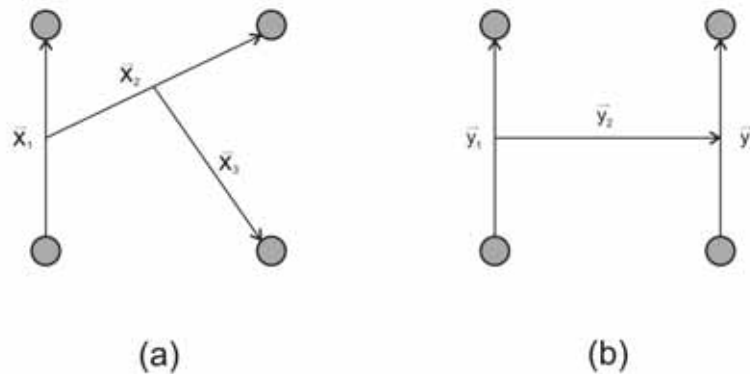


Figura 5: Amplitudes:(a) tipo K e (b) tipo H

#### 2.3.1.1 Função base tipo K

Primeiramente vamos escrever as coordenadas de Jacobi  $\vec{x}$  em termos das coordenadas das partículas  $\vec{r}$  para quatro massas idênticas:

$$\vec{x}_1 = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{x}_2 = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) - \vec{r}_3 \quad \text{e} \quad \vec{x}_3 = \frac{1}{3}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3) - \vec{r}_4. \quad (2.39)$$

A função base é definida como:

$$G_K(\mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}K\mathbf{x}\right), \quad (2.40)$$

onde  $K$  é uma matriz diagonal ( $K_{ij} = K_i\delta_{ij}$ ) e esses elementos são dados pela seguinte progressão geométrica:

$$(K^l)_{ii} = \left(\frac{1}{a_i q_i^{l-1}}\right)^2. \quad (2.41)$$

### 2.3.1.2 Função base tipo $H$

O sistema de coordenadas relativas de  $H$  é definida por  $\vec{y}$  e é escrita em termos de  $\vec{r}$  da seguinte forma:

$$\vec{y}_1 = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{y}_2 = \vec{r}_3 - \vec{r}_4 \quad \text{e} \quad \vec{y}_3 = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2 - \vec{r}_3 + \vec{r}_4). \quad (2.42)$$

A função base é dada por:

$$G_H(\mathbf{y}) = \exp\left(-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{y}}H\mathbf{y}\right), \quad (2.43)$$

onde  $H$  também é uma matriz diagonal  $H_{ij} = H_i\delta_{ij}$  e considerando a simetria do sistema podemos assumir que  $H_1 \leq H_2 \leq H_3$ .

Para facilitar as contas, podemos expressar  $G_H(\mathbf{y})$  nas coordenadas  $\vec{x}$  usando a seguinte relação que pode ser tirada das equações 2.39 e 2.42:

$$\begin{pmatrix} \vec{y}_1 \\ \vec{y}_2 \\ \vec{y}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 \\ 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \\ \vec{x}_3 \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

Assim,  $G_H(\vec{y}) = G_A(\vec{x})$  com:

$$A_{11} = H_1, \quad A_{22} = \frac{4}{9}(H_2 + H_3), \quad A_{33} = H_2 + \frac{1}{4}H_3, \quad (2.45)$$

$$A_{12} = A_{13} = 0 \quad \text{e} \quad A_{23} = \frac{1}{3}(-2H_2 + H_3). \quad (2.46)$$

## 2.4 Exemplo de Aplicação: Partículas Alfas

Nesta seção vamos mostrar os resultados das energias e dos raios quadráticos médios de sistemas de duas, três e quatro partículas alfas, obtidos com o método variacional estocástico descrito na seção 2.2. Neste caso, os sistemas interagem através do potencial de Ali-Bodmer [Ali & Bodmer, 1966] considerando apenas a onda  $S$  com momento angular orbital total igual a zero:

$$V_a(r) = 500e^{-(0.7r)^2} - 130e^{-(0.475r)^2} \quad (\text{MeV}) . \quad (2.47)$$

O elemento de matriz  $\langle \phi_i | V_a(\vec{r}) | \phi_j \rangle$ , calculado no apêndice A.3.1, é escrito por:

$$\langle \phi_i | V_a(\vec{r}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle (C_{nm})^{\frac{3}{2}} \left[ \frac{500}{(2 \times 0.7 + C_{nm})^{\frac{3}{2}}} - \frac{130}{(2 \times 0.474 + C_{nm})^{\frac{3}{2}}} \right] . \quad (2.48)$$

Para os sistemas de três e quatro corpos nós também incluímos o potencial de Coulomb:

$$V_c(r) = \frac{4e^2}{r} , \quad (2.49)$$

onde  $e$  é a carga da partícula  $\alpha$ .

Os elementos de matriz no caso do potencial de Coulomb são escritos como (ver apêndice A.3.3):

$$\langle \phi_i | V_c(\vec{r}) | \phi_j \rangle = 8e^2 \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (2.50)$$

O cálculo analítico dos elementos de matriz do raio quadrático médio “rms” ( $\sqrt{R^2}$ ) de uma partícula alfa em relação ao centro de massa podem ser vistos no apêndice A.4, eles resultam na seguinte expressão:

$$\sqrt{R_{N_P}^2} = \frac{N_P - 1}{N_P} \sqrt{\langle \Psi | \vec{x}_{N_P-1}^2 | \Psi \rangle} , \quad (2.51)$$

sendo:

$$\langle \phi_i | \vec{x}_{N_P-1}^2 | \phi_j \rangle = 3\text{Tr}[(A^{(i)} + A^{(j)})^{-1}F] \langle \phi_i | \phi_j \rangle . \quad (2.52)$$

Os resultados para as energias de ligações e o raios quadráticos médios estão na tabela 2. Eles concordam com os resultados de [Suzuki & Takahashi, 2002].

$N_P$	Energia (MeV)		rms (fm)		Dimensão $N_B$	
	Este Trab.	Ref.[ST,02]	Este Trab.	Ref.[ST,02]	Este Trab.	Ref.[ST,02]
2	-1.3695	-1.3696	2.245	2.246	10	10
3	-5.18	-5.18	2.42	2.43	60	60
	-0.62*	-0.62*	2.63*	2.64*	120	140
	-1.38	-1.38	10.05	10.05	120	120
4	-11.21	-11.10	2.54	2.59	450	150
	-6.54*	-	2.58*	-	450	-
	-5.80	-5.76	3.57	3.66	450	450

Tabela 2: Energia e raio quadrático médio (rms) de uma alfa até o centro de massa do sistema de  $N_P$  alfas. O símbolo \* indica os resultados com o potencial de Ali-Bodmer + Coulomb para o estado fundamental. Para três e quatro alfas apresentamos também os resultados para o primeiro estado excitado. A última coluna mostra o tamanho da base utilizada. A referência [ST,02] é [Suzuki & Takahashi, 2002].

Na figura 6 vemos o comportamento da convergência da energia em relação ao tamanho da base num sistema de quatro alfas.

Esses cálculos preliminares foram realizados para desenvolvermos familiaridade com o método variacional e testarmos os programas numéricos que foram utilizados na realização deste trabalho.

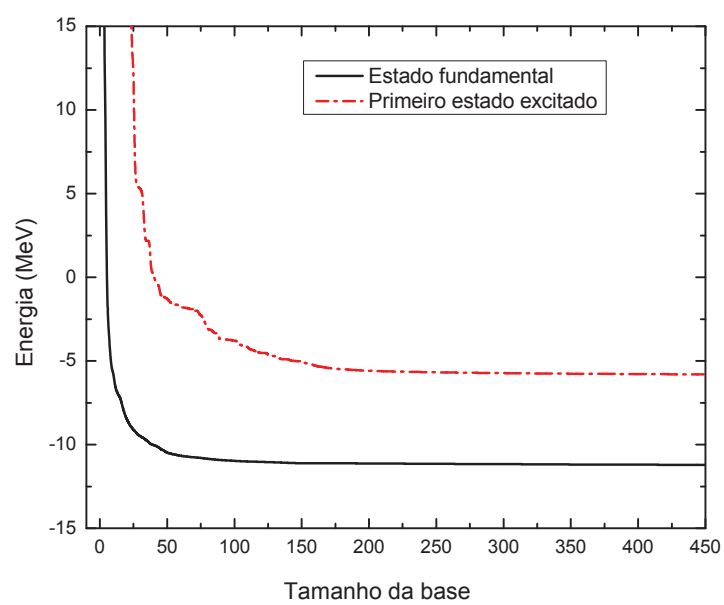


Figura 6: Estado fundamental e primeiro estado excitado do sistema de quatro partículas  $\alpha$  em função do tamanho da base.



## Capítulo 3

### Efeito de Alcance e Universalidade

No estudo de poucos corpos um dos principais interesses é o entendimento das correlações entre as escalas físicas e os observáveis do sistema. Essas correlações podem ser estudadas hoje também experimentalmente utilizando, por exemplo, a possibilidade de variar o comprimento de espalhamento de dois átomos através da ressonância de Feshbach em armadilhas magneto-ópticas, o que torna o estudo teórico ainda mais importante.

Neste capítulo vamos tratar da universalidade em um sistema de três bósons que é uma característica interessante que alguns sistemas de poucos corpos apresentam. Depois falaremos sobre o efeito Efimov, que é atualmente um dos paradigmas quando se fala em propriedades de sistemas de poucos corpos, e a sua relação com o colapso Thomas. Na seção 3.2 apresentaremos os resultados que obtivemos ao investigar o efeito do alcance do potencial nas leis de escala. Na última seção abordaremos brevemente a ressonância de Feshbach e as armadilhas atômicas.

#### 3.1 Universalidade

O termo universalidade é muito usado na mecânica estatística para denominar o comportamento crítico de grandezas termodinâmicas análogas (como a compressibilidade de um fluido e a suscetibilidade de um ferromagneto) [Salinas, 1997]. Esse termo foi adaptado para a física de poucos corpos e se refere a situações em que sistemas que são diferentes a curtas distâncias possuem um comportamento idêntico a longas distâncias [Braaten & Hammer, 2006], ou seja, quando um sistema

interage através de diferentes potenciais de curto alcance (gaussiano,  $\delta$ -Dirac, poço-quadrado, etc.) apresenta o mesmo resultado para algum observável (devidamente reescalado em termos das escalas físicas relevantes do sistema), nós falamos que este observável é uma grandeza universal, pois ele não é sensível aos detalhes do potencial a curtas distâncias [Braaten & Hammer, 2006].

A universalidade geralmente aparece quando temos o comprimento de espalhamento,  $a$  (ver apêndice B), muito maior que o alcance efetivo do potencial, ( $r_0$ ). Neste caso, temos o comprimento de onda de de Broglie\* muito maior que o alcance da interação e o sistema pode ser classificado como um sistema cujas as dimensões são muito menores que o alcance da força.

Nós podemos perceber as consequências da universalidade, por exemplo, no sistema de dois bósons idênticos com  $a > 0$ . Nesta situação existe um estado ligado de dois corpos próximo ao limiar com energia de ligação dada por:

$$E_D = \frac{\hbar^2}{ma^2} . \quad (3.1)$$

Um exemplo típico é o estado ligado de dois átomos de  $^4\text{He}$ . Neste caso, a energia de ligação e o comprimento de espalhamento são, respectivamente, da ordem de 1 mK e 100 Å (a equação 3.1 pode ser imediatamente verificada utilizando-se  $\hbar^2/m = 12.03 \text{ KÅ}^2$ ,  $m$  é a massa de um átomo de  $^4\text{He}$ ) [Grisenti et al., 2000]. Assim, quando  $\frac{a}{r_0} \gg 1$  o sistema de dois corpos pode ser descrito apenas pelo comprimento de espalhamento, ou, em outras palavras, precisamos apenas de uma única escala para descrever qualquer observável deste sistema.

Já em sistemas de três corpos veremos que no regime de universalidade os observáveis não podem ser descritos apenas através do comprimento de espalhamento, ou, equivalentemente, da energia de ligação de dois corpos. Neste caso, em virtude do colapso para  $-\infty$  da energia do estado fundamental de três corpos (colapso Thomas), é necessária a inclusão de uma nova escala física - uma escala de três corpos - para descrever o sistema. Essa escala física surge, de certa forma, da necessidade da inclusão de um corte, seja para grandes momentos ou pequenas distâncias, de maneira a tornar a energia do estado fundamental finita. Na próxima seção veremos um exemplo interessante de estados universais de três corpos que aparecem como

---

\*Comprimento de onda de de Broglie  $\lambda = h/p$ , onde  $h$  é a constante de Planck e  $p$  é o momento.

uma decorrência do efeito Efimov. Veremos também que este efeito está intimamente relacionado com o colapso Thomas.

### 3.1.1 Efeito Efimov e Colapso Thomas

Trataremos nesta seção do efeito Efimov e do colapso Thomas, que estão relacionados pelo fato de ambos acontecerem quando a razão  $\frac{a}{r_0} \gg 1$  é satisfeita [Frederico et al., 1999]. Na situação em que  $a$  assume valores grandes (e conseqüentemente a energia de dois corpos tende para valores pequenos) mantendo-se  $r_0$  fixo temos o efeito Efimov. Quando  $a$  é mantido fixo e  $r_0$  tende a zero temos o colapso Thomas.

O colapso Thomas [Thomas, 1935] foi descoberto em 1935, quando Thomas estudava o limite de alcance zero no potencial de dois corpos capaz de produzir um único estado ligado de dois corpos com energia fixa ( $r_0 \rightarrow 0$  e  $V_0 \rightarrow \infty$ ). Neste caso, ele provou que a energia do estado fundamental de três corpos diverge para infinito. Isto é contraintuitivo, pois um potencial que é atrativo somente o suficiente para produzir um único estado ligado de dois corpos, pode produzir um estado ligado de três com uma energia arbitrariamente grande [Braaten & Hammer, 2006]. Neste caso, porém, o sistema não é universal já que a energia de ligação e outras propriedades do estado fundamental de três corpos podem depender dos detalhes do potencial.

O efeito Efimov [Efimov, 1970] foi previsto em 1970 por Vitaly Efimov. E embora já tenha sido estabelecido teoricamente há bastante tempo, somente foi observado experimentalmente em 2006, no contexto de átomos ultrafrios [Kraemer et al., 2006]. Tanto o colapso Thomas como o efeito Efimov somente existem num espaço com dimensões entre 2 e 4 ou, mais precisamente, entre 2.3 e 3.8 [Nielsen et al., 2001]. Desta maneira, a única dimensão inteira na qual os efeitos ocorrem é  $d = 3$ . Além disso, para obtermos o efeito Efimov ao menos dois dos subsistemas de dois corpos devem ter um comprimento de espalhamento infinito.

Efimov percebeu que quando  $a \rightarrow \pm\infty$  ou da mesma maneira  $E_2 \rightarrow 0$  temos o aparecimento de infinitos estados ligados de três corpos com energia  $E_3^{(n)}$  ( $n = 0, 1, \dots, \infty$ ). Esses estados ligados resultam do aparecimento de um potencial efetivo proporcional a  $1/\rho^2$  [Fonseca et al., 1979, Landau & Lifshitz, ], onde  $\rho^2$  é o hiper-raio

do sistema de três corpos definido pela soma do quadrado das distâncias entre os bósons. No limite em que  $E_2 = 0$ , a razão das energias de ligação e dos hiper-raios quadráticos médios dos sucessivos estados de três corpos satisfazem às seguintes constantes universais:

$$\frac{E_3^{(n+1)}}{E_3^{(n)}} \longrightarrow \frac{1}{515.03} \quad \text{com } n \longrightarrow \infty, \quad (3.2)$$

$$\frac{\sqrt{\langle \rho^2 \rangle^{(n)}}}{\sqrt{\langle \rho^2 \rangle^{(n+1)}}} \longrightarrow \frac{1}{22.7}, \quad (3.3)$$

onde  $n = 0$  indica o estado fundamental e  $\rho$  é o hiper-raio,  $\rho^2 = r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2$  com  $|r_{12}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ . Conforme já adiantamos estas constantes não dependem da forma do potencial de curto alcance.

Para exemplificar os estados Efimov calculamos as energias de ligação de três bósons idênticos com dois potenciais diferentes ( $V_1$  e  $V_2$ ), dados por:

$$V_1 = v e^{-(\rho_1 r)^2} \quad \text{e} \quad V_2 = v_1 e^{-(\rho_2 r)^2} + v_2 e^{-(\rho_3 r)^2}, \quad (3.4)$$

com  $\rho_1 = 1\text{fm}$ ,  $v = -27.824346618 \text{ MeV}$ ,  $\rho_2 = 0.7\text{fm}$ ,  $\rho_3 = 0.475\text{fm}$ ,  $v_1 = 500\text{MeV}$  e  $v_2 = -90.872\text{MeV}$ . Sendo que as constantes  $v$  e  $v_2$  foram calculadas usando o método de Numerov<sup>†</sup> para que a energia do estado ligado de dois corpos interagindo através dos potenciais  $V_1$  e  $V_2$  fosse muito próxima a zero (por conveniência nós usamos as unidades nucleares  $\hbar^2/m = 41.467/4 \text{ Mev fm}^2$ , onde  $m$  é a massa da partícula alfa).

Na tabela 3 estão os resultados que obtivemos usando o método variacional estocástico, visto na seção 2.2, para as energias de ligação e raios quadráticos médios dos estados fundamental e excitado e suas razões. Essas razões, para a energia de ligação e raio quadrático médio, estão muito próximas dos valores descritos nas equações 3.2 e 3.3, e também não diferem muito entre si embora os potenciais sejam bem diferentes. Estes resultados, assim como os potenciais, serão utilizados novamente no capítulo 4.

A presença do colapso Thomas exige que a equação que descreve um sistema de três corpos, interagindo por um potencial de alcance zero, seja regularizada de maneira a fornecer uma energia de três corpos finita para o estado fundamental.

---

<sup>†</sup>Ver apêndice C.

Potencial	Energia (MeV)			rms (fm)		
	$E_3^{(0)}$	$E_3^{(1)}$	$E_3^{(0)}/E_3^{(1)}$	$R_3^{(0)}$	$R_3^{(1)}$	$R_3^{(1)}/R_3^{(0)}$
$V_1$	-2.47	$-4.67 \times 10^{-3}$	528	1.209	22.47	18.6
$V_2$	$-9.98 \times 10^{-2}$	$1.79 \times 10^{-4}$	557	6.003	110.798	18.5

Tabela 3: Resultados das energias ( $E_3^{(0)}$  e  $E_3^{(1)}$ ) e raios quadráticos médios de uma partícula até o centro de massa do sistema ( $R_3^{(0)}$  e  $R_3^{(1)}$ ), respectivamente para os estados fundamental e excitado. Mostramos também as razões das energias  $E_3^{(0)}/E_3^{(1)}$  e dos raios quadráticos médios  $R_3^{(1)}/R_3^{(0)}$  para o caso em que três bósons idênticos estão interagindo através dos potenciais  $V_1$  e  $V_2$ .

Isso pode ser feito através da inserção de um corte para grandes momentos ou pequenas distâncias, o que equivale à introdução de uma nova escala física para descrever o sistema [Adhikari et al., 1995]. Desta forma, diferentemente do sistema de dois corpos que pode ser descrito por apenas uma única escala no regime de universalidade, no sistema de três corpos os observáveis devem satisfazer uma função de escala universal,  $\mathcal{F}$ , dada por

$$O_3(E, E_2, E_3) = E_3^\eta \mathcal{F} \left( \sqrt{\frac{E}{E_3}}, \sqrt{\frac{E_2}{E_3}} \right), \quad (3.5)$$

onde  $O_3$  é qualquer observável do sistema de três corpos a uma certa energia  $E$ . O fator  $E_3^\eta$  dá a dimensão de  $O_3$ . Note que além da escala de dois corpos representada pela energia  $E_2$  temos, agora, uma escala de três, dada por  $E_3$ .

Obviamente, a função universal dada pela equação 3.5 é válida no regime em que o comprimento de espalhamento de dois corpos é muito maior que o alcance efetivo do potencial. Conforme aumentamos a energia de ligação de dois corpos, ou o alcance efetivo do potencial, o sistema começa a se tornar mais e mais ligado e os detalhes da interação passam, então, a ser cada vez mais relevantes. Isso faz com que a curva dada por  $\mathcal{F}$  já não seja tão bem satisfeita, já que estamos nos distanciando da região de universalidade.

A situação de alcance zero já foi estudada na referência [Yamashita et al., 2002]. Na próxima seção vamos estudar as consequências de um alcance efetivo do potencial finito, representado por  $r_0$ , e as correções de primeira ordem em  $r_0/a$  na função universal  $\mathcal{F}$ .

### 3.2 Efeito de alcance - Alcance zero e Finito

O efeito do alcance do potencial na universalidade será investigado analisando-se a seguinte função de escala

$$\sqrt{\frac{E_3^{(n+1)} - E_2}{E_3^{(n)}}} = \mathcal{F} \left( \sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}} \right). \quad (3.6)$$

A convergência da equação 3.6 para uma função universal  $\mathcal{F}$  é obtida rapidamente e o resultado para  $n = 1$  é praticamente o mesmo que o do limite  $n \rightarrow \infty$  ou, em outras palavras, o limite de escala é atingido bem rápido.

Para calcular as energias de ligação de dois e três bósons vamos utilizar um potencial do tipo poço,  $V_p$ . Este tipo de potencial é bastante conveniente, pois podemos resolver a equação de Schrödinger analiticamente para o sistema de dois corpos. Além disso, o potencial possui apenas dois parâmetros e o alcance também pode ser facilmente controlado. A solução da equação de Schrödinger no caso de dois corpos e o cálculo do elemento de matriz  $\langle \phi_i | V_p | \phi_j \rangle$  para o caso de mais de duas partículas estão descritos no apêndice A.3.4. Para calcular a energia do sistema de três partículas usamos o método variacional estocástico descrito no capítulo 2.

Na figura 7 mostramos a função de escala dada pela equação 3.6. A linha cheia corresponde ao resultado obtido utilizando-se um potencial de alcance zero (delta Dirac). Os pontos são resultados provenientes de cálculos de outros autores. A linha traço-ponto são os nossos resultados utilizando-se o potencial tipo poço com largura  $R = 1$  fm. É importante notar que a mesma curva também foi obtida através da utilização de um potencial de três corpos gaussiano, neste caso a energia de dois corpos foi mantida a um valor constante e a energia de três corpos foi sendo variada.

Podemos ver que quando a energia de ligação de dois corpos é pequena todos os resultados coincidem. Nessa situação o sistema de dois corpos apresenta um grande comprimento de espalhamento e a universalidade pode de fato ser observada na figura. Conforme aumentamos a energia de dois corpos notamos que a nossa curva, e também os pontos dos outros cálculos, começam a se distanciar da curva sólida. Isso ocorre, pois, como o sistema começa a diminuir de tamanho, os seus constituintes passam a ser mais sensíveis aos detalhes dos potenciais e, conseqüentemente, uma

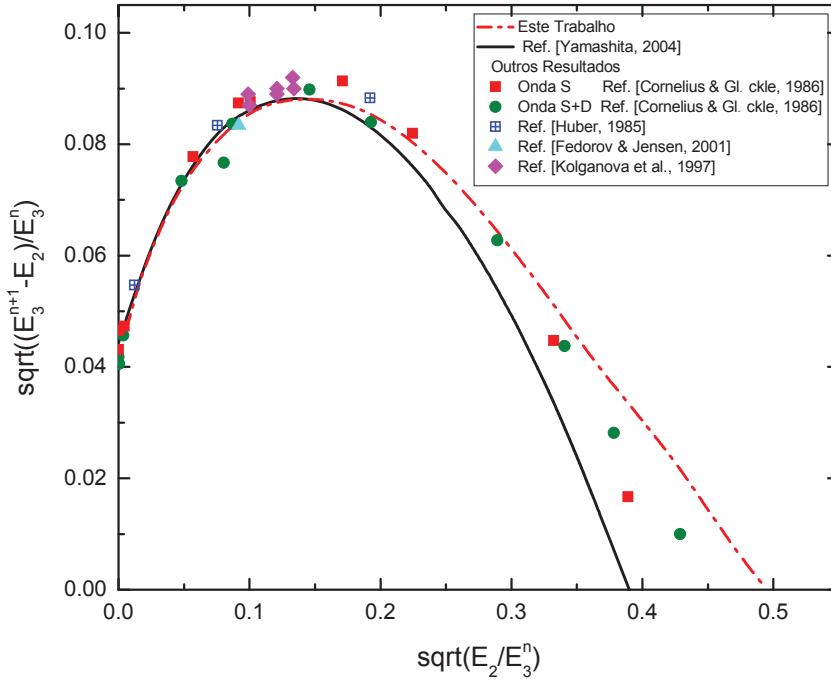


Figura 7: Energias dos estados ligados de três bósons. Linha tracejada são os resultados deste trabalho e linha sólida são os resultados da referência [Yamashita, 2004]. Os símbolos são resultados de outros cálculos para o trímero de  $^4\text{He}$ : quadrados (onda  $S$ ) e círculos (ondas  $S+D$ ) são da referência [Cornelius & Glöckle, 1986], quadrados com cruzes são da referência [Huber, 1985], triângulos são da referência [Fedorov & Jensen, 2001] e os losangos são da referência [Kolganova et al., 1997].

correção referente ao alcance do potencial deve ser adicionada a equação 3.6.

Primeiramente expandindo  $\mathcal{F}$  para  $r_0/a$  pequeno, temos que:

$$\mathcal{F} \left( \sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}; \frac{r_0}{a} \right) \cong \mathcal{F} \left( \sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}; 0 \right) + \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \frac{r_0}{a}} \right|_{\frac{r_0}{a}=0} \frac{r_0}{a} + \dots \quad (3.7)$$

E como podemos ver visualmente no gráfico 7 que a correção devido ao alcance é praticamente linear após  $\sqrt{E_2/E_3^{(n)}} \sim 0.3$ , podemos ajustar uma reta nesta região final da curva calculada com o potencial de alcance zero (linha sólida). Com isto, obtemos que:

$$\mathcal{F} \left( \sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}; 0 \right) \cong 0.523 \left( 0.38 - \sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}} \right). \quad (3.8)$$

Da equação 3.7 podemos ver que o coeficiente angular da reta é dado pela diferença entre a curva com alcance finito e a curva de alcance zero dividida por  $r_0/a$ . A figura 8 mostra o ajuste de uma reta aos pontos retirados da figura 7

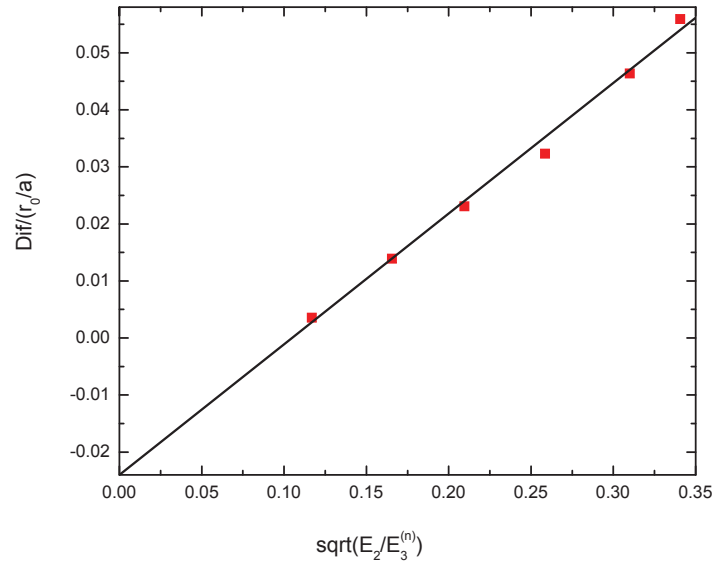


Figura 8: Diferença entre as curvas de alcance zero e alcance finito dividido por  $r_0/a$  em função de  $\sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}$ .

O termo referente à derivada na equação 3.7 pode, então, ser escrito em função de  $\sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}$  como

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \frac{r_0}{a}} \cong -0.024 + 0.229 \sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}. \quad (3.9)$$

Substituindo-se as equações 3.9 e 3.8 na equação 3.7, temos que a correção proveniente do alcance do potencial no ponto onde o estado excitado de três corpos desaparece,  $\mathcal{F} = 0$ , é dada por:

$$\sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}\Big|_{\text{corte}} = \frac{0.523 \times 0.38 - 0.024 \frac{r_0}{a}}{0.523 - 0.229 \frac{r_0}{a}}, \quad (3.10)$$

Se expandirmos esta equação em torno de  $\frac{r_0}{a}$  temos que:

$$\sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}\Big|_{\text{corte}} \approx 0.38 + 0.12 \left(\frac{r_0}{a}\right). \quad (3.11)$$



Assim, conforme nos distanciamos da região de universalidade ( $E_2$  pequeno), e o sistema vai ficando mais compacto, vemos que apenas as energias de dois e três corpos não são suficientes para descrever o sistema e conseqüentemente mais uma informação, neste caso o alcance do potencial, deve ser levado em conta.

Podemos dizer que os estudos mais sistemáticos de correlações entre as escalas físicas e os observáveis do sistema tiveram início com os trabalhos seminais de (i) Phillips [Phillips, 1968], (ii) Coester [Coester et al., 1970] e (iii) Tjon [Tjon, 1975]. Através das linhas que hoje em dia levam os seus nomes eles estudaram, respectivamente, (i) a correlação entre as energias de ligação do trítio e do comprimento de espalhamento nucleon-déuteron para o estado dubleto, (ii) a correlação da energia de ligação da matéria nuclear para diferentes potenciais de dois corpos que reproduzem o mesmo deslocamento de fase (iii) a correlação linear entre a energia de ligação do trítio e da partícula alfa. Podemos notar que todos os estudos (teóricos) foram realizados no contexto da física nuclear onde não temos a liberdade de modificar a interação entre os constituintes do núcleo. Recentemente, o estudo experimental das correlações entre os diversos observáveis do sistema veio à tona através da possibilidade de controlar o comprimento de espalhamento de dois corpos em armadilhas magneto-ópticas através da variação do campo magnético.

Assim, o campo da física atômica, mais especificamente a área de átomos ultrafrios, constitui hoje um riquíssimo “playground” para o estudo teórico mostrado nesta seção. Na próxima seção falaremos brevemente sobre a ressonância de Feshbach, mecanismo pelo qual é possível controlar a energia de ligação entre dois átomos em armadilhas, e das armadilhas magneto-ópticas.

### 3.3 Ressonância de Feshbach e Armadilhas

As armadilhas magneto-ópticas, geralmente, são feitas através da aplicação de um potencial oscilante e um método de resfriamento em sistemas atômicos. A função do potencial oscilante é confinar as partículas numa determinada região e com o processo de resfriamento conseguimos deixar o sistema mais estável. Tendo um sistema confinado e estável é possível observar com mais exatidão suas características.

Através da ressonância de Feshbach, dentro de uma armadilha, podemos variar

o comprimento de espalhamento de dois átomos, por isso, a ressonância de Feshbach é uma ferramenta muito importante no estudo de átomos ultra-frios [Chin et al., 2010]. Nela temos um acoplamento de dois canais, um aberto e outro fechado, que permite a geração de um grande comprimento de espalhamento [Braaten & Hammer, 2006].

Na figura 9 temos a representação da ressonância de Feshbach, onde a curva em azul representa o potencial onde os estados de espalhamento entre dois átomos são permitidos (canal aberto) e a curva em vermelho representa o potencial de interação na qual os estados de espalhamento são proibidos (canal fechado). A linha referente ao estado ligado (linha em vermelho rotulada como  $E_{res}$ ) pode variar, ficando acima ou abaixo do limiar de ressonância (linha reta em azul), com a aplicação de um campo magnético externo que é capaz de modificar a posição relativa dos canais aberto e fechado. Neste limiar de ressonância ocorre o acoplamento entre os canais e é este acoplamento que permite a transição dos pares de partículas nos dois canais. A duração desta transição virtual entre o estado ligado e de espalhamento é proporcional a  $\frac{\hbar}{|E_{res}-E|}$ , ou seja, quando as duas energias são bem próximas a transição pode durar bastante tempo e isso aumenta a amplitude de espalhamento [Cohen-Tannoudji, 2007].

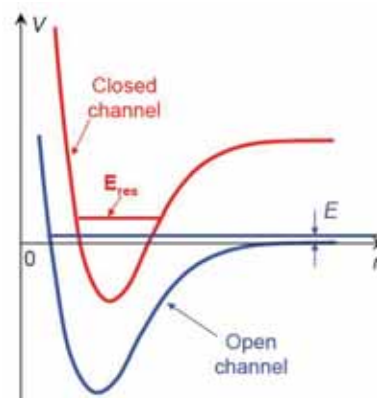


Figura 9: Representa uma ressonância de Feshbach. A curva em azul representa o canal aberto e a curva em vermelho representa o canal fechado. Figura retirada da referência [Cohen-Tannoudji, 2007].

## Capítulo 4

### Estrutura dos estados ligados de quatro bósons para $E_2 = 0$

Recentemente uma relação simples conectando os estados ligados de quatro e três corpos foi apresentada por J. von Stecher, D’Incao e Greener [von Stecher et al., 2009]. Eles afirmam que abaixo de cada estado Efimov existem dois estados de quatro corpos com energias de 4.58 e 1.01 vezes a energia do respectivo estado ligado de três corpos ao qual eles estão associados. Estes resultados foram parcialmente observados no experimento da referência [Ferlaino et al., 2009], já que apenas dois estados de quatro corpos abaixo do estado fundamental de Efimov foram mostrados. Este trabalho experimental também concorda de certa maneira com os resultados da referência [Platter et al., 2004], onde foi mostrado que são necessárias apenas as escalas de dois e três corpos para descrever os observáveis de quatro corpos. Esta relação unívoca entre as energias de três e quatro bósons é válida principalmente nos casos onde a interação é dominada pela força de dois corpos. Todavia, próximo à ressonância de Feshbach é possível que os potenciais de dois, três e quatro corpos possam ser revelados e manipulados individualmente [Nakajima et al., 2010], o que certamente faria com que os espectros de três e quatro corpos pudessem variar independentemente [Yamashita et al., 2006, Hadizadeh et al., 2011] modificando a relação universal encontrada em [von Stecher et al., 2009].

A maioria dos cálculos numéricos recentes para o caso de quatro corpos são realizados no contexto de armadilhas atômicas, motivo pelo qual um potencial confinante é sempre considerado, todavia, os resultados finais são obtidos de maneira que não dependam das características da armadilha [Yamashita et al., 2010, von Stecher

et al., 2009]. Porém, os estados ressonantes acima do limiar 3+1 que aparecem como estados ligados quando submetidos ao potencial confinante, não são estados ligados verdadeiros como já mencionado na referência [von Stecher et al., 2009]. Desta forma, o método baseado na função de onda de quadrado integrável usado para obter um resultado mais acurado para estados ligados não pode ser imediatamente adaptado para problemas de espalhamento ou problemas no contínuo: se todas as correlações entre as partículas do sistema de quatro corpos são consideradas, os estados acima do limiar 3+1 podem ser influenciados fortemente pelas características da armadilha e estes estados ressonantes necessitam de um cálculo mais cuidadoso. Este problema pode ser simplificado usando somente correlações de dois corpos para sistemas de quatro corpos [Thøgersen et al., 2008].

Neste trabalho nós desconsideramos um potencial confinante e investigamos os estados de quatro bósons abaixo do limiar 3+1. A universalidade desses estados é testada usando dois potenciais do tipo gaussiano: um é somente atrativo e o outro tem uma pequena repulsão a curtas distâncias. Na próxima seção vamos mostrar os nossos resultados para as energias dos estados ligados de três e quatro bósons. Depois, trataremos da estrutura do estados de quatro corpos através do cálculo das amplitudes e fatores espectroscópicos.

## 4.1 Energias de ligação de três e quatro bósons

Para calcular os observáveis de três e quatro bósons nós usamos um potencial gaussiano atrativo,

$$V_1 = v e^{-(\rho_1 r)^2}, \quad (4.1)$$

com  $\rho_1 = 1$  fm e  $v = -27.824346618$  MeV, e um potencial formado por uma gaussiana atrativa e outra repulsiva,

$$V_2 = v_1 e^{-(\rho_2 r)^2} + v_2 e^{-(\rho_3 r)^2}, \quad (4.2)$$

com  $\rho_2 = 0.7$  fm,  $\rho_3 = 0.475$  fm,  $v_1 = 500$  MeV e  $v_2 = -90.872$  MeV.

As constantes  $v$  e  $v_2$  foram calculadas usando o método Numerov\* para que a energia de dois corpos sob o potencial  $V_1$  e  $V_2$  fosse muito próxima a zero (por

---

\*Ver apêndice C.

conveniência usamos as unidades nucleares  $\hbar^2/m = 41.467/4 \text{ MeV fm}^2$ , onde  $m$  é a massa da partícula alfa).

Na tabela 4 estão os resultados que obtivemos usando o método variacional estocástico, visto na seção 2.2, para as energias de ligação ( $E_{N_P}^{(0)}$  e  $E_{N_P}^{(1)}$ ,  $N_P = 3, 4$  é número de partículas) e os respectivos raios quadráticos médios de uma partícula até o centro de massa dos sistemas de três e quatro bósons ( $R_{N_P}^{(0)}$  e  $R_{N_P}^{(1)}$ ).

Potencial	$N_P$	Energia (MeV)		rms (fm)		Dimensão $N_B$
		$E_{N_P}^{(0)}$	$E_{N_P}^{(1)}$	$R_{N_P}^{(0)}$	$R_{N_P}^{(1)}$	
$V_1$	3	-2.47	$-4.67 \times 10^{-3}$	1.209	22.47	400
	4	-14.54	-2.72	0.83	2.85	500
$V_2$	3	$-9.98 \times 10^{-2}$	$-1.79 \times 10^{-4}$	6.003	110.798	1225
	4	-0.509	-0.1004	5.816	21.283	1700

Tabela 4: Resultados das energias de ligação ( $E_{N_P}^{(0)}$  e  $E_{N_P}^{(1)}$ ) e raios quadráticos médios de uma partícula até o centro de massa do sistema ( $R_{N_P}^{(0)}$  e  $R_{N_P}^{(1)}$ ), respectivamente para os estados fundamental e excitado dos sistemas de três e quatro bósons ( $N_P = 3, 4$ : número de partículas) interagindo através do potencial  $V_1$  e  $V_2$ . Na última coluna temos o tamanho da base que usamos para calcular os observáveis, sendo que nos sistemas de três corpos usamos o método de progressão geométrica e para os sistemas de quatro corpos aplicamos o método variacional estocástico.

Notamos que os resultados apresentados na tabela 5 são muito próximos às constantes descritas nas expressões 3.2 e 3.3, o que confirma que estamos na região do efeito Efimov.

Potencial	$E_3^{(0)}/E_3^{(1)}$	$R_3^{(1)}/R_3^{(0)}$
$V_1$	528	18.6
$V_2$	557	18.5

Tabela 5: Razão das energias e raio quadrático médio de uma partícula até o centro de massa dos estados fundamental e excitado de três bósons interagindo através de um potencial gaussiano puramente atrativo,  $V_1$ , e de um potencial formado por duas gaussianas, uma atrativa e outra repulsiva, resultando em uma pequena repulsão a curtas distâncias,  $V_2$ . Os parâmetros dos potenciais ( $V_1$  e  $V_2$ ) foram escolhidos de forma que a energia de dois bósons seja aproximadamente zero.

Podemos ver na tabela 6 que as razões entre  $E_4^{(0)}/E_3^{(0)}$  e  $E_4^{(1)}/E_3^{(0)}$  são ligeiramente diferentes das constantes universais 4.58 e 1.01 da referência [von Stecher et al., 2009]. Essa diferença pode ser proveniente do fato de que as próprias razões das energias dos trimeros, principalmente do potencial  $V_2$ , difira um pouco da razão

esperada entre as energias dos estados Efimov. Note que os resultados obtidos para os potenciais  $V_1$  e  $V_2$  também diferem entre si e que o estado excitado é menos sensível a essa mudança de potencial. Essas diferenças podem ser entendidas da seguinte maneira: o estado fundamental de quatro bósons é certamente uma quantidade não universal, pois sua função de onda pode estar dentro de uma região permitida classicamente [Yamashita et al., 2010]; o primeiro estado excitado, embora ainda possa ser afetado pela forma do potencial, é muito menos sensível, pois sua função de onda possui uma extensão espacial muito maior que o estado fundamental, estando predominantemente em regiões proibidas classicamente, assim, a condição de universalidade (comprimento de espalhamento muito maior que o alcance efetivo do potencial) é melhor satisfeita nesta situação.

Potencial	$E_4^{(0)}/E_3^{(0)}$	$E_4^{(1)}/E_3^{(0)}$
$V_1$	5.89	1.09
$V_2$	5.1	1.006

Tabela 6: Razão entre as energias de ligação do estado fundamental ( $E_4^{(0)}$ ) e excitado ( $E_4^{(1)}$ ) de quatro corpos com a energia do estado fundamental de três corpos ( $E_3^{(0)}$ ). Quando os sistemas de três e quatro bósons estão sob um potencial gaussiano atrativo ( $V_1$ ) ou sob um potencial formado por duas gaussianas, uma atrativa e a outra repulsiva ( $V_2$ ). Os parâmetros dos potenciais ( $V_1$  e  $V_2$ ) foram escolhidos de forma que a energia de dois bósons seja aproximadamente zero.

## 4.2 Amplitude Espectroscópica

A amplitude espectroscópica,  $y(r)$ , é basicamente um “overlap” da função de onda com seus subsistemas. Ela nos oferece uma informação da estrutura de um determinado sistema como, por exemplo, se o sistema de quatro corpos é predominantemente um sistema do tipo 3+1 ou 2+2. Vamos considerar nesta seção a amplitude espectroscópica entre os estados ligados de quatro corpos (fundamental e excitado),  $\Psi_4^{(n)}$ , e o subsistema representado pelo estado ligado de três corpos (fundamental e excitado),  $\Psi_3^{(n)}$ , e um bóson. Neste caso, optamos por considerar somente a configuração 3+1, já que o sistema de dois corpos possui energia zero e a configuração 2+2 nos parece muito menos provável.

Ambos  $\Psi_4$  e  $\Psi_3$  tem momento angular nulo e são normalizados e simetrizados,

ou seja:

$$\langle \Psi_3 | \Psi_3 \rangle = 1 \quad \text{e} \quad \langle \Psi_4 | \Psi_4 \rangle = 1 . \quad (4.3)$$

A amplitude espectroscópica é definida por [Horiuchi & Suzuki, 2008]:

$$y(r) = \sqrt{\frac{4!}{3!1!}} \langle \Psi_3 | \frac{\delta(x_3 - r)}{x_3 r} Y_{00}(\vec{x}_3) | \Psi_4 \rangle . \quad (4.4)$$

Lembrando que  $\Psi_3$  é descrito por duas coordenadas relativas  $\vec{x}_1$  e  $\vec{x}_2$  e  $\Psi_4$  com três coordenadas  $\vec{x}_1$ ,  $\vec{x}_2$  e  $\vec{x}_3$ . Consideramos aqui  $\vec{x}_3$  como sendo a distância relativa entre um bóson e o centro de massa do trímero (sistema de três corpos).

Vamos agora calcular analiticamente a amplitude espectroscópica.

Sabendo que:

$$\delta(\vec{x}_3 - \vec{r}) = \sum_{lm} \frac{\delta(x_3 - r)}{x_3 r} Y_{lm}(\hat{x}_3) Y_{lm}^*(\hat{r}) , \quad (4.5)$$

podemos reescrever a equação 4.4 da seguinte forma (no nosso caso temos  $l = 0$  e  $m = 0$ ):

$$y(r) = \sqrt{4\pi} g(\vec{r}) \quad \text{com} \quad g(\vec{r}) = \sqrt{\frac{4!}{3!1!}} \langle \Psi_3 | \delta(\vec{x}_3 - \vec{r}) | \Psi_4 \rangle . \quad (4.6)$$

Como  $\delta(\vec{x}_3 - \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{x}_3 - \vec{r}))$ , temos que:

$$g(\vec{r}) = \sqrt{\frac{4!}{3!1!}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \langle \Psi_3 | e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_3 - \vec{r})} | \Psi_4 \rangle . \quad (4.7)$$

Resolvendo primeiramente  $\langle \Psi_3 | e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_3 - \vec{r})} | \Psi_4 \rangle$ , lembrando que a função de onda total é escrita na forma 2.13, temos que:

$$\langle \Psi_3 | e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_3 - \vec{r})} | \Psi_4 \rangle = \sum_{ij} c_i^3 c_j^4 S_3 S_4 \int d\mathbf{x} \exp \left[ -\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{x}} (A^{(i)} + B^{(j)}) \mathbf{x} + i\vec{k} \cdot (\vec{x}_3 - \vec{r}) \right] , \quad (4.8)$$

sendo  $A = \begin{pmatrix} A_{2 \times 2} & 0 \\ & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$  e  $\tilde{\mathbf{x}} = (\vec{x}_1 \quad \vec{x}_2 \quad \vec{x}_3)$ . Os índices superiores em  $c$  distinguem entre os coeficiente da expansão da função de onda de três e quatro corpos.  $S_3$  e  $S_4$  são os operadores que realizam a simetrização das funções de onda

dos sistemas definidos pelos seus índices inferiores.

Calculando a expressão anterior usando A.1 e o resultado da equação A.36, obtemos:

$$\langle \Psi_3 e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}_3 - \vec{r})} | \Psi_4 \rangle = \sum_{ij} c_i^3 c_j^4 S_3 S_4 \left[ \frac{(2\pi)^3}{\det D_{(ij)}} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2} \{D_{(ij)}^{-1}\}_{33} k^2 + i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (4.9)$$

onde  $D_{(ij)} = A^{(i)} + B^{(j)}$ , sendo  $\{D_{(ij)}^{-1}\}_{33}$  o elemento 33 da matriz  $D_{(ij)}$ .

Com isto,  $g(\vec{r})$  pode ser escrito na forma:

$$g(\vec{r}) = \sqrt{\frac{4!}{3!1!}} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{ij} c_i^3 c_j^4 S_3 S_4 \left[ \frac{(2\pi)^3}{\det D_{(ij)}} \right]^{\frac{3}{2}} \int d\vec{k} e^{-\frac{1}{2} \{D_{(ij)}^{-1}\}_{33} k^2 + i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (4.10)$$

Sabendo que:

$$\int d\vec{k} \exp\left(-\frac{1}{2} \{D_{(ij)}^{-1}\}_{33} \vec{k}^2 - i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) = \left(\frac{2\pi}{\{D_{(ij)}^{-1}\}_{33}}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-r^2}{2\{D_{(ij)}^{-1}\}_{33}}\right), \quad (4.11)$$

temos:

$$g(\vec{r}) = 2(2\pi)^3 \sum_{ij} c_i^3 c_j^4 S_3 S_4 (\det D_{(ij)} \{D_{(ij)}^{-1}\}_{33})^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-r^2}{2\{D_{(ij)}^{-1}\}_{33}}\right). \quad (4.12)$$

Substituindo o resultado anterior na equação 4.6, obtemos a seguinte expressão para a função da amplitude espectroscópica:

$$y(r) = 4\sqrt{\pi}(2\pi)^3 \sum_{ij} c_i^3 c_j^4 S_3 S_4 (\det D_{(ij)} \{D_{(ij)}^{-1}\}_{33})^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-r^2}{2\{D_{(ij)}^{-1}\}_{33}}\right). \quad (4.13)$$

A integral:

$$S = \int_0^\infty y^2(r) r^2 dr \quad (4.14)$$

é chamada de fator espectroscópico (SF). Como já dissemos no início da seção, as funções de onda  $\Psi_3$  e  $\Psi_4$  são simetrizadas, todavia, quando calculamos  $y(r)$  considerando  $\Psi_4$  e  $\Psi_3+1$  bóson, note que este bóson não entra na simetrização. Desta maneira, se quisermos interpretar o SF como uma probabilidade devemos compará-lo com todas as combinações dos quatro bósons três a três, ou seja,  $4!/3!1! = 4$ . Assim, quanto mais próximo o valor de SF/4 for da unidade mais o nosso estado  $\Psi_4$



será parecido com o estado  $\Psi_3 + 1$  (3+1).

#### 4.2.1 Resultados da Amplitude Espectroscópica

Podemos ver que a amplitude espectroscópica é dada pela seguinte equação:

$$y(r) = \sqrt{\frac{4!}{3!1!}} \langle \Psi_3^{(i)} \frac{\delta(x_3 - r)}{x_3 r} Y_{00}(\vec{x}_3) | \Psi_4^{(j)} \rangle. \quad (4.15)$$

Nas figuras 10 e 11 mostramos os resultados de  $y(r)$  para as quatro possibilidades de combinação com as funções de onda de três e quatro corpos dos estados fundamental e excitado ( $\Psi_3^{(0)}$ ,  $\Psi_3^{(1)}$ ,  $\Psi_4^{(0)}$  e  $\Psi_4^{(1)}$ ).

Note que na figura 10 o fator espectroscópico para o caso  $\Psi_3^{(0)}$  e  $\Psi_4^{(0)}$  é próximo de 4, isto é, temos 80% de probabilidade do sistema ter uma configuração 3 + 1. O tamanho do sistema associado a  $\Psi_4^{(0)}$  é menor do que  $\Psi_3^{(0)}$  (veja tabela 4) e o pico da linha cheia do gráfico 10 é menor que 0.5 fm, ou seja, podemos sugerir que  $\Psi_4^{(0)}$  é um condensado de 3 bósons mais um bóson muito próximo aos outros. Para o caso de  $\Psi_3^{(0)}$  e  $\Psi_4^{(1)}$  temos SF=1.58 o que significa aproximadamente 40% de probabilidade da configuração de  $\Psi_4^{(1)}$  ser do tipo 3 + 1. Porém, neste caso o tamanho do estado associado a  $\Psi_4^{(1)}$  é maior do que o estado  $\Psi_3^{(0)}$  (ver tabela 4), então o estado  $\Psi_4^{(1)}$  provavelmente tem uma configuração 3+1 com um bóson mais afastado dos outros três do que no caso de  $\Psi_4^{(0)}$ . Os SF e as SA são aproximadamente zero para as combinações envolvendo  $\Psi_3^{(1)}$ , pois o trímero (estado de três corpos) excitado é muito maior que os dois tetrâmeros (estados de quatro corpos).

Os resultados do SF dos estados fundamentais de três e quatro corpos quando consideramos o potencial  $V_2$  não diferem muito dos resultados no caso do potencial  $V_1$  (ver figuras 10 e 11). O SF para  $\Psi_3^{(0)}$  e  $\Psi_4^{(0)}$  sob o potencial  $V_2$  representa 90% da probabilidade da configuração de  $\Psi_4^{(0)}$  ser 3 + 1. Já o SF de  $\Psi_3^{(0)}$  e  $\Psi_4^{(1)}$  representa apenas 23% e o pico da linha tracejada está em torno de 10 fm. Os resultados de SF envolvendo  $\Psi_3^{(1)}$  considerando o potencial  $V_2$  também não diferem muito dos valores de  $V_1$ , pois neste caso o trímero, também, é muito maior que os dois tetrâmeros.

Para entendermos melhor a universalidade presente nesses sistemas de três e quatro corpos sob o potencial  $V_1$  ou o potencial  $V_2$  apresentamos a seguir dois gráficos

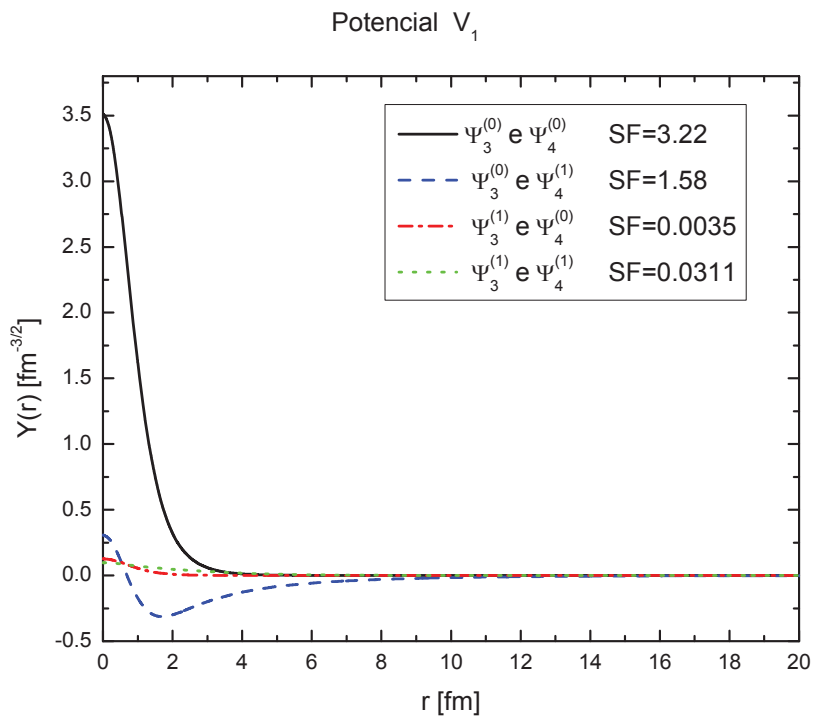


Figura 10: Amplitude espectroscópica para o caso em que os sistemas de três,  $\Psi_3^{(i)}$ , e quatro corpos,  $\Psi_4^{(j)}$ , estão sob o potencial  $V_1$ . Na linha sólida temos  $y(r)$  com  $i = j = 0$ , na linha tracejada temos  $y(r)$  com  $i = 0$  e  $j = 1$ , na linha traço ponto temos  $y(r)$  com  $i = 1$  e  $j = 0$  e na linha pontilhada temos  $y(r)$  com  $i = j = 1$ . Na legenda do gráfico, também, mostramos os resultados do fator espectroscópico (SF).

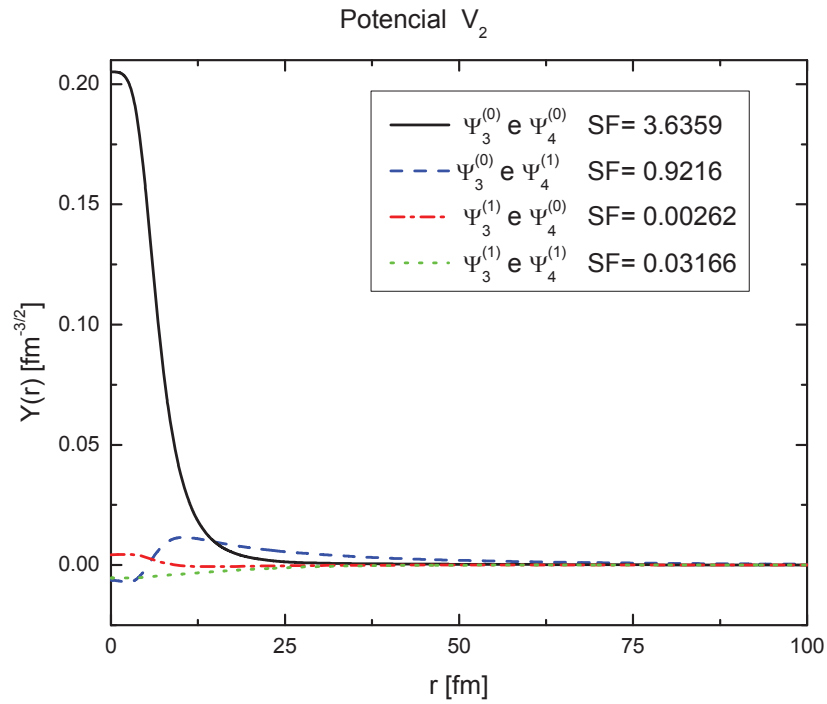


Figura 11: Amplitude espectroscópica para o caso em que os sistemas de três,  $\Psi_3^{(i)}$ , e quatro corpos,  $\Psi_4^{(j)}$ , estão sob o potencial  $V_2$ . Na linha sólida temos  $y(r)$  com  $i = j = 0$ , na linha tracejada temos  $y(r)$  com  $i = 0$  e  $j = 1$ , na linha traço ponto temos  $y(r)$  com  $i = 1$  e  $j = 0$  e na linha pontilhada temos  $y(r)$  com  $i = j = 1$ . Na legenda do gráfico, também, mostramos os resultados do fator espectroscópico (SF).

envolvendo  $y(r)$  e  $r$  escrito em termos dos adimensionais:

$$\bar{Y}(r) = y(r) \left( \frac{\hbar^2}{mE_4^{(n)}} \right)^{\frac{3}{4}} \quad \text{e} \quad \bar{r} = r \sqrt{\frac{mE_4^{(n)}}{\hbar^2}}. \quad (4.16)$$

Nas figuras 12 e 13 notamos que as curvas coincidem a partir de  $\bar{r} \approx 3$ . Isso mostra que as amplitudes espectroscópicas também são funções universais e podem ser reescaladas utilizando-se uma escala de quatro corpos, no nosso caso a energia de ligação dos tetrâmeros. A diferença entre as curvas para valores de  $\bar{r}$  pequenos é esperada, já que essas regiões devem ser sensíveis aos detalhes dos potenciais.

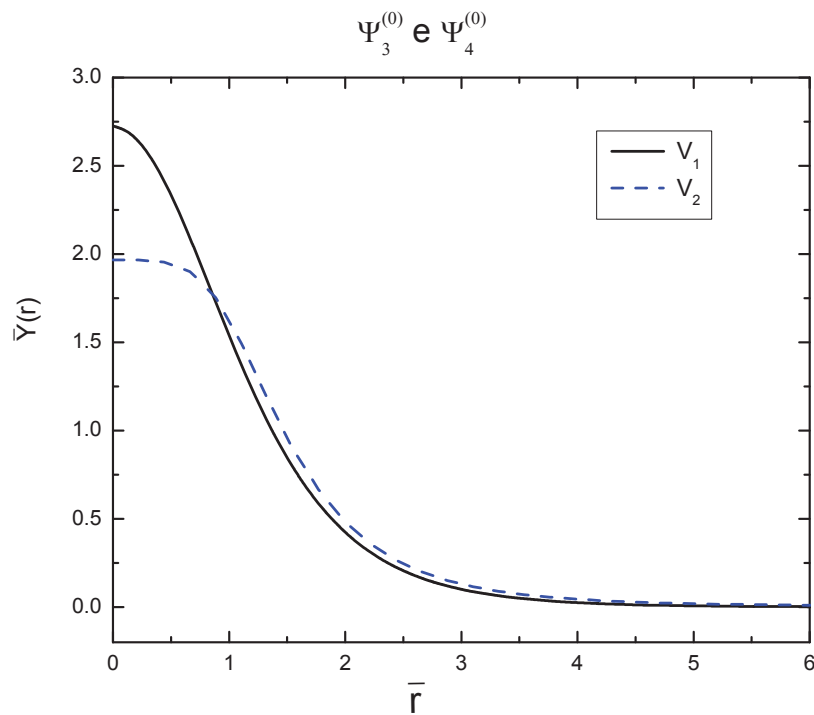


Figura 12: Gráfico da amplitude espectroscópica reescalada de forma que  $\bar{Y}(r)$  e  $\bar{r}$  são adimensionais. Considerando apenas os  $y(r)$  relacionados as funções dos estado fundamentais de três e quatro corpos ( $n = 0$ ).

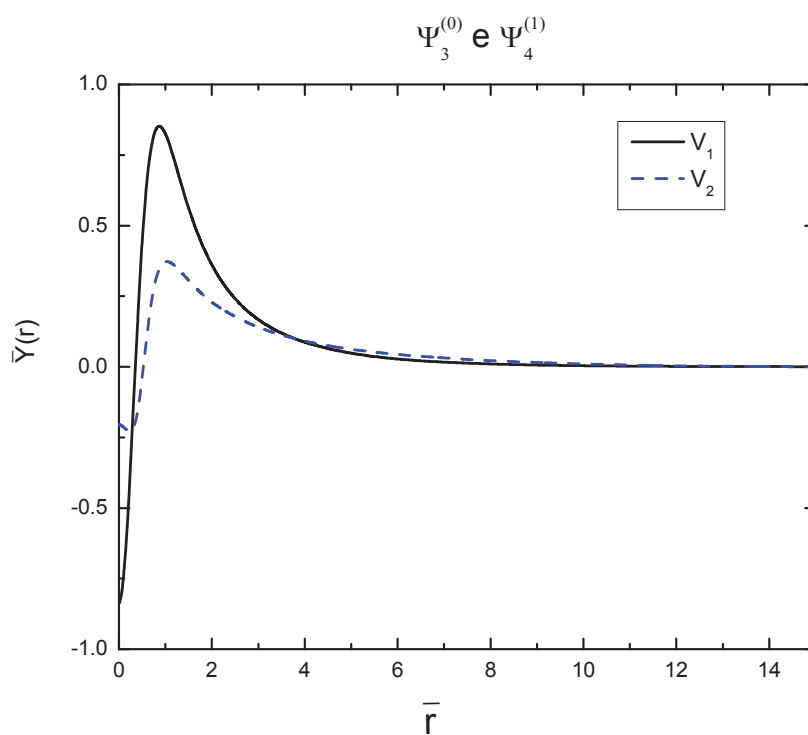


Figura 13: Gráfico da amplitude espectral reescalado de forma que  $\bar{Y}(r)$  e  $\bar{r}$  são adimensionais. Considerando apenas os  $y(r)$  relacionados as funções do estado fundamental de três e estado excitado de quatro corpos ( $n = 1$ ).

## Capítulo 5

### Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho investigamos a universalidade em sistemas de três e quatro bósons através do cálculo das suas energias de ligação e dos raios quadráticos médios. Usando uma curva universal calculada com um potencial de alcance zero corrigimos em primeira ordem em  $r_0/a$  o ponto onde um estado excitado de três corpos desaparece. Estudamos também as estruturas dos estados de quatro corpos associados ao estado fundamental de três corpos para energia de dois corpos igual a zero. Os cálculos foram realizados no espaço das configurações usando um método variacional. A definição dos parâmetros da base foi feita de duas maneiras: uma estocástica e outra utilizando uma progressão geométrica.

Vimos que os métodos variacionais são muito úteis e eficientes para tratar de problemas de poucos corpos. Especificamente o método utilizado neste trabalho pode ser facilmente estendido para mais partículas do ponto de vista da fundamentação teórica, todavia, do ponto de vista computacional o aumento do número de constituintes do sistema faz com que o processo de procura das bases e, consequentemente, a convergência do programa, torne-se um problema bastante complexo. Neste caso, técnicas computacionais mais avançadas, como programação em paralelo, devem inevitavelmente ser levadas em conta. Mostramos através de um cálculo preliminar que utilizando uma procura estocástica dos parâmetros da função de onda nós conseguimos obter resultados compatíveis com os valores conhecidos na literatura para os raios quadráticos médios e energias dos sistemas de duas, três e quatro partículas alfas.

Correções nas relações universais advindas de efeitos de alcance do potencial são

muito importantes e podem, a princípio, ser realizadas utilizando teorias efetivas. No nosso caso, porém, optamos por utilizar uma função universal que explora o conceito de limite de escala e permite reunir em uma única curva os estados Efimov. Para investigar o efeito do alcance finito do potencial variamos a energia do sistema de dois bósons interagindo através de um potencial do tipo poço quadrado e calculamos a energia do sistema de três bósons. Esses resultados foram comparados com uma curva que foi obtida com alcance zero. Desta forma, obtivemos a seguinte relação que corrige em primeira ordem em  $r_0/a$  o resultado obtido com um potencial de alcance zero:

$$\sqrt{\frac{E_2}{E_3^{(n)}}}\Big|_{\text{corte}} \approx 0.38 + 0.12 \left(\frac{r_0}{a}\right). \quad (5.1)$$

No capítulo 4 calculamos as energias e raios quadráticos médios dos sistemas de três e quatro bósons para energia de dois corpos igual a zero. Neste caso, a universalidade desses sistemas foi testada considerando-se dois potenciais diferentes, um gaussiano puramente atrativo ( $V_1$ ) e outro ( $V_2$ ) formado por duas gaussianas, uma atrativa e outra repulsiva, criando uma pequena repulsão a curtas distâncias. Com o potencial  $V_1$  as razões entre as energias e raios quadráticos médios de três bósons reproduzem muito bem os valores esperados para os estados Efimov, já no caso de  $V_2$  os valores são ligeiramente diferentes. No caso de quatro corpos, nós calculamos os dois estados de quatro bósons associados ao estado fundamental de três. Verificamos que as razões entre as energias de quatro e três corpos não satisfazem aos valores universais calculados na referência [von Stecher et al., 2009]. Vale também notar que os estados de quatro corpos acima do limiar 3+1 aparecem como estados discretizados do contínuo e, portanto, o formalismo utilizado neste trabalho não pode ser imediatamente adaptado para calcular essas energias.

Finalmente, a estrutura dos estados de quatro corpos foram estudadas através do cálculo da amplitude espectroscópica e dos respectivos fatores espectroscópicos. Mostramos que esses estados possuem uma grande probabilidade de possuir uma configuração do tipo 3+1. Todavia, no caso do estado fundamental o quarto bóson deve estar bem próximo ao trímero e a estrutura 3+1 deve ser difícil de ser observada. Já no caso do estado excitado, este também deve ser do tipo 3+1, porém agora o quarto bóson está mais afastado do trímero do que no caso do estado fundamental, assim, nesta situação poderíamos ver de fato a presença de um cluster de três

bósons. Mostramos ainda que as curvas das amplitudes espectroscópicas também são grandezas universais. As curvas devidamente reescaladas praticamente coincidem a partir de  $\bar{r} \approx 3$ , sendo que a diferença a curtas distâncias são causadas por estarmos em regiões internas ao alcance efetivo dos potenciais e, portanto, sensíveis à forma deles.

Como uma continuação natural deste trabalho, estenderemos os métodos baseados em uma expansão da função de onda em termos de uma base de quadrado integrável para o cálculo dos estados virtuais, ressonantes e de espalhamento em sistemas de poucos corpos. Estudaremos os canais de espalhamento elástico e de rearranjo para três e quatro corpos e a correlação das amplitudes de espalhamento com as escalas físicas relevantes.



## Referências

- [Adhikari et al., 1995] Adhikari, S. K., Frederico, T., & Goldman, I. D. (1995). Perturbative renormalization in the quantum few-body problem. *Phys. Rev. Lett.*, 74, 487.
- [Ali & Bodmer, 1966] Ali, S. & Bodmer, A. R. (1966). Phenomenological  $\alpha - \alpha$  potentials. *Nucl. Phys.*, 80, 99.
- [Braaten & Hammer, 2006] Braaten, E. & Hammer, H. W. (2006). Universality in few-body systems with large scattering length. *Physics Reports*, 428, 256–390.
- [Chin et al., 2010] Chin, C., Grimm, R., Julienne, P., & Tiesinga, E. (2010). Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 82, 1225.
- [Coester et al., 1970] Coester, F., S. Cohen, B., Day, & Vincent, C. M. (1970). Variation in nuclear-matter binding energies with phase-shift-equivalent two-body potentials. *Phys. Rev. C*, 1, 769.
- [Cohen-Tannoudji, 2007] Cohen-Tannoudji, C. (2007). Atom-atom interactions in ultracold quantum gases. Disponível em: <<http://cel.archives-ouvertes.fr/docs/00/34/60/23/PDF/IHP-2007.pdf>>. Acesso em: 7 de junho de 2011.
- [Cohen-Tannoudji et al., 1977] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., & Laloë, F. (1977). *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons.
- [Cornelius & Glöckle, 1986] Cornelius, T. & Glöckle, W. (1986). Efimov states for three  $^4\text{He}$  atoms? *J. Chem. Phys.*, 85, 3906.
- [Cvijovic & Klinowski, 1995] Cvijovic, D. & Klinowski, J. (1995). Taboo search: An approach to the multiple minima problem. *Science*, 267, 664.
- [de Toledo Piza, 2003] de Toledo Piza, A. F. R. (2003). *Mecânica Quântica*.
- [Delfino et al., 2000] Delfino, A., Frederico, T., & Tomio, L. (2000). Low-energy universality in tree-body models. *Few-Body Syst.*, 28, 259.
- [Efimov, 1970] Efimov, V. N. (1970). Weakly-bound states of three resonantly-interacting particles. *Soviet Journal of Nuclear Physics*, 12.

- [Fedorov & Jensen, 2001] Fedorov, D. V. & Jensen, A. S. (2001). Regularization of a three-body problem with zero-range potentials. *Phys. Rev. A: Math. Gen.*, 34, 6003.
- [Ferlaino et al., 2009] Ferlaino, F., Knoop, S., Berninger, M., Harm, W., D’Incao, J. P., Nägerl, H.-C., & Grimm, R. (2009). Evidence for universal four-body states tied to an efimov trimer. *Phys. Rev. Lett.*, 102, 140401.
- [Fonseca et al., 1979] Fonseca, A., Redish, E. F., & Shanley, P. E. (1979). Efimov effect in an analytically solvable model. *Nucl. Phys. A*, 320, 273.
- [Frederico et al., 1999] Frederico, T., Tomio, L., Delfino, A., & Amorim, A. E. A. (1999). Scaling limit of weakly bound triatomic states. *Physical Review A*, 60.
- [Frederico et al., 2011] Frederico, T., Tomio, L., Delfino, A., Hadizadeh, M. R., & Yamashita, M. T. (2011). Scales and universality in few-body systems. *Few-Body Syst.*
- [Gonziölez & Thompson, 1997] Gonziölez, J. L. M. Q. & Thompson, D. (1997). Getting started with numerov’s method. *Computers in Physic*, 5, 514.
- [Grisenti et al., 2000] Grisenti, R. E., Schöllkopf, W., Toennies, J. P., Hegerfeldt, G. C., Köhler, T., & Stoll, M. (2000). Determination of the bond length and binding energy of the helium dimer by diffraction from a transmission grating. *Phys. Rev. Lett.*, 85, 2284.
- [Hadizadeh et al., 2011] Hadizadeh, M. R., Yamashita, M. T., Tomio, L., Delfino, A., & Frederico, T. (2011). Universality and scaling limit of weakly-bound tetramers. *arxiv:1101.0378*.
- [Horiuchi & Suzuki, 2008] Horiuchi, W. & Suzuki, Y. (2008). Inversion doublets of  $3n + n$  cluster structure in excited states of  $^4\text{He}$ . *Phys. Rev. C*, 78, 034305.
- [Huber, 1985] Huber, S. (1985). Efimov states in  $^4\text{He}$  trimers by two-body effective-range and scattering-length analysis: A comparison with faddeev calculations. *Phys. Rev. A*, 31, 3981.
- [Jensen et al., 1997] Jensen, A., Garrido, E., & Fedorov, D. (1997). Three-body systems with square-well potentials in  $l=0$  states. *Few-Body Syst.*, 22, 193.
- [Jensen et al., 2004] Jensen, A., Riisager, K., Fedorov, D., & Garrido, E. (2004). Structure and reactions of quantum halos. *Rev. Mod. Phys.*, 76, 215.
- [Kolganova et al., 1997] Kolganova, E. A., Motovilov, A. K., & Sofianos, S. A. (1997). Ultralow energy scattering of a he atom off a he dimer. *Phys. Rev. A*, 56, 1686.
- [Kraemer et al., 2006] Kraemer, T. et al. (2006). Evidence for efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms. *Nature*, 440, 315.

- [Landau & Lifshitz, ] Landau, L. D. & Lifshitz, E. M. *Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory*.
- [Nakajima et al., 2010] Nakajima, S., Horikoshi, M., Mukaiyama, T., Naidon, P., & Ueda, M. (2010). Nonuniversal efimov atom-dimer resonances in a three-component mixture of  ${}^6\text{Li}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 105, 023201.
- [Nielsen et al., 2001] Nielsen, E., Fedorov, D., Jensen, A., & Garrido, E. (2001). The three-body problem with short-range interactions. *Phys. Reports*, 347, 373.
- [Numerov, 1927] Numerov, B. V. (1927). Note on the numerical integration of  $d^2x/dt^2 = f(x,t)$ . *Astronomische Nachrichten*, 230, 359.
- [Phillips, 1968] Phillips, A. C. (1968). Consistency of the low-energy three-nucleon observables and the separable interaction model. *Nucl. Phys. A*, 107, 209.
- [Platter et al., 2004] Platter, L., Hammer, H. W., & Meissner, U. G. (2004). Four-boson system with short-range interactions. *Phys. Rev. A*, 70, 52101.
- [Salinas, 1997] Salinas, S. R. A. (1997). *Introduç o  o  tica Est tica*. Editora da Universidade de S o Paulo.
- [Serra et al., 1997] Serra, P., Stanton, F., & Kais, S. (1997). Pivot method for global optimization. *Phys. Rev. E*, 55, 1162.
- [Sorensen, 2004] Sorensen, H. H. (2004). Correlation in many-body systems with the stochastic variational method. Master's thesis, Institute of Physics and Astronomy University of Aarhus.
- [Suzuki, 1998] Suzuki, Y. (1998). *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems*. Springer.
- [Suzuki & Takahashi, 2002] Suzuki, Y. & Takahashi, M. (2002).  $\alpha$  cluster condensation in  ${}^{12}\text{C}$  and  ${}^{16}\text{O}$ ? *Physical Review C*, 65, 064318.
- [Th gersen et al., 2008] Th gersen, M., Fedorov, D. V., & Jensen, A. S. (2008). N-body efimov states of trapped bosons. *Europhys. Lett.*, 83, 30012.
- [Thomas, 1935] Thomas, L. H. (1935). The interaction between a neutron and a proton the structure of  ${}^3\text{H}$ . *Physical Review*, 47.
- [Tjon, 1975] Tjon, J. (1975). Bound states of  ${}^4\text{He}$  with local interactions. *Phys. Lett. B*, 56, 217.
- [von Stecher et al., 2009] von Stecher, J., Incao, J. P. D., & Greene, C. H. (2009). Signatures of universal four-body phenomena and their relation to the Efimov effect. *Nature Phys.*, 5, 417.
- [Yamashita, 2004] Yamashita, M. T. (2004). *Sistemas Fracamente Ligados de Tr s Corpos: M culas e N cleos Ex ticos Leves*. PhD thesis, Universidade de S o Paulo.

- [Yamashita, 2008] Yamashita, M. T. (2008). Um método numérico para a solução de problemas em física quântica de poucos corpos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 30, 3312.
- [Yamashita et al., 2010] Yamashita, M. T., Fedorov, D. V., & Jensen, A. S. (2010). Universality of brunnian (n-body borromean) four- and five-body systems. *Phys. Rev. A*, 81, 063607.
- [Yamashita et al., 2002] Yamashita, M. T., Frederico, T., Delfino, A., & Tomio, L. (2002). Scaling limit of virtual states of triatomic system. *Phys. Rev. A*, 66.
- [Yamashita et al., 2006] Yamashita, M. T., Tomio, L., Delfino, A., & Frederico, T. (2006). Four-body scale near a feshbach resonance. *Europhys. Lett.*, 75, 555.

## APÊNDICE A - Elementos de Matriz

Neste apêndice usamos as referências [Suzuki, 1998, Sorensen, 2004] e as seguintes definições:

- $N$ : número de partículas
- $\phi_i = \exp\left(-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}A^{(i)}\mathbf{x}\right)$
- $\mathbf{x}$ : matriz transposta de  $\tilde{\mathbf{x}} = \left( \vec{x}_1 \quad \vec{x}_2 \quad \dots \quad \vec{x}_{N-1} \right)$
- $A^{(i)}$ : matriz de dimensão  $N - 1 \times N - 1$

### A.1 Overlap

Calculando o overlap  $\langle \phi_i | \phi_j \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | \phi_j \rangle &= \int e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}A^{(i)}\mathbf{x}} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}A^{(j)}\mathbf{x}} d\mathbf{x} \\ &= \int e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}(A^{(i)}+A^{(j)})\mathbf{x}} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Para facilitar a notação vamos definir:  $A \equiv A^{(i)} + A^{(j)}$ .

Como a matriz  $A$  pode não ser diagonal faremos a seguinte mudança de variável para garantir que temos uma matriz diagonal e com isto simplificar a resolução da integral. Considerando:

$$\mathbf{x} = T\mathbf{y}, \tag{A.1}$$

onde  $T$  é uma matriz ortogonal e  $\tilde{T}AT \equiv \mathbf{D}$  é uma matriz diagonal. Assim, o

overlap pode ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\langle \phi_i | \phi_j \rangle &= \int e^{-\frac{1}{2} \vec{y} \tilde{T} A T \vec{y}} (\det(T))^3 d\vec{y} \\ &= \int e^{-\frac{1}{2} \vec{y} D \vec{y}} (\det(T))^3 d\vec{y} .\end{aligned}$$

Como  $\det(T) = \det\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{y}}\right) = \pm 1$ , escolhamos o determinante igual a 1 para conservar o elemento de volume  $d\mathbf{x} = d\mathbf{y}$ . E como  $D$  é uma matriz diagonal podemos resolver a integral para cada componente da matriz  $\mathbf{y}$ , ou seja:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \prod_{k=1}^{N-1} \int e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} d\vec{y}_k , \quad (\text{A.2})$$

onde  $d_k$  é o elemento  $kk$  da matriz  $D$  e  $\vec{y}_k$  é o elemento  $k$  da matriz:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \vec{y}_1 \\ \vdots \\ \vec{y}_{N-1} \end{pmatrix} . \quad (\text{A.3})$$

Integrando a parte angular de:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \prod_{k=1}^{N-1} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} y_k^2 \sin \theta_k d\theta_k d\phi_k dy_k ,$$

obtemos:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \prod_{k=1}^{N-1} \left( 4\pi \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} y_k^2 dy_k \right) . \quad (\text{A.4})$$

Resolvendo a integral da equação A.4, usando:

$$\frac{\partial}{\partial d_k} \left( e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} \right) = -\frac{1}{2} y_k^2 e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} ,$$

temos:

$$I = 4\pi \left( -2 \frac{\partial}{\partial d_k} \right) \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} dy_k . \quad (\text{A.5})$$

Sabendo que:

$$\int_0^\infty e^{-ax^2} x^n dx = \frac{1}{2} a^{-\frac{n+1}{2}} \Gamma \left( \frac{n+1}{2} \right) , \quad (\text{A.6})$$

obtemos:

$$\begin{aligned} I &= 4\pi \left( -2 \frac{\partial}{\partial d_k} \right) \frac{1}{2} \left( \frac{d_k}{2} \right)^{-\frac{1}{2}} \Gamma \left( \frac{1}{2} \right) \\ &= \left( \frac{2\pi}{d_k} \right)^{\frac{3}{2}} . \end{aligned}$$

Substituindo o resultado acima em (A.4), temos:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \prod_{k=1}^{N-1} \left( \frac{2\pi}{d_k} \right)^{\frac{3}{2}} . \quad (\text{A.7})$$

Como  $\prod_{k=1}^{N-1} d_k = \det D = \det(\tilde{T}AT) = \det(A) = \det(A^{(i)} + A^{(j)})$ , obtemos finalmente a seguinte expressão para o overlap:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \left[ \frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(A^{(i)} + A^{(j)})} \right]^{\frac{3}{2}} . \quad (\text{A.8})$$

## A.2 Energia Cinética

A energia cinética no sistema de coordenadas das partículas é dada pela seguinte expressão:

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \hat{\nabla}_i^2 . \quad (\text{A.9})$$

Onde:  $\hat{\nabla}^T = (\hat{\nabla}_1 \hat{\nabla}_2 \dots \hat{\nabla}_N)$  é o operador gradiente nas coordenadas de cada partícula.

Passando para as coordenadas de Jacobi usando 2.15, podemos escrever que:

$$x_i = \sum_{j=1}^N U_{ij} r_j \Rightarrow \frac{\partial}{\partial r_j} = \frac{\partial x_i}{\partial r_j} \frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^N U_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} ,$$

ou seja,

$$\hat{\nabla}_i = \sum_{k=1}^N U_{ki} \hat{\nabla}_{x_k} . \quad (\text{A.10})$$

Substituindo a relação acima na equação da Energia Cinética equação A.9, temos:

$$\begin{aligned} E &= \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \left( \sum_{k=1}^N U_{ki} \hat{\nabla}_{x_k} \right) \left( \sum_{l=1}^N U_{li} \hat{\nabla}_{x_l} \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \left( \sum_{k=1}^{N-1} U_{ki} \hat{\nabla}_{x_k} + U_{Ni} \hat{\nabla}_{x_N} \right) \left( \sum_{l=1}^{N-1} U_{li} \hat{\nabla}_{x_l} + U_{Ni} \hat{\nabla}_{x_N} \right). \end{aligned}$$

Como os termos cruzados no produto serão iguais a zero a expressão fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} E &= \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \left[ \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} U_{ki} U_{li} \hat{\nabla}_{x_k} \cdot \hat{\nabla}_{x_l} + U_{Ni} U_{Ni} \hat{\nabla}_{x_N} \cdot \hat{\nabla}_{x_N} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} \left( \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} U_{ki} U_{li} \right) \hat{\nabla}_{x_k} \cdot \hat{\nabla}_{x_l} + \sum_{i=1}^N U_{Ni} U_{Ni} \frac{\hbar^2}{2m_i} \hat{\nabla}_{x_N}^2. \end{aligned}$$

Definindo:

$$\Lambda_{kl} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} U_{ki} U_{li}, \quad (\text{A.11})$$

e usando:  $\sum_{j=1}^N U_{ij} = \delta_{Ni}$  e  $U_{Ni} = \frac{m_i}{m_{12\dots N}}$ , sendo  $m_{12\dots N} = m_1 + m_2 + \dots + m_N$ , temos:

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} \Lambda_{kl} \hat{\nabla}_{x_k} \cdot \hat{\nabla}_{x_l} + \delta_{NN} \frac{m_i}{2m_{12\dots N}} \frac{\hbar^2}{2m_i} \hat{\nabla}_{x_N}^2. \quad (\text{A.12})$$

Como  $\Pi_j = -i\hbar \hat{\nabla}_{x_j}$  é o momento canônico conjugado, podemos escrever a equação anterior da seguinte forma:

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} \Lambda_{kl} \Pi_k \cdot \Pi_l - \frac{\Pi_N^2}{2m_{12\dots N}}. \quad (\text{A.13})$$

Como a energia do centro de massa é dada por:  $T_{cm} = \frac{\Pi_N^2}{2m_{12\dots N}}$  e o momento pode ser escrito da seguinte forma  $-\hbar^2 \hat{\nabla}_i^2 = p_i^2$ , temos:

$$\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} - T_{cm} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{N-1} \Lambda_{kl} \Pi_k \cdot \Pi_l. \quad (\text{A.14})$$



Agora podemos calcular o termo de energia do Hamiltoniano ( $h_{ij}^T$ ):

$$h_{ij}^T = \langle \phi_i | \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} - T_{cm} | \phi_j \rangle . \quad (\text{A.15})$$

Escrevendo o lado direito da equação A.14 na seguinte forma:

$$\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \Lambda_{ij} \hat{\nabla}_{x_i} \cdot \hat{\nabla}_{x_j} = \hat{\nabla}_x^T \Lambda \hat{\nabla}_x \quad (\text{A.16})$$

e substituindo em A.15, temos:

$$h_{ij}^T = -\frac{\hbar^2}{2} \langle \phi_i | \hat{\nabla}_x^T \Lambda \hat{\nabla}_x | \phi_j \rangle . \quad (\text{A.17})$$

Da mecânica quântica sabemos que:

$$\langle \psi_a | \frac{\partial^2}{\partial x^2} | \psi_b \rangle = \int dx \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi_a^* \frac{\partial \psi_b}{\partial x} \right) - \frac{\partial \psi_a^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_b}{\partial x} \right] = - \int dx \frac{\partial \psi_a}{\partial x} \frac{\partial \psi_b}{\partial x} . \quad (\text{A.18})$$

Portanto:

$$h_{ij}^T = -\frac{\hbar^2}{2} \langle \phi_i | \hat{\nabla}_x^T \Lambda \hat{\nabla}_x | \phi_j \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \langle \hat{\nabla}_x^T \phi_i | \Lambda | \hat{\nabla}_x \phi_j \rangle . \quad (\text{A.19})$$

Derivando, temos:

$$h_{ij}^T = \frac{\hbar^2}{2} \langle \phi_i | \tilde{\mathbf{x}} A^{(i)} \Lambda A^{(j)} \mathbf{x} | \phi_j \rangle , \quad (\text{A.20})$$

$$h_{ij}^T = \frac{\hbar^2}{2} \int e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{x}} A^{(i)} \mathbf{x}} \tilde{\mathbf{x}} A^{(i)} \Lambda A^{(j)} \mathbf{x} e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{x}} A^{(j)} \mathbf{x}} d\mathbf{x} . \quad (\text{A.21})$$

Fazendo a seguinte mudança de variável  $\mathbf{x} = T\mathbf{y}$  (ver seção A.1), temos:

$$h_{ij}^T = \frac{\hbar^2}{2} \int e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{y}} \tilde{T} A^{(i)} T \mathbf{y}} \tilde{\mathbf{y}} \tilde{T} A^{(i)} \Lambda A^{(j)} T \mathbf{y} e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{y}} \tilde{T} A^{(j)} T \mathbf{y}} (\det T)^3 d\mathbf{y} . \quad (\text{A.22})$$

Definindo:  $D^{(i)} \equiv \tilde{T} A^{(i)} T$ ,  $D^{(j)} \equiv \tilde{T} A^{(j)} T$  e  $F \equiv \tilde{T} A^{(i)} \Lambda A^{(j)} T$ .

Como  $\det(T) = \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial \tilde{\mathbf{y}}} = \pm 1$ , podemos escolher  $\det(T) = 1$ , com isto temos:

$$h_{ij}^T = \frac{\hbar^2}{2} \int e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{y}} D^{(i)} \mathbf{y}} \tilde{\mathbf{y}} F \mathbf{y} e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{y}} D^{(j)} \mathbf{y}} d\mathbf{y} . \quad (\text{A.23})$$

Como as matrizes  $D^{(i)}$ ,  $D^{(j)}$  e  $F$  são diagonais nós podemos escrever a integral

como um produto das integrais de cada elemento da diagonal destas matrizes, ou seja:

$$h_{ij}^T = \prod_{k=1}^{N-1} \frac{\hbar^2}{2} \int e^{-\frac{1}{2}d_k^{(i)}y_k^2} y_k^2 f_k e^{-\frac{1}{2}d_k^{(j)}y_k^2} y_k^2 d\vec{y}_k . \quad (\text{A.24})$$

Calculando uma integral referente ao indice  $k$ , temos:

$$I_k = \frac{\hbar^2}{2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\frac{1}{2}d_k^{(i)}y_k^2} y_k^2 f_k e^{-\frac{1}{2}d_k^{(j)}y_k^2} y_k^2 \sin \theta d\theta d\phi dy_k . \quad (\text{A.25})$$

Integrando a parte angular, obtemos:

$$I_k = \frac{\hbar^2}{2} f_k 4\pi \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2}(d_k^{(i)}+d_k^{(j)})y_k^2} y_k^4 dy_k . \quad (\text{A.26})$$

Como:  $\frac{\partial \exp(-\frac{1}{2}(d_k^{(i)}+d_k^{(j)})y_k^2)}{\partial (d_k^{(i)}+d_k^{(j)})} = (-\frac{1}{2})y_k^2 e^{-\frac{1}{2}(d_k^{(i)}+d_k^{(j)})y_k^2}$  podemos escrever a integral da seguinte forma:

$$I_k = \frac{\hbar^2}{2} f_k 4\pi (-2) \frac{\partial}{\partial (d_k^{(i)} + d_k^{(j)})} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2}(d_k^{(i)}+d_k^{(j)})y_k^2} y_k^4 dy_k . \quad (\text{A.27})$$

Para facilitar vamos calcular de forma mais geral a integral acima, ou seja:

$$\begin{aligned} 4\pi \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2}ax^2} x^2 dx &= 4\pi (-2) \frac{\partial}{\partial a} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx \\ &= -4\pi \frac{\partial}{\partial a} \left( \frac{a}{2} \right)^{-\frac{1}{2}} \Gamma \left( \frac{1}{2} \right) \\ &= \left( \frac{2\pi}{a} \right)^{\frac{3}{2}} . \end{aligned}$$

Substituindo este resultado em A.27, temos:

$$\begin{aligned} I_k &= \frac{\hbar^2}{2} f_k (-2) \frac{\partial}{\partial (d_k^{(i)} + d_k^{(j)})} \left( \frac{2\pi}{d_k^{(i)} + d_k^{(j)}} \right)^{\frac{3}{2}} \\ &= \frac{3\hbar^2}{2} f_k (d_k^{(i)} + d_k^{(j)}) \left( \frac{2\pi}{d_k^{(i)} + d_k^{(j)}} \right)^{\frac{3}{2}} . \end{aligned}$$

Substituindo o resultado anterior na equação A.24, temos:

$$\begin{aligned} h_{ij}^T &= \prod_{k=1}^{N-1} \left[ \frac{3\hbar^2}{2} f_k (d_k^{(i)} + d_k^{(j)})^{-1} \left( \frac{2\pi}{d_k^{(i)} + d_k^{(j)}} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \\ &= \frac{3\hbar^2}{2} \text{Tr}[(D^{(i)} + D^{(j)})^{-1} F] \left( \frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(D^{(i)} + D^{(j)})} \right)^{\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

Lembrando das definições de  $D$ ,  $F$  e que  $T$  é uma matriz ortogonal podemos reescrever a equação acima da seguinte forma:

$$h_{ij}^T = \frac{3\hbar^2}{2} \text{Tr}[(A^{(i)} + A^{(j)})^{-1} A^{(i)} \Lambda A^{(j)}] \left( \frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(A^{(i)} + A^{(j)})} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (\text{A.28})$$

Usando a propriedade  $\text{Tr}[ABC] = \text{Tr}[CBA]$  e a equação A.8, temos finalmente os elementos de matriz da energia cinética dados por:

$$h_{ij}^T = \frac{3\hbar^2}{2} \text{Tr}[A^{(j)} (A^{(i)} + A^{(j)}) A^{(i)} \Lambda] \langle \phi_i | \phi_j \rangle. \quad (\text{A.29})$$

### A.3 Potencial

Considerando um potencial local que pode ser escrito da seguinte forma:

$$V(\vec{r}_n - \vec{r}_m) = \int V(\vec{r}) \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) d\vec{r}. \quad (\text{A.30})$$

Assim, podemos escrever que:

$$\langle \phi_i | V(\vec{r}_n - \vec{r}_m) | \phi_j \rangle = \int d\vec{r} V(\vec{r}) \langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle. \quad (\text{A.31})$$

Para resolver o lado direito da equação acima vamos inicialmente calcular  $\langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle$ , considerando  $\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}^{(i)} + \mathbf{A}^{(j)}$ :

$$\langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle = \int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\vec{\mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{x}} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j - \vec{r}). \quad (\text{A.32})$$

Sabendo que

$$\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j - \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j - \vec{r})}, \quad (\text{A.33})$$

temos:

$$\langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{x} + i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j - \vec{r})} . \quad (\text{A.34})$$

Usando 2.18, temos:

$$\langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{x} + i\mathbf{S}\cdot\mathbf{x}} , \quad (\text{A.35})$$

onde  $\mathbf{S} = \widetilde{W^{(ij)}}\vec{k}$ .

Resolvendo inicialmente a integral  $I = \int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{x} + i\mathbf{S}\cdot\mathbf{x}}$  usando A.1, temos:

$$I = \prod_{i=1}^{N-1} \int d\vec{y}_i e^{(-\frac{1}{2}D_i y_i^2 + \vec{S}_i \cdot \vec{y}_i)} \quad (\text{A.36})$$

$$= \prod_{i=1}^{N-1} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_1^{-1} e^{-\frac{1}{2}D_i y_i^2 + S_i y_i \cos \theta_i} y_i^2 d \cos \theta_i d\phi_i dy_i , \quad (\text{A.37})$$

onde  $D = \tilde{T}\mathbf{A}T$ .

Resolvendo a integral acima obtemos:

$$I = \prod_{i=1}^{N-1} \left( \frac{2\pi}{D} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{S^2}{2D}} \quad (\text{A.38})$$

$$= \left[ \frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(\mathbf{A})} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{S}} . \quad (\text{A.39})$$

Substituindo o resultado anterior em A.35, temos que:

$$\langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \left[ \frac{(2\pi)^{N-1}}{\det(\mathbf{A})} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{S}} \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} . \quad (\text{A.40})$$

Resolvendo a integral em  $\vec{k}$ , reescrevendo o resultado usando a relação A.8 e usando a definição:

$$\frac{1}{C_{nm}} = \widetilde{W^{(ij)}}(A^{(i)} + A^{(j)})^{-1}W^{(ij)} , \quad (\text{A.41})$$

obtemos:

$$\langle \phi_i | \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m - \vec{r}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2}C_{nm}r^2} . \quad (\text{A.42})$$

Portanto, o elemento de matriz  $\langle \phi_i | V(\vec{r}_n - \vec{r}_m) | \phi_j \rangle$  para um potencial local  $V$  é

dado por:

$$\langle \phi_i | V(\vec{r}_n - \vec{r}_m) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int V(\vec{r}) e^{-\frac{1}{2} C_{nm} r^2} d\vec{r}. \quad (\text{A.43})$$

### A.3.1 Potencial de Ali-Bodmer

O potencial de Ali-Bodmer é dado por:

$$V_a(\vec{r}) = V_1 e^{-(\rho_1 r)^2} + V_2 e^{-(\rho_2 r)^2}, \quad (\text{A.44})$$

sendo  $V_1 = 500$  MeV,  $V_2 = -130$  MeV,  $\rho_1 = 0.7$  e  $\rho_2 = 0.475$ .

Substituindo este potencial em A.43, temos:

$$\langle \phi_i | V_a(\vec{r}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \left[ V_1 \int e^{-(\rho_1^2 + \frac{1}{2} C_{nm}) r^2} d\vec{r} + V_2 \int e^{-(\rho_2^2 + \frac{C_{nm}}{2}) r^2} d\vec{r} \right]. \quad (\text{A.45})$$

Resolvendo as integrais, obtemos:

$$\langle \phi_i | V_a(\vec{r}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle (C_{nm})^{\frac{3}{2}} \left[ \frac{V_1}{(2\rho_1 + C_{nm})^{\frac{3}{2}}} + \frac{V_2}{(2\rho_2 + C_{nm})^{\frac{3}{2}}} \right]. \quad (\text{A.46})$$

### A.3.2 Potencial Gaussiano

O potencial Gaussiano é dado por:

$$V_G(\vec{r}) = V e^{-\rho^2 r^2}. \quad (\text{A.47})$$

O resultado é similar ao potencial de Ali-Bodmer, pois a diferença entre esses potenciais é apenas uma gaussiana a mais. Portanto, conhecendo o resultado para o potencial de Ali-Bodmer facilmente podemos ver que o elemento de matriz para o potencial Gaussiano é dado por:

$$\langle \phi_i | V_G(\vec{r}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle (C_{nm})^{\frac{3}{2}} \left[ \frac{V}{(2\rho^2 + C_{nm})^{\frac{3}{2}}} \right]. \quad (\text{A.48})$$

### A.3.3 Potencial de Coulomb

O potencial de Coulomb é dado por:

$$V_c(\vec{r}) = \frac{4e^2}{r}, \quad (\text{A.49})$$

onde  $e$  é a carga da partícula.

Substituindo em A.43, temos:

$$\langle \phi_i | V_c(\vec{r}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int \frac{4e^2}{r} e^{-\frac{1}{2}C_{nm}r^2} d\vec{r}. \quad (\text{A.50})$$

Resolvendo a integral obtemos:

$$\langle \phi_i | V_c(\vec{r}) | \phi_j \rangle = 8e^2 \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.51})$$

### A.3.4 Poço de potencial

O poço de potencial é dado por:

$$V_p(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 < r < R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad (\text{A.52})$$

No caso em que temos um sistema constituido apenas por dois corpos sob o poço de potencial a equação de Schrödinger é descrita da seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\Psi}{dr^2} + V(r)\Psi = E_2\Psi, \quad (\text{A.53})$$

onde  $\mu$  é a massa relativa das duas partículas. Esta equação pode ser resolvida facilmente como podemos ver em qualquer livro de mecânica quântica, por exemplo, [de Toledo Piza, 2003].

Sua solução é dada por:

$$\Psi_I(r) = A \sin K_1 r, \quad 0 < r < R \quad (\text{A.54})$$

$$\Psi_{II}(r) = B \exp(-K_2 r), \quad r > R \quad (\text{A.55})$$

onde:  $K_1 = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E_2)}}{\hbar}$  e  $K_2 = \frac{\sqrt{2\mu E_2}}{\hbar}$ .

Aplicando as condições de fronteira, temos que  $K_1 \cot K_1 R = -K_2$ .

Já no caso de sistema de mais de duas partículas não conseguimos resolver analiticamente a equação de Schrödinger. Nesses casos, usamos o método variacional. Por isto, vamos calcular agora os elementos de matriz com o poço de potencial.

Substituindo o potencial A.52 na equação A.43, temos:

$$\langle \phi_i | V_p | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \frac{C_{nm}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi \int_0^R V_0 e^{-\frac{1}{2}C_{nm}r^2} r^2 dr, \quad (\text{A.56})$$

sendo  $C_{nm}$  dado pela equação A.41.

Resolvendo a integral acima lembrando que:

$$\frac{d^2}{dt^2}(e^{-t^2}) = -2e^{-t^2} + 4t^2e^{-t^2} \Rightarrow t^2e^{-t^2} = \frac{1}{4} \left( 2e^{-t^2} + \frac{d^2}{dt^2}(e^{-t^2}) \right) \quad (\text{A.57})$$

e sabendo que a função erro pode ser escrita como  $\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$ , obtemos:

$$\langle \phi_i | V_p | \phi_j \rangle = V_0 \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left[ \text{erf} \left( \sqrt{\frac{1}{2}C_{nm}R} \right) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2}C_{nm}R} e^{-\frac{1}{2}C_{nm}R^2} \right]. \quad (\text{A.58})$$

## A.4 Raio Quadrático Médio

Calculando o raio quadrático médio em relação a distância  $\vec{x}_{N-1}$ . Para facilitar as contas usaremos a seguinte relação:

$$\vec{x}_{N-1}^2 = \tilde{\mathbf{x}} F \mathbf{x}. \quad (\text{A.59})$$

Onde  $F$  é uma matriz de dimensão  $N - 1 \times N - 1$  com todos elementos nulos exceto o elemento  $f_{N-1N-1} = 1$ .

Com isto podemos escrever que:

$$\langle \phi_i | \vec{x}_{N-1}^2 | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \tilde{\mathbf{x}} F \mathbf{x} | \phi_j \rangle = \int \tilde{\mathbf{x}} F \mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{x}}(A^{(i)} + A^{(j)})\mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (\text{A.60})$$

Considerando A.1 e definindo  $G \equiv \tilde{T}FT$  e  $\mathbf{D} \equiv \tilde{T}(A^{(i)} + A^{(j)})T$ , obtemos:

$$\langle \phi_i | \bar{x}_{N-1}^2 | \phi_j \rangle = \int \tilde{\mathbf{y}} G \mathbf{y} e^{-\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{y}} D \mathbf{y}} d\mathbf{y} = \prod_{k=1}^{N-1} \int g_k y_k^2 e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} d\vec{y}_k. \quad (\text{A.61})$$

Calculando a integral:

$$\begin{aligned} I_k &= \int g_k y_k^2 e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} d\vec{y}_k \\ &= 4\pi g_k \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2} d_k y_k^2} y_k^4 dy_k = 4\pi g_k \left( 4 \frac{\partial^2}{\partial d_k^2} \right) \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2} dy_k} \\ &= 3d_k^{-1} g_k \left( \frac{2\pi}{d_k} \right)^{\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

Portanto, temos:

$$\langle \phi_i | \bar{x}_{N-1}^2 | \phi_j \rangle = 3\text{Tr}[(A^{(i)} + A^{(j)})^{-1} F] \langle \phi_i | \phi_j \rangle. \quad (\text{A.62})$$

Assim, o raio quadrático médio em relação ao centro de massa de duas, três e quatro partículas, serão dados por:

$$\sqrt{R_N^2} = \frac{N-1}{N} \sqrt{\langle \Psi | \bar{x}_{N-1}^2 | \Psi \rangle}, \quad (\text{A.63})$$



## *APÊNDICE B – Comprimento de Espalhamento*

Para entendermos a definição de comprimento de espalhamento, vamos usar um exemplo simples. Considerando dois átomos com massa  $m$  que interagem através de um potencial de curto alcance na região de baixas energias. O espalhamento elástico desses dois átomos com momentos opostos  $\pm\hbar k$  e energia cinética dada por  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{m}$ , pode ser descrito por uma função de onda composta por uma onda plana e outra esférica:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (\text{B.1})$$

Esta equação define a amplitude de espalhamento  $f_k(\theta)$  que depende do ângulo  $\theta$  e do número de onda  $k$ .

Nos sistemas que estamos lidando, neste trabalho, o momento angular é nulo  $L = 0$ , pois estamos tratando de sistemas de baixas energias e nesses casos apenas a onda  $S$  contribui de forma significativa para a expansão em ondas parciais da amplitude de espalhamento.

Assim, podemos escrever a amplitude de espalhamento da seguinte forma [de Toledo Piza, 2003]:

$$f_k^{(+)}(\theta) \rightarrow \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \quad kR \ll 1. \quad (\text{B.2})$$

Neste caso, a seção de choque é independente de  $\theta$ , pois  $P_{l=0}(\theta) = 1$  e é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \rightarrow \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (\text{B.3})$$

No limite de baixas energia com potencial de curto alcance a relação  $Rk \ll 1$  tem que ser satisfeita, sendo  $R$  o comprimento relacionado a extensão espacial

do potencial. E para que a seção de choque permaneça finita quando  $k \rightarrow 0$  a defasagem  $\delta_0$  deve se anular linearmente com  $k$  [de Toledo Piza, 2003]. Por isso, é mais apropriado usarmos uma outra quantidade para descrever a seção de choque no limite de baixas energia, que é dada por:

$$a \equiv - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sin \delta(k)}{k} , \quad (\text{B.4})$$

sendo  $a$  uma grandeza com dimensão de comprimento e por isso, é chamada de comprimento de espalhamento.

Assim, podemos escrever a seção de choque da seguinte forma:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = a^2 . \quad (\text{B.5})$$

## APÊNDICE C – Método Numerov

O método Numerov foi desenvolvido por Boris Vasil'evich Numerov [Numerov, 1927]. Ele é usado para resolver equações diferenciais ordinárias de segunda ordem na qual o termo de primeira ordem não aparece [Gonziölez & Thompson, 1997]. Ou seja, para uma equação do tipo:

$$\frac{d^2}{dr^2}f(r) = C(r)f(r) \quad \text{sendo} \quad C(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}(V(r) - E). \quad (\text{C.1})$$

Calculando a seguinte diferença:

$$\delta f(r) = f\left(r + \frac{h}{2}\right) - f\left(r - \frac{h}{2}\right), \quad (\text{C.2})$$

temos:

$$\delta^2 f(r) = f(r+h) - 2f(r) + f(r-h). \quad (\text{C.3})$$

Expandindo  $f(r+h)$  e  $f(r-h)$  usando a expansão de Taylor, obtemos:

$$f(r+h) = f(r) + h\frac{df(r)}{dr} + \frac{h^2}{2!}\frac{d^2f(r)}{dr^2} + \frac{h^3}{3!}\frac{d^3f(r)}{dr^3} + \frac{h^4}{4!}\frac{d^4f(r)}{dr^4} + \dots \quad (\text{C.4})$$

$$f(r-h) = f(r) - h\frac{df(r)}{dr} + \frac{h^2}{2!}\frac{d^2f(r)}{dr^2} - \frac{h^3}{3!}\frac{d^3f(r)}{dr^3} + \frac{h^4}{4!}\frac{d^4f(r)}{dr^4} + \dots \quad (\text{C.5})$$

Com isto, podemos reescrever C.3 da seguinte forma:

$$\delta^2 f(r) = h^2\frac{d^2f(r)}{dr^2} + \frac{1}{12}h^4\frac{d^4f(r)}{dr^4} + \dots \quad (\text{C.6})$$

Substituindo a equação C.1 na equação anterior e desconsiderando os termos a partir da derivada de quarta ordem, temos:

$$\delta^2 f(r) = h^2(C(r)f(r)) + \frac{1}{12}h^4\frac{d^2(C(r)f(r))}{dr^2}. \quad (\text{C.7})$$

Podemos dizer que:

$$h^2 \frac{d^2(C(r)f(r))}{dr^2} \approx \delta^2(C(r)f(r)) . \quad (\text{C.8})$$

Portanto:

$$\delta^2 f(r) = h^2 C(r) f(r) + \frac{1}{12} h^2 (C(r+h)f(r+h) - 2C(r)f(r) + C(r-h)f(r-h)) . \quad (\text{C.9})$$

Reescrevendo a equação acima usando a equação C.3, obtemos:

$$\left(1 - \frac{1}{12} h^2 C(r+h)\right) f(r+h) - \left(2 + \frac{10}{12} h^2 C(r)\right) f(r) + \left(1 - \frac{1}{12} h^2 C(r-h)\right) f(r-h) = 0 . \quad (\text{C.10})$$

Conceitualmente, o método Numerov começa a partir de um ponto inicial e, em seguida, dá um curto passo para frente no tempo para encontrar o ponto próximo a solução. O processo continua com as etapas subsequentes para mapear a solução.