Universidade Federal de Santa Catarina Curso de Pós-Graduação em Física

Tratamento Microscópico do Modo Tesoura em Condensado de Bose-Einstein Confinado Baseado em Teorias de Resposta Linear

Thales Costa Soares

Prof. Dr. Frederico Firmo de Souza Cruz - Orientador

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina para obtenção Do Grau de Mestre em Ciências Universidade Federal de Santa Catarina Curso de Pós-Graduação em Física

Tratamento Microscópico do Modo Tesoura em Condensados de Bose-Einstein Confinado Baseado em Teorias de Resposta Linear

Thales Costa Soares

Banca Examinadora

Prof. Dr. Frederico Firmo de Souza Cruz - USFC

(Presidente e Orientador)

Prof. Dr. Arnaldo Gammal – IFT-UNESP

Prof. Dr. Marcus E. Benghi Pinto - UFSC

Prof. Dr. Sidney S. Avancini - UFSC (Suplente)

Todos nós estamos na sarjeta, Alguns querem olhar para as estrelas **Oscar Wild**

(...)

E não há melhor resposta Que o espetáculo da vida: vê-la desfiar seu fio que também se chama vida, ver a fábrica que ela mesma, teimosamente, se fabrica, vê-la brotar como há pouco em nova vida explodida; mesmo quando é assim pequena a explosão como a ocorrida; mesmo quando é uma explosão como a de há pouco, franzina; mesmo quando é a explosão de uma vida severina João Cabral de Melo Neto

Dedicatória

A Deus e à minha família

Agradecimentos

- Gostaria de agradecer ao Prof. Fred que sempre me orientou com entusiasmo e amizade, e por quem tenho uma grande estima e admiração.
- Agradeço a todos os amigos que fiz em Floripa seja na universidade ou fora dela, em especial as secretárias da PG Sônia, Telma e Malvina. Ao pessoal da sala 60, o Guidon, Carlos, Emerson, Marquinho, Paulo Sena Aquino, Higino (ou Girino para os íntimos), Gerson e Luiz. Aos que saíram do departamento para outras instituições, em especial Lande, o Cristiano Jasper, o Fábio Veiga e o Adriano. Ao Fábio Santana e ao Édio, que me ensinou muito do vocabulário e da prosódia "manezinha". Ao pessoal da astrofísica, o Joãozinho, China, Reiner. Ao Ênio e ao Rafael que sempre colaboraram no futebol das sextas e a todo pessoal que ia dar uma conferida na gorduchina Aos amigos que fiz no departamento, futuros colegas da Pós Graduação Eduardo Ismania, Renato, Josué, Alex, Gabiru, Felipe, ao pessoal do Labidex, e a todos os outros que brincavam com o "carioca" pelos corredores do departamento. Ao Japa (Daniel Ofugi) e ao Mikael.
- Registro aqui também meus agradecimentos aos grandes amigos os quais tive oportunidade de conhecê-los mais de perto e que certamente transformaram a saudade que sentia do RJ em alegrias. Valeu Humba, mas vc é mais teimoso do que eu..... Aos Eduardos Maluquinho e Duzzioni e ao Marquinho.
- Não posso deixar de reconhecer a grande contribuição que prestou a Luciara em todas as etapas do mestrado, com sua disposição em ajudar e a sua amizade e gostaria de deixar um grande abraço também a Steve e seus filhos.
- Aos amigos que saíram do Rio de Janeiro na "árdua" e "penosa" viagem Rio Floripa e vieram me visitar, o sempre amigo Betão, o Mário e o Pedro.

- A todo pessoal de São Gonçalo, minha terra natal, e em especial aos grandes amigos que fiz em minha infância Alexandre (Gil), Jaime (vacilão, porém amigo), Luciano e Pierre, que estarão sempre presente em todas as etapas de mina vida.
- Ao pessoal do Fundão, o Punk, Weuber, Cláudio (Catama), Wallace, Leandro, Luis Alexandre, Alexandre, Aline, Lilian, Simone, Helga, Roberta....
- Aos professores da UFSC Michelin que sempre foi muito amigo, ao Arden e ao Nilton Branco
- Um grande obrigado aos amigos Ricardo Simões, com quem eu sempre posso contar, ao Marcos Roma e Ildeu. A Penha, que me resgatou à vida de pesquisa e a física e ao Fred que deu continuidade a ela.
- Gostaria de agradecer à toda minha família, minha avó, aos meu irmãos, Fábio e Adriana, que foram dar uma conferida na ilha da magia e aos meus pais, Pedro e Celina. À eles qualquer agradecimento é pouco perto do carinho. Ao meu avô Dário (*in memoriam*), que me emprestou seu gosto pelas ciências
- A minha namorada, Patrícia, que, sempre muito compreensiva e carinhosa, soube me dar forças a cada vez que as coisas pareciam difíceis.
- Por fim ao Povo Brasileiro, que através da CAPES financiou nosso trabalho de pesquisa.

Índice

1	Dec	licatória	iv		
A	Agradecimentos				
Resumo					
Re	Resumo				
A	Abstract				
Introdução					
	1.1	Resfriamento e Armadilhamento	2		
	1.2	Armadilha	3		
	1.3	Interação	7		
	1.4	Efeito da Interação no Estado Fundamental	8		
	1.5	Excitação Coletiva	12		
	1.6	Modo Tesoura	14		
2	Des	crição do Estado Fundamental	18		
	2.1 Determinação da Equação de Campo Médio a Partir de um Princípio				
		de Mínimo	19		
	2.2	Cálculo do Estado Fundamental	21		

3	Res	posta Linear: VPM (Vibration Potencial Model)	25
4 Conclusões e Resultados			33
	4.1	Diagonalização do Hamiltoniano na Base de Oscilador Harmônico	34
	4.2	Cálculo do Modo Tesoura	36
Conclusão			
Α	Der	ivação Microscópica da Equação de Gross-Pitaveski	42
в	B Descrição Hidrodinâmica		49
\mathbf{C}	Pse	udo-potencial	52
Bi	Bibliografia		

Resumo

O modo tesoura foi objeto de estudo em vários sistemas de muitos corpos e recentemente em condensados de Bose-Einstein para demonstrar as propriedades de superfluido nesse sistema. Quando a temperatura finita há o aparecimento de duas frequências distintas para o gás térmico: Uma, a mais baixa, corresponde ao movimento de rotação do fluido clássico relação a um eixo de simetria e outra, de frequência mais alta, que corresponde ao movimento de fluido irrotacional, característico de sistemas superfluidos. Guéry-Odelin *et al.* [1]propuseram que esse modo poderia revelar o comportamento superfluido em condensados de Bose-Einstein, pois a temperatura zero o sistema apresenta apenas o modo irrotacional, desaparecendo o modo elástico.

Nesse trabalho desenvolvemos um método microscópico para o tratamento de excitações coletivas em condensados, baseada na resposta linear do sistema à presença de um campo externo, utilizando o Princípio Variacional Dependente do Tempo (PVDT) para derivar as equações dinâmicas e, com isso, obtemos um modelo esquemático para o tratamento de gases de Bose-Einstein armadilhados a temperatura zero. Para aplicar o modelo faz-se necessário a descrição do estado fundamental para construir a hamiltoniana de campo médio. Aplica-se então essa técnica ao estudo do modo tesoura, usando como operador de excitação coletiva um campo quadrupolar, pois ele é associado a simetria do modo tesoura, e chega-se a sua frequência de excitação. Damos também uma interpretação microscópica do desaparecimento do modo elástico.O resultado que chegamos está de acordo com o obtido por Guéry-Odelin *et al.* através da teoria hidrodinâmica de superfluidos e com o resultado medido por Maragò *et al.*[2].

Abstract

Scissors Mode, in many body systems and also in Bose-Einstein Condensates BEC, is a central problem related to rotation phenomena. It was used by Guéry-Odelin *et al.* [1] to demonstrate superfluid properties in BEC. When the system is at finite temperature, the thermal gas exhibites two kinds of excitation: First, the lowest frequency, related with a classical rotation of the gas around the symmetry axis. Second, we also have an irrotational flow of the fluid, which is a signature of superfluid systems. As analized into the hydrodynamic approach, when the system is at zero temperature, it only exhibits the irrotational flow and the rigid rotation is supressed

In this work we develop a microscopic treatment for collective excitations based on Linear Response Theory of an external field, using the Time Dependent Variational Principle to derivate the dynamical equations. We obtain a schematic model to treat the collective excitation of trapped Bose-Einstein gases at zero temperature. It is also necessary to determine the condensate's ground state for the mean field Hamiltonian. Now, as the scissors mode geometry is related with a quadrupolar shape, we take a quadrupolar field to generate the collective motion. We then apply this approach to extract the zero temperature frequency of the scissors' mode. In this treatment, it is also possible to understand the microscopic supression of the rigid rotation at zero temperature. Our results are in good agreement with theoretical results of Guéry-Odelin et~al. and the experimental results of Maragò et~al.[2].

Introdução

A Condensação de Bose-Einstein (CBE) é a ocorrência de uma ocupação macroscópica de partículas que obedecem uma estatística bosônica em um mesmo estado quântico. As partículas que obedecem uma estatística desse tipo possuem *spin* total inteiro. A primeira previsão desse fenômeno foi feita por Einstein em 1925, ao analisar como Bose propunha a distribuição de fótons, partículas livres e não interagentes, em cavidades. Ele fez uma previsão teórica na qual discutia que abaixo de uma temperatura crítica era possível observar uma transição de fase no sistema.

O primeiro sistema em que se especulou a CBE foi a partir do resfriamento do ⁴He líquido, que apresentava duas fases diferentes, uma delas identificada com propriedades distintas de um fluido normal, por exemplo havia viscosidade nula e aparecimento de vórtices quantizados quando abaixo da uma temperatura crítica, da ordem $T_c \sim 2.17 \ K$ ([3]).

É importante destacar que quando o sistema se aproxima dessa temperatura o comprimento de onda térmico do sistema, $\lambda_t = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{\frac{1}{2}}$, aumenta e se torna da ordem das distâncias entre os átomos. Esse é o limite em que a indistinguibilidade quântica do sistema torna-se importante, pois começa a haver um "overlap" entre as funções de onda dos átomos, e se quisermos uma melhor precisão em seu tratamento devemos tratar segundo sua estatística quântica correspondente.

O estudo das propriedades desse novo estado da matéria só se tornou adequado

ao incluir a possibilidade de interação no sistema. Mas foi na década de noventa, principalmente após o desenvolvimento de técnicas experimentais de resfriamento e armadilhamento de átomos, que se pode de uma forma mais contundente aferir a CBE e o estudo de suas propriedades. Passaremos então a analisar esse sistema.

1.1 Resfriamento e Armadilhamento

Existem algumas técnicas para se resfriar o condensado e não pretendemos aqui esgotar o assunto analisando em detalhes todo o processo de refriamento. Esperamos aqui traçar apenas as linhas gerais desse processo e remetemos a [4] para uma revisão dessas técnicas.

Na primeira etapa os átomos são aquecidos a uma temperatura da ordem de 600K, e são bombardeados por laser para serem freados. Nesse processo, a temperatura cai para aproximadamente $1\mu K$, a uma densidade de aproximadamente 10^{12} átomos por cm^3 . Após essa etapa, ao mesmo tempo em que se desliga o feixe de laser liga-se a armadilha magnética e os átomos ficam aprisionados em armadilhas magnéticas harmônicas e, em geral, não homogêneas, de forma que os átomos sintam a presença de um mínimo desse potencial, para onde eles irão quando formarem um CBE.

Para resfriá-lo ainda mais, deixam-se, através de uma técnica denominada Resfriamento Evaporativo [5]os átomos mais energéticos escaparem da armadilha, abaixando assim ainda mais a temperatura, permitindo que os mesmos ocupem o mínimo do potencial. As temperaturas atingidas após esse processo são da ordem de 1nK, ordem de grandeza da temperatura do condensado.

Para verificar se o gás está na fase condensada, é necessário analisar a densidade do gás, no espaço de posição ou de momento, e ela deve apresentar um estreitamento, uma maior quantidade de estados no ponto de mais baixo momento, e deve apresentar a menor largura da nuvem se estivermos no espaço de configuração. Diversos pesquisadores da área chamam de dramática essa observação. Relmente ela é empolgante e bonita uma vez que se trata de estarmos observando pela primeira vez a função de onda de um sistema quântico. Assim, a Condensação de Bose-Einstein torna a função de onda um objeto de uma realidade no sentido mais tradicional.

1.2 Armadilha

O sistema que descreveremos é composto por um gás de Bose diluído em uma armadilha harmônica com potencial anisotrópico dado por

$$V_{ext} = \frac{m}{2} \left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2 \right).$$
(1.1)

No caso acima, não há nenhuma espécie de isotropia do sistema, mas as frequências do potencial podem ser escolhidas de uma forma tal que possamos ter um sistema com simetria esférica, que é o caso em que as frequências são as mesmas em todas as direções ($\omega_x = \omega_y = \omega_z$), ou uma simetria axial, como por exemplo $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$. Nesse caso, é conveniente definirmos um parâmetro λ , que é a razão entre as frequências do potencial $\lambda = \frac{\omega_z}{\omega_\perp}$, com $\omega_\perp = \omega_x = \omega_y$, que fixará a simetria do problema

$$\lambda = 1 \Rightarrow \text{ potencial esfericamente simétrico}$$
 (1.2)

 $\lambda > 1 \Rightarrow$ simetria de "panqueca" (1.3)

$$\lambda < 1 \Rightarrow$$
 simetria de "charuto". (1.4)

A presença desse potencial harmônico torna o estudo de CBE ainda mais interessante, pois ele quebra a invariância translacional do sistema, permitindo que a CBE não se pronuncie apenas do espaço de momento mas também no espaço de posição. Sendo assim, um condensado apresenta o menor valor de momento e também o menor tamanho que o sistema pode apresentar no espaço de configuração. Isso é um primeiro resultado devido a presença da armadilha.

O sistema que analisaremos, consiste em átomos alcalinos que se comportam como bósons confinados em um potencial harmônico tipo (1.1). Como primeira aproximação, considera-se que o sistema não interage. Isso pode nos fornecer escalas importantes e também nortear o tratamento do condensado quando se inclui a interação como possibilidade.

Nesse caso a função de onda do sistema condensado é obtida solucionando um problema de oscilador harmônico simples para cada partícula do sistema. Com isso, a função de onda do estado fundamental para N-bósons nessa condição é uma função de onda do tipo produto de funções de cada átomo do gás, devidamente simetrizada

$$\Phi(r_1....r_n) = \prod_i \varphi_0(r_i) \tag{1.5}$$

e \prod é um operador produto, com φ_0 dado por

$$\varphi_0(r) = \left(\frac{m\omega_{ho}}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\left(\omega_x x^2 + \omega_x y^2 + \omega_z z^2\right)\right]$$
(1.6)

e ω_{ho} é definida por

$$\omega_{ho} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{\frac{1}{3}} \,. \tag{1.7}$$

A função de onda φ_0 é uma gaussiana, que é a função de onda de um átomo que esteja no estado fundamental de um oscilador. A partir dela podemos determinar um primeiro fator de escala do sistema, que é o comprimento característico do oscilador a_{ho} , dado por

$$a_{ho} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(1.8)

As armadilhas usadas experimentalmente possuem a_{ho} tipicamente iguais a $1\mu m$. Esse parâmetro também pode ser interpretado como a largura da nuvem condensada para o caso em que os átomos não interajam.

Como afirmado anteriormente, a questão da indistiguibilidade quântica só faz sentido a baixas temperaturas, quando o comprimento de onda de Broglie associado a cada átomo for da ordem da distância entre os átomos no gás. A temperaturas bem acima desse limite, o gás comporta-se como partículas clássicas e a distribuição estatística de Boltzmann descreve bem esse sistema. Esse limite é definido por $k_BT \gg \hbar \omega_{ho}$. Nesse caso $n_{cl} \propto \exp\left[-V_{ext}/k_BT\right]$. Isso nos dá uma distribuição gaussiana com largura, para o potencial harmônico, de

$$R_T = a_{ho} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{ho}} \right), \tag{1.9}$$

que pode ser definida como a largura da nuvem térmica. Nesse limite,

$$R_T \gg a_{ho}.\tag{1.10}$$

Esse resultado é importante para entendermos porque afirmamos que a assinatura de uma condensação de Bose-Einstein representa um estreitamento na densidade de uma forma mais quantitativa. Como a grandeza a_{ho} está associada ao tamanho da núvem do condensado, podemos ver que por (1.10) a núvem térmica apresenta uma largura muito maior que a largura do condensado. A figura-1 mostra uma fotografia do sistema a três diferentes temperaturas. Quando o sistema está a alta temperatura; a temperatura próxima a T_c , em que já podemos notar um comportamento de dois fluidos, pois há uma parte que se encontra distribuída termicamente (em tom alaranjado) e a parte condensada (em tom azulado); e o sistema condensado, desaparecendo a componente térmica do sistema.

A armadilha nesse sistema tem um papel de destaque no tratamento e as propriedades do condensado são dadas em função de seus parâmetros. Pode-se, por exemplo, extrair a tempratura crítica de gases não interagentes partindo do ensemble canônico [6] e tem-se como resultado

$$k_B T_c = \hbar \omega_{ho} \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{\frac{1}{3}} = 0,94\hbar \omega_{ho} N^{\frac{1}{3}}.$$
(1.11)

Notamos através da expressão (1.11) que a temperatura crítica é obtida em função dos parâmetros da armadilha. Outra grandeza importante é o número de partículas na fase condensada, dado por

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3. \tag{1.12}$$

que também depende dos parâmetros da armadilha através de T_c .

A equação 1.12 nos fornece a dependência com a temperatura da fração condensada para uma temperatura $T < T_c$, ou seja, para uma dada temperatura finita teremos parte do gás condensado e ainda uma fase termicamente distribuída. Essa fração térmica é pequena comparada com a fração condensada quando estamos a temperatura da ordem das temperaturas obtidas experimentalmente (nK). É fácil ver que a temperatura zero todas as partículas estarão na fase condensada.

1.3 Interação

Antes de passarmos a análise teórica da interação é interessante percebermos experimentalmente o seu efeito. Ele pode ser notado a partir da expansão balística do condensado. Após desligar a armadilha e deixar o gás expandir-se, a energia cinética ganha pelo gás deveria ser da ordem da energia de ponto zero do oscilador se não houvesse a interação entre os átomos. Entretanto, observa-se que a anergia cinética é maior devido a presença da interação, como mostrado na referência [6].

A presença da interação torna a análise teórica do problema mais difícil, porém mais interessante, pois a sua presença abre novas possibilidades de comportamento. Antes de entrarmos na análise do seu efeito precisamos determinar a sua forma no sistema. O modo usual de fazê-la é através de teorias de espalhamento e uma dedução encontra-se no apêndice-3 dessa dissertação.

As condições usadas para o cálculo do potencial de interação, foram feitas pela primeira vez por Bogoliubov[7], e posteriormente aprimorada por Huang [8], usando a hipótese de que o gás fosse suficientemente diluído, onde somente colisões de dois corpos, com baixa tranferência de momento, são relevantes. Nesse caso, o sistema precisará apenas do comprimento de espalhamento de onda-*s* para caracterizar a interação.

Com certeza, devido a aproximação feita pelo cálculo do potencial, onde se assume existir apenas espalhamento de ondas-*s*, não reflete o potencial real sentido pelos átomos. Mas esse resultado contém as informações relevantes para a análise do problema, já que os átomos não têm energia suficiente para sentir os detalhes do potencial de interação.

Esse potencial que substitui o potencial real é denominado de *pseudo-potencial* e descreve um comportamento assintótico das funções de onda de maneira adequada,

em consonância com a aproximação de Born, importante para as teorias de campo médio, calculado usando expansão em ondas parciais.

O comprimento de espalhamento de ondas-s na aproximação Born é dado pela equação [9]

$$a_s = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} V_{int}\left(\mathbf{r}\right). \tag{1.13}$$

Se assumirmos que haverá apenas colisões frontais com intensidade dada por uma constante de acoplamento g, podemos substituir o potencial de interação por um *pseudo-potencial*, dado por $V_{int} = g\delta(\mathbf{r})$. Com isso chega-se a uma expressão para a intensidade da colisão g em função do comprimento de espalhamento

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a.$$
 (1.14)

Esse resultado fornece uma boa aproximação para a interação entre os átomos no condensado.

1.4 Efeito da Interação no Estado Fundamental

A descrição microscópica do sistema deve ser tratada na presença da interação se quisermos descrever adequadamente o condensado e suas propriedades, substituindo a interação de dois corpos pela expressão do *pseudo-potencial*. A Hamiltoniana geral para um sistema de muitos corpos como o que estamos tratando é conveniente escrevê-la em segunda quantização

$$H = \sum_{i,j=1}^{N} \langle i \mid T + V_{ext} \mid j \rangle a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l=1}^{N} \langle ij \mid V_{int} \mid kl \rangle a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_l a_k$$
(1.15)

O termo T é a energia cinética do átomo, V_{ext} é o potencial em que eles estão

confinados, o mesmo dado pela equação (1.1), V_{int} é o potencial de interação entre os átomos.

Os operadores $a \in a^{\dagger}$ são definidos tal que a sua atuação em um estado com um número de partícula seja modificada da seguinte forma

$$a_{\alpha}^{\dagger} \mid n_0, n_1, ..., n_{\alpha}, ... \rangle = \sqrt{n_{\alpha} + 1} \mid n_0, n_1, ..., n_{\alpha} + 1, ... \rangle$$
 (1.16)

$$a_{\alpha} \mid n_0, n_1, ..., n_{\alpha}, ... \rangle = \sqrt{n_{\alpha}} \mid n_0, n_1, ..., n_{\alpha} - 1, ... \rangle,$$
 (1.17)

e devem respeitar as relações de comutação para bósons

$$\begin{bmatrix} a_i^{\dagger}, a_j \end{bmatrix} = \delta_{i,j}$$
$$\begin{bmatrix} a_i^{\dagger}, a_j^{\dagger} \end{bmatrix} = [a_i, a_j] = 0.$$
(1.18)

A equação que descreve o estado fundamental do condensado é obtida substituindo o potencial de interação da hamiltoniana (1.15) pelo *pseudo-potencial* e ela foi obtida por [11] e [12] e é conhecida como equação para o parâmetro de ordem do condensado. Sua derivação é feita no capítulo-2 dessa dissertação através de um procedimento variacional e ela é

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}\left(r\right) + g \mid \Phi \mid^2\right) \Phi\left(\mathbf{r}\right) = E\Phi\left(\mathbf{r}\right).$$
(1.19)

Essa é uma equação de Schrödinger não linear devido a presença da interação ser dependente da densidade. Uma derivação microscópica encontra-se no apêndice-1 dessa dissertação.

O seu desenvolvimento tal como formulado por Gross e Pitaevskii é baseada no trabalho [7]. Ele propõe que a temperaturas bem baixas o número de partículas na fase condensada deve ser $N_0 \gg 1$, de forma que se analisarmos as propriedades do condensado com $N_0 \pm 1$ partículas, elas devem ser as mesmas. Tal raciocínio permite tratar cada operador no espaço de Fock como números, $a_i^{\dagger} = a_j = \sqrt{N_0}$, pois nessa aproximação o comutador desses operadores é nulo.

Se decompomos o operador de campo, definido por $\stackrel{\wedge}{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum \Psi_i(\mathbf{r}) a_i$, sob a forma

$$\stackrel{\wedge}{\Psi}(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) + \stackrel{\wedge}{\psi}(\mathbf{r}). \qquad (1.20)$$

podemos tomar o valor médio desse operador no estado fundamental para obtermos a equação de campo médio definindo $\Phi(\mathbf{r}) \equiv \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \rangle$. Essa função é conhecida como função macroscópica do condensado ou parâmetro de ordem. $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ é uma pequena contribuição das partículas que se encontram fora do condensado. Esse termo é importante quando se descreve as excitações.

O papel da interação no estado fundamental é analisado quantitativamente no capítulo-2 quando comparamos o comprimento do oscilador, que é relativo a um sistema não interativo, com o comprimento característico obtido variacionalmente $a_{hf} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{hf}}\right)^{\frac{1}{2}}$. Observa-se com a interação repulsiva, que é o caso que estamos interessados para o modo tesoura, há uma expansão da densidade em relação ao caso não interativo. O oposto ocorre para atração atrativa, basta checarmos em [6].

Podemos definir um novo parâmetro adimensional que é a razão $R \equiv a_{hf}/a_{ho}$, capaz de avaliar quanto a interação pode mudar a forma de uma gaussiana. Assumindo que essa interação seja repulsiva, observa-se que a núvem do condensado expande-se. Se R for a medida de quanto ela se torna mais larga que uma gaussiana de um sistema não interativo, que tem a sua largura definida por $a_{ho} = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$, o parâmetro deverá ser R > 1 para o caso repulsivo e do contrário, R < 1 se tivermos interação atrativa.

A contribuição de cada energia medida nesse escala, em unidades de energia do

oscilador, é dada por

$$\frac{\langle T \rangle_0}{N_0} \sim \frac{\hbar\omega_0}{R^2}$$

$$\frac{\langle V_{ext} \rangle_0}{N_0} \sim \hbar\omega_0 R^2$$

$$\frac{\langle V \rangle_0}{N_0} \sim \frac{\hbar\omega_0}{R^3} \frac{Na}{a_{ho}},$$
(1.21)

onde surge um novo parâmetro adimensional, $\frac{Na}{a_{ho}}$, que reflete novamente a presença da armadilha e que irá nos permitir explorar alguns regimes diferentes no condensado. Ele expressará a importância da interação entre os átomos do gás. Por exemplo, a razão entre a energia de interação e a energia cinética é proporcional a esse parâmetro, $\frac{E_{int}}{E_{cin}} \sim \frac{N|a|}{a_{ho}}$. Quando estivermos no caso em que $\frac{N|a|}{a_{ho}} \ll 1$, a interação é desprezível frente à contribuição da energia cinética e estamos no limite do gás ideal. Ao contrário, se $\frac{N|a|}{a_{ho}} \gg 1$, não podemos desprezar o efeito da interação, mas podemos desprezar a energia cinética dos átomos. Tipicamente, a segunda hipótese é o que acontece para Condensados de Bose-Einstein armadilhados para o caso repuslivo, em que o comprimento de espalhamento é a > 0. Essa aproximação é também conhecida como aproximação de Thomas-Fermi. Os valores para o comprimento de espalhamento têm ordem de nm, por exemplo, $a = 2.75 \ nm$ para ²³Na. Os experimentos realizados nas armadilhas do MIT e JILA, têm N da ordem de $10^6 - 10^7$. A razão $\frac{|a|}{a_{ho}}$ é da ordem de 10^{-3} , de forma que $\frac{N|a|}{a_{ho}} \gg 1$.

O limite de Thomas-Fermi, também conhecido como limite hidrodinâmico, é particularmente interessante, pois ao desprezarmos o termo cinético, proporcional a \hbar^2 e também denominado de pressão quântica, temos uma solução analítica para a função de onda obtida diretamente da equação (1.19), que deixa de ser uma equação diferencial e passa a ser uma equação algébrica para a densidade $n(\mathbf{r}) = |\phi|^2$. Esse

limite também é importante para calcular as energias de excitação através da teoria de hidrodinâmica de superfluidos de onde podemos extrair expressões analíticas para a relação de dispersão[13] (vide apêndice).

1.5 Excitação Coletiva

Quando se trata um sistema de muitos corpos um ponto relevante a ser abordado é o estudo das exitações elementares. No caso dos condensados de Bose-Einstein, há ainda uma razão a mais, devido ao fato delas estarem ligadas ao fenômeno de superfluidez. Nesta seção abordaremos as excitações coletivas e como a interação de dois corpos modifica suas propriedades, como fizemos na seção anterior para o estado fundamental.

A dinâmica do condensado é dada pela equação de Gross Pitaevskii dependente do tempo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi\left(\mathbf{r},t\right) = \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2} + V_{ext}\left(\mathbf{r}\right) + g \mid \Phi \mid^{2}\right)\Phi\left(\mathbf{r},t\right),\tag{1.22}$$

pois é uma equação que fornece a evolução temporal do sistema. Para obtê-la é usado um princípio variacional dependente do tempo em alguns trabalhos [14] e no capítulo-3 dessa dissertação utilizamos o mesmo princípio para derivar as equações de movimento equivalentes a (1.22). As excitações coletivas do sistema podem ser obtidas linearizando a equação (1.22) em torno do estado de equilíbrio [6]

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \exp\left(\frac{-i\mu t}{\hbar}\right) \left[\phi(\mathbf{r}) + u(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} + v^*(\mathbf{r}) e^{i\omega t}\right].$$
 (1.23)

obtendo as equações de Bogoliubov-de Gennes[6], cujas soluções, que são obtidas numericamente, fornecem as energias de excitação do sistema.

A idéia por traz desse tratamento, é a inclusão do operador $\hat{\psi}$ que foi desprezado

para o cálculo do estado fundamental em (1.20), de forma que ele introduza uma dependência temporal na densidade

$$\rho\left(\mathbf{r}\right) = \left|\phi\left(\mathbf{r}\right)\right|^{2} + \left\langle \psi \psi \psi \right\rangle$$
(1.24)

de uma forma perturbativa. Nós usaremos no capítulo-3 essa idéia para tratarmos a resposta linear do condensado na presença de um campo externo.

Essa formulação conduz a descrição microscópica de *quasi-partícula* quando se escreve a forma que deve ter esse operador para que ele diagonalize a hamiltoniana de muitos corpos. No caso do condensado ele deve ser uma combinação linear da parte condensada com a parte não condensada e também devem ser operadores que obedecem a relação de comutação para bósons.

As energias que se obtém para os modos coletivos revelam mais uma vez a diferença entre os resultados para o caso não interativo. No caso em que g = 0, o espectro de excitação deve coincidir com o espectro do oscilador harmônico, ou seja, a hamiltoniana já e diagonal e as auto-energias são múltiplos inteiros da frequência da armadilha, como podemos ver em [6]. Já os resultados obtidos para o caso interativo mostram que as frequências para os modos estudados não são múltiplos inteiros da frequências da frequência da armadilha.

Outros tratamentos também são dados para se estudar as excitações no sistema. Pode-se usar o princípio variacional dependente do tempo, como fazem Pires e Passos [14], parametrizando a função de onda do condensado supondo a ela uma forma Gaussiana parametrizada adequadamente.

Existe também o tratatamento hidrodinâmico de superfluido. Ele consiste em considerar o sistema funcionando como um gás ideal que se movimenta com uma inércia modificada pela interação, ou seja, um gás de *quasi-partícula* que ande livre-

mente sem interagir. Esse limite é particularmente interessante na aproximação de Thomas-Fermi, pois é possível extrair analiticamente uma relação de dispersão, como mostra Stringari[13]. Esse tratamento foi formulado por Landau para o estudo do comportamento de dois fluidos do ⁴He, e apesar de ser uma descrição que se baseia na fenomenologia do condensado ela encontra todo seu embasamento microscópico na descrição de Bogoliubov, apesar de ter sido formulada anteriormente e não precisar de nenhuma referência à condensação de Bose-Einstein.

1.6 Modo Tesoura

O modo tesoura está associado ao fenômeno de rotação no sistema e a uma geometria de deformação quadrupolar [1]. O caso que analisaremos no capítulo-4 dessa dissertação, segundo um tratamento microscópico, foi realizado experimentalmente em uma armadilha harmônica axialmente simétrica, $\omega_x \approx \omega_y \equiv \omega_{\perp} < \omega_z$,

$$V_{ext}(r) = \frac{m}{2} \left(\omega_{\perp}^2 r^2 + \omega_z^2 z^2 \right)$$
(1.25)

com uma deformação medida através do parâmetro λ , que é a razão entre as frequências da armadilha. O valor da deformação da armadilha usada na mesma experiência é $\lambda = \sqrt{8}$.

Para excitar o modo tesoura em um gás confinado em um potencial como o acima descrito, é necessário que ele esteja inicialmente na configuração de equilíbrio. Com o objetivo de se evitar excitações de superfície gira-se a armadilha adiabaticamente de um ângulo θ em relação a configuração inicial e com isso teremos agora o sistema em equilíbrio nessa nova posição em relação a primeira configuração. Feito isso, o modo tesoura é obtido após girar-se subtamente a armadilha para um ângulo $-\theta$ e assim

o sistema como um todo realizará uma oscilação em torno da posição de equilíbrio, de amplitude 2θ tal como mostra a figura-3. Devido a forma dessa excitação ser de tipo quadrupolar ela é identificada com a geometria do modo tesoura, em analogia à física nuclear. Vale ressaltar que a rotação sofrida pelo sistema não corresponde a uma rotação rígida do fluido e como interpreta [14], ela corresponde a deformações irrotacionais na superfície do condensado.

Feito isso, duas possibilidades são analisadas. Uma, o gás encontra-se a temperatura acima da temperatura crítica e com isso teremos o movimento de uma componente irrotacional e uma de fluido normal, resultando no aparecimento de duas frequências, cada uma correspondendo a um fluido. A outra é abaixo da temperatura crítica em que todo sistema encontra-se condensado e consequentemente todos ocupando o mesmo estado. Isso refletirá em apenas uma possibilidade para o modo de excitação.

Com isso, Guèry-Odelin e Stringari, partindo do formalismo hidrodinâmico, propuseram que a análise do modo tesoura poderia revelar a transição do sistema para uma fase puramente superfluida, como contrapartida da gás térmico, pois o superfluido apresenta apenas um comportamento de fluido irrotacional. Os resultados medidos experimentalmente em [2] estão em excelente acordo com o resultado previsto teoricamente pela hidrodinâmica de superfluidos.

A análise teórica desse modo em condensados bosônicos não está restrita a esse trabalho. Encontramos, por exemplo, Pires e Passos [14] que analisam os modos coletivos utilizando o Princípio Variacional Dependente do Tempo e encontram um caso particular onde o modo quadrupolar não diagonal é identificado com a geometria do modo tesoura.

Esse modo também já foi amplamente estudado em sistemas fermiônicos e o primeiro exemplo que temos é em física nuclear. Em geral na medida em que se excita o modo tesoura através de um operador quadrupolar surgem dois modos acoplados. Lo Iudice e Palumbo[36] previram a existência de um modo elástico, associado a correntes no sistema, considerando que em núcleos deformados prótons e nêutrons podem se comportar como rotores rígidos, girando em torno de um eixo comum com velocidades angulares opostas. Isso foi feito quando se estudava o momento de inércia em núcleos deformados, pois o movimento de fluido irrotacional apresentava momento de inércia reduzido, o que não estava de acordo com os resultados experimentais. Como mostram Lipparini e Stringari em [16], a existência da rotação rígida e o movimento de fluido irrotacional acoplado a esse modo, é o que verdadeiramente acontece nos núcleos e resolve o problema de discordância entre o momento de inércia previsto teoricamente e o medido experimentalmente. Isso pode ser interpretado e analisado em sistemas fermiônicos por teorias hidrodinâmicas, [16] e as referências lá contidas, ou tratado microscopicamente, como vemos em [17][36][18][19][20][21].

O que podemos perceber é que a existência desses dois modos acoplados não se repete quando analisamos o condensado, como aponta[1] e descrevemos resumidamente no início dessa seção. Assim, pois, pretendemos fazer nessa dissertação um tratamento microscópico no condensado na expectativa de poder explorar a natureza microscópica do desaparecimento do modo elástico.

Em outras palavras, precisando mais nosso objetivo, estaremos interessados em desenvolver um método de tratamento microscópico a temperatura zero e calcularmos a frequência do modo tesoura, e compararmos com o resultado $\omega = \sqrt{2}\omega_0$ no limite de Thomas-Fermi[1][2]. Para isso desenvolveremos um modelo esquemático que trata microscopicamente as excitações coletivas do condensado de Bose-Einstein, baseada na resposta linear do sistema a um campo externo, usando o VPM (Vibration Potencial Model), um modelo usado em física nuclear e aglomerados metálicos para o mesmo propósito de nosso trabalho. Apesar de apenas aplicá-lo para o cálculo do modo tesoura, nosso objetivo para trabalhos futuros é explorar a característica microscópica desse modelo, possibilitando o entendimento do desaparecimento do modo elástico quando o sistema se encontra condensado.

Capítulo 2

Descrição do Estado Fundamental

O principal propósito de nosso trabalho é um cálculo microscópico do modo tesoura que faremos através do VPM. Para isso, faz-se necessário uma boa descrição do estado fundamental, importante na construção da hamiltoniana de campo médio e também no cálculo da energia do modo tesoura pelo método do VPM.

A descrição mais adequada para o estado fundamental é feita pelo método de Hartree-Fock, que consiste em trasformar um problema com correlação de dois corpos para um problema de partícula independente, ou seja, considera o potencial de interação somente em média transformando-o em um operador de um corpo. A solução fornece a melhor base de partícula independente para o sistema, objetivo maior das teorias de campo médio.

Essa aproximação é assegurada ser a mais adequada para o estado fundamental pois sua solução é a que fornece o menor auto-valor de energia, ou seja, ela é um mínimo de energia em um cálculo variacional. No apêndice-A encontra-se uma outra forma derivação das equações de campo médio, baseada em um tratamento microscópico equivalente ao que desenvolveremos nesse capítulo, chegando à equação de Gross-Pitaevskii para o condensado. A aproximação de Hartree-Fock fornece-nos como solução os estados estacionários e sua generalização, Hartree-Fock dependente do tempo, pode dar-nos a evolução temporal, e será ela que permitirá o cálculo das excitações em um sistema, mas se deve partir do Princípio Variacional Dependente do Tempo (PVDT) se quisermos analisar a evolução temporal como mostra [14]

2.1 Determinação da Equação de Campo Médio a Partir de um Princípio de Mínimo

Para se obter as equações de movimento partiremos da hipótese de que a hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \sum_{i=1}^{N} t_i + V_{ext_i} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1\\i\neq j}}^{N} V_{int_{i,j}}$$
(2.1)

onde t_i é a energia cinética do átomo, V_{ext_i} é um potencial externo qualquer sentido por cada átomo do sistema, assim sendo um operador de um corpo, e $V_{int_{i,j}}$ é a interação entre os átomos que compõem o condensado, com o fator $\frac{1}{2}$ para evitar a contagem dupla da interação, sendo um operador de dois corpos. Nessa hamiltoniana (2.1) foi feita uma aproximação que a interação entre os átomos deve ser do tipo colisão binária, devido as propriedades de sistema diluído ou fracamente interagente, e colisões de três ou mais corpos são pouco prováveis.

O problema de determinação do estado fundamental consiste em em minimizar o valor médio da hamiltoniana que define o funcional de energia $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$

$$\delta \langle \Psi \mid H \mid \Psi \rangle = 0 \tag{2.2}$$

restringindo o sub-espaço variacional por estados do tipo produto

$$|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^{N} |\phi_0(i)\rangle$$
(2.3)

que corresponde a uma situação onde todos os átomos encontram-se no mesmo estado $| \phi_0 \rangle$ do condensado. A partir dessa equação, nota-se que o estado $| \Psi \rangle$ é simétrico, adequado a descrição de um sistema de muitos bósons.

Em segunda quantização, o estado pode ser escrito como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(a_0^{\dagger}\right)^N |\rangle, \qquad (2.4)$$

onde a ação do operador a_0^{\dagger} no vácuo cria uma partícula no estado $|\phi_0\rangle$.

Substituido (2.4) e a hamiltoniana no funcional de energia, teremos

$$E[\phi_0] = N\langle \phi_0 \mid t + V_{ext} \mid \phi_0 \rangle + \frac{N(N-1)}{2} \langle \phi_0 \phi_0 \mid V_{int} \mid \phi_0 \phi_0 \rangle$$
(2.5)

com a condição que a variação do funcional seja estacionária com respeito a variação de $|\phi_0\rangle$. Com isso, $|\phi_0\rangle$ deve ser um auto-estado da hamiltoniana de um corpo

$$h(\rho_0) = t + V_{ext} + V_{int}(\rho_0).$$
(2.6)

com auto-valor dado pela equação

$$h(\rho_0) \mid \phi_0 \rangle = \epsilon_0 \mid \phi_0 \rangle \tag{2.7}$$

Ao substituir o potencial de interação pelo pseudo-potencial, $V_{int} = g\rho_0(r)$, e na condição que $N \cong N \pm 1$ partículas (aproximação de Bogoliubov), chega-se a

equação de Gross-Pitaevskii para o estado fundamental [6]

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}\left(\mathbf{r}\right) + gN\left|\phi\left(\mathbf{r}\right)\right|^2\right]\phi\left(\mathbf{r}\right) = \epsilon\phi\left(\mathbf{r}\right).$$
(2.8)

onde $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ é a constante de acoplamento em termos do comprimento de espalhamento.

2.2 Cálculo do Estado Fundamental

Como mostrado acima na descrição do sistema a partir de um tratamento variacional chega-se a equação de campo médio do condensado. Usaremos então esse tratamento para determinar o estado fundamental, e devemos para isso parametrizar uma função de onda tentativa partindo do *ansatz* gaussiano.

A função de onda gaussiana é a solução para o problema que estamos tratando para o caso que não haja a interação entre os átomos, isso significa solução para o problema em que a hamiltoniana (2.1) tenha o termo de interação de dois corpos nulo. Parametrizar essa função significa permitir uma deformação na função de onda devido a presença da interação, tornando mais larga para o caso repulsivo e mais estreita no caso atrativo. Os parâmetros são determinados de forma a minimizar a energia.

Considerando assim, a função de onda está descrita na equação abaixo

$$\phi = \left(\frac{N^{1/2}}{\omega_{2hf}^{1/2}\omega_{3hf}^{1/4}}\right) \left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left(\frac{-m\left(\omega_{2hf}r^2 + \omega_{3hf}z^2\right)}{2\hbar}\right)$$
(2.9)

de tal maneira que as frequências ω_{2hf} e ω_{3hf} sejam parâmetros a determinar variacionalmente tais que a energia seja um mínimo.

Ao substituirmos então V_{ext} pelo potencial de confinamento harmônico com sime-

tria axial que é o caso importante para o modo tesoura, o potencial de interação V_{int} pelo "pseudo-potencial", temos o funcional de energia (2.5) dado por

$$E[\phi] = \int d^{3}r \left[\underbrace{\frac{\hbar^{2}}{2m} |\nabla \phi(\mathbf{r})|^{2}}_{E_{cin}} + \underbrace{\frac{m}{2} \left(\omega_{2hf}^{2} r^{2} + \omega_{3hf}^{2} z^{2} \right) |\phi(\mathbf{r})|}_{V_{ext}} + \underbrace{\frac{2\pi\hbar^{2}a}{m} |\phi(\mathbf{r})|^{4}}_{V_{int}} \right].$$
(2.10)

Inserindo a função de onda tentativa (2.9), e resolvendo cada integral separadamente temos como resultado para o valor médio da energia

$$E_{cin} = N\left(\frac{1}{\omega_{2hf}} + \frac{2}{\omega_{3hf}}\right)\omega_{2hf}\omega_{3hf}$$
(2.11)

$$V_{ext} = \left(1/2\frac{N}{\omega_{2hf}} + 1/4\frac{N\lambda^2}{\omega_{3hf}}\right)$$
(2.12)

$$V_{int} = 1/16 \, \frac{\zeta^5 N \omega_{2hf} \sqrt{\omega_{3hf}} \sqrt{2}}{\pi^{3/2}}.$$
 (2.13)

onde $\zeta = 8\pi Na/a_{ho}$.

Para obtermos o estado fundamental, usaremos o limite de Thomas-Fermi desprezando o termo cinético do funcional, e a expressão que se obtém para o funcional em relação dos parâmetros variacionais é dada por

$$E[\phi]/N = \left(1/2\frac{1}{\omega_{2hf}} + 1/4\frac{\lambda^2}{\omega_{3hf}}\right) + 1/16\frac{\zeta^5\omega_{2hf}\sqrt{\omega_{3hf}}\sqrt{2}}{\pi^{3/2}}.$$
 (2.14)

Diferenciando essa expressão em relação a $\omega_{2hf} \in \omega_{3hf}$ e igualando a zero para termos o mínimo da energia extraimos os valores das frequências obtido variacionalmente, e são respectivamente

$$\omega_{2hf} = 2 \frac{\pi^{3/5} \sqrt{\frac{\lambda^{8/5} \sqrt{\frac{\lambda^{8/5}}{\zeta^2}}}{\zeta}}}{\lambda^{8/5} \zeta} = 2\pi^{3/5} \lambda^{-2/5} \zeta^{-2}$$
(2.15)

$$\omega_{3hf} = 2 \frac{\pi^{3/2} 2^{3/10}}{\zeta^2 \left(2^{3/4} \pi^{9/4} \lambda\right)^{2/5}}$$
(2.16)

Voltando à expressão (2.14) e substituindo as frequências calculadas acima podemos escrever a energia do estado fundamental em unidades de energia do oscilador harmônico $\hbar\omega_0$, de onde temos como resultado [32]

$$\frac{E}{\hbar\omega_0} = \frac{5\zeta^2}{8\pi^{3/5}}\lambda^{2/5}$$
(2.17)

em que λ é a razão entre as frequências da armadilha. Para uma deformação $\lambda = \sqrt{8}$, e $\zeta = 4.21$, caso da experiência em que se produziu o modo tesoura, temos a energia $\frac{E}{\hbar\omega_0} = 8.44$. Os parâmetros que minimizam o funcional de enegia em relação a variações em ϕ valem nessas unidades $\omega_{2hf} = 0.148$ e $\omega_{3hf} = 1.184$. Esses resultados foram calculados em [32] e nós os reproduzimos para construir a hamiltoniana de campo médio.

Esses são os resultados que precisamos para dar continuidade ao cálculo do modo tesoura, pois precisávamos para construir a hamiltoniana de campo médio a solução de Hartree-Fock, como lembramos o termo de interação é proporcional a densidade do estado fundamental ρ_0 .

Podemos agora passar ao próximo capítulo para o cálculo do modo tesoura, mas antes faremos apenas uma breve discussão acerca do papel da interação no estado fundamental, que pode agora ser feita de uma forma quantitativa a partir dos resultados que reproduzimos.

O comprimento característico $a_{ho} = 0.089$ pode ser interpretado como comprimento que a nuvem condensada tem desde que o sistema seja considerado não interativo. Podemos definir um outro comprimento característico ao levarmos em conta a interação repulsiva, $a_{hf} = (1/\omega_{hf})^{\frac{1}{2}}$, em unidades naturais, e tem como resultado para as condições que estamos analizando $a_{hf} = .23$, uma ordem de grandeza maior que a_{ho} . Esse parâmtero a_{hf} é o tamanho da núvem do condensado no estado fundamental agora levando em conta o efeito da interação repulsiva entre os átomos. O aumento na largura da núvem é justamente o efeito esperado para um sistema com esse tipo de interação pois a região central deve apresentar um número menor de partículas, como mostra a figura-1.

O efeito de interação atrativa é justamente o contrário mas não abordaremos aqui devido o seu tratamento ser feito da mesma forma, o que tornaria repetitivo. Remetemos à ref.[6] para ver uma discussão sobre este caso.
Capítulo 3

Resposta Linear: VPM (Vibration Potencial Model)

Nesse trabalho estamos interessados no estudo de excitações do tipo multipolar, mais especificamente no modo tesoura que, como discutimos na introdução dessa dissertação, tem a forma de uma excitação quadrupolar. Para o que segue é necessário que derivemos as equações dinâmicas para o nosso sistema e o faremos baseado em sua respota linear. Esse modelo foi usado por Liparrini e Stringari [18] e desenvolvido por Rowe [21]. Para tanto, vamos usar o princípio variacional dependente do tempo cuja ação é dada por

$$S = \int \left\langle \Phi \left| H - i \partial_t \right| \Phi \right\rangle dt \tag{3.1}$$

com

$$\delta S = 0, \tag{3.2}$$

onde estamos trabalhando em unidades tais que $\hbar = c = m = 1$.

Uma variação geral nos levaria à equação de Schrödinger dependente do tempo,

porém vamos tratar de forma aproximada supondo que o sistema está em um estado de partícula independente durante todo o tempo, o que nos leva à seguinte forma para a ação

$$S = N \int_{t_1}^{t_2} \left(i \langle \phi \mid \dot{\phi} \rangle - \langle \phi \mid t + V_{ext} \mid \phi \rangle + \frac{(N-1)}{2} \langle \phi \phi \mid V_{int} \mid \phi \phi \rangle \right) dt$$
(3.3)

e as equações dinâmicas são obtidas fazendo uma variação da ação com respeito a $\phi(t)$, o que nos leva a

$$i\frac{\partial}{\partial t} \mid \phi(t) \rangle = \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V(\mathbf{r}, t)\right) \mid \phi(t) \rangle \tag{3.4}$$

onde

$$V(\mathbf{r},t) = \frac{\partial V_{ext}}{\partial \rho} + g\rho(\mathbf{r},t). \qquad (3.5)$$

No que concerne a este trabalho estamos interessados em excitações de pequena amplitude geradas por campos externos do tipo multipolar. A presença de um campo multipolar externo vai induzir modificações na densidade tal que a parte estacionária possa ser separada

$$\rho\left(\mathbf{r},t\right) = \rho_0\left(\mathbf{r}\right) + \delta\rho. \tag{3.6}$$

onde ρ_0 é a densidade de Hartree-Fock para o estado fundamental.

Isso induzirá tranformações na hamiltoniana que poderá ser separada em uma parte estática e uma parte dinâmica

$$H_0 = \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_{ext}\left(\mathbf{r}\right) + g\rho_0\left(\mathbf{r}\right)\right)$$
(3.7)

$$\delta H(\mathbf{r},t) = \frac{\partial V}{\partial \rho} |_{\rho=\rho_0} \delta \rho = \frac{\partial^2 V_{ext}}{\partial \rho^2} \delta \rho + g \delta \rho$$
(3.8)

tal que a equação (3.4) possa então ser escrita como

$$i\frac{\partial}{\partial t} \mid \phi(t) \rangle = (H_0 + \delta H(\mathbf{r}, t)) \mid \phi(t) \rangle$$
(3.9)

que é equivalente a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo, pois ela fornece a evolução temporal do condensado.

Como o campo externo é do tipo multimpolar, o operador que reprensenta uma deformação desse tipo no sistema é dado por

$$f(\mathbf{r}) = r^l Y_{l,m}(\theta,\varphi).$$
(3.10)

Os geradores das transformações associados a estes operadores são dados por

$$-i[H_0, f] = \mathfrak{M} = i\nabla f_{\bullet} \nabla \tag{3.11}$$

de tal forma que uma excitação multipolar que geraria a variação na densidade seria dado por

$$U = e^{i\alpha(t)\mathfrak{M}} \tag{3.12}$$

isto é

$$\rho\left(\mathbf{r},t\right) = U^{\dagger}\rho_{0}\left(\mathbf{r}\right)U \tag{3.13}$$

expandindo até primeira ordem

$$\rho(\mathbf{r},t) = (1 + i\alpha(t)\mathfrak{M})\rho_0(\mathbf{r})(1 - i\alpha(t)\mathfrak{M})$$
(3.14)

Guardando apenas termos lineares,

$$\rho(\mathbf{r},t) = \rho_0(\mathbf{r}) - i\alpha(t) \left[i\nabla f_{\bullet}\nabla, \rho_0(\mathbf{r})\right]$$
(3.15)

chegamos ao resultado

$$\delta\rho\left(\mathbf{r},t\right) = \alpha\left(t\right)\nabla f_{\bullet}\nabla\rho_{0}\left(\mathbf{r}\right) \tag{3.16}$$

já que $\nabla^2 f = 0.$

Se voltarmos à expressão (3.8) que definine o termo da hamiltoniana dependente do tempo e substituirmos (3.16) nessa expressão chega-se a

$$\delta H(\mathbf{r},t) = \alpha(t) \nabla V_{ext} \bullet \nabla f(\mathbf{r}) + g\alpha(t) \nabla \rho_0 \bullet \nabla f(\mathbf{r})$$
(3.17)

Definindo o operador

$$Q(\mathbf{r}_{i}) = \nabla V_{ext} \bullet \nabla f(\mathbf{r}) + g \nabla \rho_{0} \bullet \nabla f(\mathbf{r})$$
(3.18)

o termo temporalmente dependente da hamiltoniana poderá ser escrito como

$$\delta H\left(\mathbf{r},t\right) = \alpha\left(t\right)Q\left(\mathbf{r}\right).\tag{3.19}$$

onde a grandeza $\alpha(t)$ funciona como uma coordenada coletiva que caracteriza a cada instante a deformação sofrida pelo sistema, que é dada pelo operador de um corpo $Q(\mathbf{r})$.

Para se fazer uma estimativa do seu valor, partiremos do cálculo do elemento de matriz do operador Q em um instante t qualquer

$$\langle \phi(t) | \hat{Q} | \phi(t) \rangle = Q(t) = \int Q(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$
 (3.20)

e usando (3.16) e (3.15)

$$Q(t) = \int Q(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$
(3.21)

$$Q(t) = \alpha(t) \int Q(\mathbf{r}) \nabla (\rho_0 \nabla f(\mathbf{r})) d\mathbf{r}. \qquad (3.22)$$

Mas, de acordo com o teorema da divergência de Gauss,

$$\int^{\infty} \nabla \bullet \left(Q\left(\mathbf{r}\right) \rho_0 \nabla f\left(\mathbf{r}\right) \right) d\mathbf{r} = 0$$
(3.23)

е

$$\nabla \bullet (Q(\mathbf{r}) \rho_0 \nabla f(\mathbf{r})) = \nabla Q(\mathbf{r}) \bullet \rho_0 \nabla f(\mathbf{r}) + Q(\mathbf{r}) \nabla \bullet (\rho_0 \nabla f(\mathbf{r}))$$
(3.24)

então

$$Q(t) = -\alpha(t) \int \nabla Q(\mathbf{r}) \bullet \nabla f(\mathbf{r}) \rho_0 d\mathbf{r}.$$
(3.25)

Com isso obtemos uma expressão do parâmetro $\alpha(t)$

$$\alpha\left(t\right) = -\chi Q\left(t\right) \tag{3.26}$$

onde χ é uma constante de acoplamento da da por

$$\chi^{-1} = \int \nabla Q(\mathbf{r}) \bullet \nabla f(\mathbf{r}) \rho_0 d\mathbf{r}.$$
(3.27)

Com isso chegamos a uma expressão para o termo dependente do tempo da hamiltoniana

$$\delta H = -\chi Q\left(t\right) \stackrel{\wedge}{Q} \tag{3.28}$$

onde $\hat{Q} = \sum_{i} Q(\mathbf{r}_{i})$ e a nossa hamiltoniana de partícula independente está construída em função dos operadores que descrevem o comportamento coletivo do sistema

$$H(Q) = H_0 - \chi Q(t) Q(\mathbf{r}). \qquad (3.29)$$

Para estudarmos vibrações de pequena amplitude, ou a resposta linear do sistema, devemos assumir que o operador Q(t) oscile harmonicamente e seja do tipo perturbativo, ou seja, ϵ é um parâmetro infinitesimal,

$$Q(t) = \epsilon \cos \omega t. \tag{3.30}$$

Podemos então tratar o problema de forma perturbativa onde vamos supor que a resposta do sistema seja linear na perturbação. Para tanto vamos supor que a função de onda de partícula única seja escrita como

$$\phi(\mathbf{r},t) = \sum_{j=0} c_j(t) \phi_j(\mathbf{r}) e^{-i\varepsilon_j t}$$
(3.31)

tal que os estados de base ϕ_j sejam auto-estados da hamiltoniana H_0

$$H_0\phi_j = \varepsilon_j\phi_j. \tag{3.32}$$

Introduzindo (3.31) na equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo

$$i\frac{\partial}{\partial t}\phi\left(\mathbf{r},t\right) = \left(H_0 + \delta H\right)\phi\left(\mathbf{r},t\right) \tag{3.33}$$

teremos

$$\sum_{j=0} i \frac{\partial}{\partial t} c_j(t) \phi_j(\mathbf{r}) e^{-i\varepsilon_j t} = \sum_{j=0} \chi Q(t) Q(\mathbf{r}) c_j(t) \phi_j(\mathbf{r}) e^{-i\varepsilon_j t}$$
(3.34)

multiplicando por $\phi_l(\mathbf{r})$ e usando a condição de ortogonalidade da base, temos

$$i\frac{\partial}{\partial t}c_{l}\left(t\right) = \sum_{j=0}\chi Q\left(t\right)c_{j}\left(t\right)\left\langle\phi_{l} \mid Q\left(\mathbf{r}\right) \mid\phi_{j}\right\rangle e^{-i(\varepsilon_{l}-\varepsilon_{j})t}$$
(3.35)

Como no instante inicial o sistema está no estado fundamental temos que

$$t = 0 \to c_0(0) = 1, c_j(0) = 0 \tag{3.36}$$

teremos separando o termoj=0,que corresponde ao estado fundamental, do somatório

$$i\frac{\partial}{\partial t}c_{l}(t) = \chi Q(t)c_{0}(t)\langle\phi_{l} | Q(\mathbf{r}) | \phi_{0}\rangle e^{-i(\varepsilon_{l}-\varepsilon_{0})t} + (3.37)$$
$$+\sum_{j>0}\chi Q(t)c_{j}(t)\langle\phi_{l} | Q(\mathbf{r}) | \phi_{j}\rangle e^{-i(\varepsilon_{l}-\varepsilon_{j})t}$$

Como estamos tratando apenas termos lineares em $c_j(t)$ e Q(t) e intervalos de tempo positivos mas pequenos o suficiente, podemos substituir as condições iniciais na equação (3.37), o que nos dá

$$i\frac{\partial}{\partial t}c_{l}\left(t\right) = \chi Q\left(t\right)\left\langle\phi_{l} \mid Q\left(\mathbf{r}\right) \mid\phi_{0}\right\rangle e^{-i(\varepsilon_{l}-\varepsilon_{0})t}$$
(3.38)

ou

$$c_{l}(t) = -i \int_{0}^{t'} dt \chi Q(t) \langle \phi_{l} | Q(\mathbf{r}) | \phi_{0} \rangle e^{-i(\varepsilon_{l0})t}$$
(3.39)

onde $\varepsilon_{l0} = \varepsilon_l - \varepsilon_0$. Novamente usando (3.30), temos

$$c_{l}(t) = -i \int_{0}^{t'} dt \chi \frac{\epsilon}{2} \left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t} \right) \langle \phi_{l} \mid Q(\mathbf{r}) \mid \phi_{0} \rangle e^{-i(\varepsilon_{l0})t}$$

$$= \frac{\chi \epsilon}{2} \langle \phi_{l} \mid Q(\mathbf{r}) \mid \phi_{0} \rangle \left(\frac{e^{i(\omega + \varepsilon_{l0})t}}{\omega - \varepsilon_{l0}} - \frac{e^{i(\omega - \varepsilon_{l0})t}}{\omega + \varepsilon_{l0}} \right)$$

$$= \chi \epsilon \langle \phi_{l} \mid Q(\mathbf{r}) \mid \phi_{0} \rangle \frac{\varepsilon_{l0} \cos \omega t - \omega \sin \omega t}{\varepsilon_{l0}^{2} - \omega^{2}}$$
(3.40)

Usando novamente a expressão (3.20) e (3.31) até primeira ordem

$$\langle \phi(t) \mid \hat{Q} \mid \phi(t) \rangle = \left(\langle 0 \mid + \sum c_i^*(t) \langle i \mid) \hat{Q} \left(\mid 0 \rangle + \sum c_i(t) \mid i \rangle \right)$$
$$= \sum_i c_i^*(t) \langle i \mid \hat{Q} \mid 0 \rangle + \sum c_i(t) \langle 0 \mid \hat{Q} \mid i \rangle$$
(3.41)

substituindo (3.40) em (3.41) obtemos

$$Q(t) = 2\chi\epsilon \frac{\sum_{i} \left| \langle i | \hat{Q} | 0 \rangle \right|^{2} \varepsilon_{l0} \cos \omega t}{\varepsilon_{l0}^{2} - \omega^{2}}$$
(3.42)

voltando à expressão (3.30), chegamos à relação de dispersão para a frequência

$$2\frac{\sum_{i} \left| \langle i | \hat{Q} | 0 \rangle \right|^{2} \varepsilon_{l0}}{\varepsilon_{l0}^{2} - \omega^{2}} = \chi^{-1}.$$
(3.43)

Tudo nessa equação está determinado, exceto a frequência. Com isso partimos de uma teoria de resposta linear à uma perturbação devido a presença de um campo externo chegando a determinar a equação em que o sistema pode vibrar auto-consistentemente.

Os estados que entram na equação (3.43) são auto-estados da hamiltoniana de campo médio H_0 , e o modo tesoura consiste em tomarmos o operador f como quadrupolar.

Capítulo 4

Conclusões e Resultados

No capítulo anterior desenvolvemos um modelo esquemático que trata o sistema microscopicamente baseado na resposta linear a um campo externo, e que permite o cálculo de qualquer modo coletivo do sistema além de ser possível calculá-los fora do regime de Thomas-Fermi variando o número de partículas.

Faremos nesse capítulo apenas uma aplicação do modelo para o cálculo do modo tesoura no condensado como apresentamos na última seção do capítulo introdutório, visando as bases microscópicas do desaparecimento do modo rígido do sistema. A equação que nos fornecerá a frequência desse modo é (3.43), e para tal é preciso determinar uma base que descreva bem os estados excitados. Os estado fundamental já foi calculado no segundo capítulo dessa dissertação.

Para o que segue, é preciso diagonalizar a hamiltoniana que descreve o sistema e para tal, escreve-la-emos em coordenadas adimensionais. Ao fim, para percebermos se o resultado é satisfatório, faremos uma comparação o resultado obtido por [32] e no capítulo-2, e para isso precisamos escrevê-las nas mesmas unidades.

4.1 Diagonalização do Hamiltoniano na Base de Oscilador Harmônico

A hamiltonina é a mesma que discutimos no capítulo-2,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} \left(\mathbf{r} \right) + V_{pseudo}, \qquad (4.1)$$

onde $V_{ext}(\mathbf{r})$ é o potencial da armadilha e $V_{pseudo} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\rho_0$ é a interação entre os átomos.

Faremos a tranformação de coordenadas $r = a_{\perp} \bar{r} \in \nabla = \frac{1}{a_{\perp}} \bar{\nabla}$, onde a grandezas com barras são adimensionais e $a_{\perp} = (\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}})^{1/2}$ é o comprimento característico do sistema.

Assim, a hamiltoniana escreve-se em coordenadas adimensionais

$$\frac{H}{\hbar\omega_{\perp}} = -\frac{1}{2}\,\bar{\nabla}^2 + \frac{1}{2}(\bar{r}^2 + \lambda^2\,\bar{z}^2) + \frac{1}{4}\zeta^5\,\bar{\rho_0},\tag{4.2}$$

onde λ é a deformação da armadilha, $\zeta = (8\pi Na/a_{\perp})^{1/5}$ e ρ_0 , densidade do estado fundamental, é escrita em coordenadas adimensionais

$$\bar{\phi} = \left(\frac{\omega_{2hf}^2 \omega_{3hf}}{\pi^3}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{1}{2}\left(-\omega_{2hf}\ \bar{r}^2 - \omega_{3hf}\ \bar{z}^2\right)\right)$$
$$\bar{\rho_0} = |\bar{\phi}|^2 \tag{4.3}$$

Escolheremos como base para escrever a hamiltoniana uma base de oscilador harmônico e, devido a simetria azimutal, a projeção z do momento angular continua sendo um bom número quântico. Com isso, mostra-se adequado tratarmos o problema em coordenadas cilíndricas. A solução para as funções de onda do oscilador nessas coordenadas é

$$\phi_r(\bar{r}) = \frac{\sqrt{2}L(N - n_z, m, \bar{r}) \exp\left(-\frac{1}{2}\bar{r}^2\right) r^{|m|}}{\sqrt{\frac{(N - n_z + |m|)!}{(N - n_z)!}}}$$

$$\phi_z(\bar{z}) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\bar{z}^2\right) H_{n_z}(\bar{z})}{\sqrt{2^{n_z}n_z!}}$$

$$\phi_\theta(\theta) = \frac{\exp\left(im\theta\right)}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Phi(r, \theta, z) = \phi_r(\bar{r}) \phi_z(\bar{z}) \phi_\theta(\theta), \qquad (4.4)$$

onde N é o número quântico principal, n_z o número quântico azimutal e m a projeção z do momento angular[22].

Temos então que resolver o problema $H | \phi_{\nu} \rangle = E_{\nu} | \phi_{\nu} \rangle$. Isso consiste em diagonalizar H em uma base que, nesse caso, foi escolhida ser a de oscilador harmônico. Usando a relação de completeza dessa base, $\sum_i | \Phi_{N,nz,m} \rangle \langle \Phi_{N,nz,m} | = 1$, teremos o autoestado de H escrito como uma combinação linear de elementos dessa base, onde os coeficientes é cada componente do autovetor de H, multiplicado pela componente da função correspondente, como mostra a equação abaixo

$$|\phi_{\nu}\rangle = \sum_{i} c_{i} |\Phi_{N,nz,m}\rangle.$$
(4.5)

A diagonalização dessa matriz é feita no pacote algébrico Waterloo Maple e nos fornece como resultado para o estado fundamental a seguinte a energia de E =8.396 em unidades de ω_{\perp} , o que está bem próximo do resultado de Hartree-Fock obtido variacionalmente em [32] e no capítulo-2 (E = 8.44, em unidades de ω_{\perp}), onde a discrepância é próxima de 0.5% para uma base com 21 elementos. Isso já permite termos confiança na escolha da função de onda para os estados excitados que entrarão no cálculo microscópico do modo tesoura. O resultado ainda mais baixo para a energia pode ser explicado por termos usado já a função de onda do estado fundamental obtida variacionalmente na hamiltoniana de campo médio, mas não podemos afirmar que esse resultado é mais preciso para comparar com os resultados experimentais pois deveria ser feito um programa para verificar a sua convergência ou aumentarmos a base no pacote algébrico para termos uma função de onda mais próxima do resultado que obtemos no capítulo-2. Um gráfico entre essas duas funções e mostrado no final dessa dissertação. Todavia, como veremos na próxima seção uma base com esse número de elementos já é suficiente para um resultado satisfatório e verificação da aplicabilidade do modelo.

Os resultados que obtemos nessa seção estão sintetizados na tabela 1, para o estado fundamental, e na tabela-2 para o primeiro estado excitado com número quântico m = 1, que será usada no cálculo do modo tesoura na próxima seção.

4.2 Cálculo do Modo Tesoura

O modelo que desenvolvemos para tratar bósons armadilhados se aplica para o cálculo de excitações coletivas de pequena amplitude, ou seja, elaboramos um modelo esquemático para o seu tratamento quando incluimos um potencial externo que seja uma perturbação no sistema. O primeiro passo dado para aplicá-lo encontra-se no capítulo-2, que se trata de descrever adequadamente o estado fundamental para montarmos a hamiltoniana de campo médio. Em seguida foi preciso uma descrição microscópica dos estados excitados e para isso diagonalizamos a hamiltoniana do sistema em uma base de oscilador harmônico. Teremos agora que dar sequência aos cálculos usando esses resultados resolvendo o conjunto das equações (3.18), (3.27) e (3.43), substituindo o operador de campo multipolar pela deformação que estamos

interessados em estudar, que nosso caso é o modo tesoura.

O modo tesoura é produzido por campo de deformação do tipo quadrupolar

$$f = yz = r\sin\theta * z,\tag{4.6}$$

escrito em coordenadas cilíndricas dada a simetria axial do nosso problema, a mesma utilizada na experiência realizada em [2]. Esse operador vem da expansão em multipolos de um campo elétrico.

Lembrando que o operador de excitação coletiva é descrito pela expresão (3.18) $Q(\mathbf{r}_i) = \nabla V_{ext} \bullet \nabla f(\mathbf{r}) + g \nabla \rho_0 \bullet \nabla f(\mathbf{r})$, substituindo V_{ext} , a densidade do estado fundamental que foi calculada no capítulo-2 variacionalmente e g temos como resultado para esse operador

$$Q = 0.071r\sin(\theta)z - 819.503\left[\exp(-0.0740r^2 - 0.209z^2)\right]r\sin(\theta)z.$$
(4.7)

Lembrando que $\chi^{-1} = \int \nabla Q(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) \rho_0 d\mathbf{r}$, devemos substitur o operador de excitação coletiva Q que calculamos acima, novamente a densidade do estado fundamental e o operador f e temos como resultado para a constante de acoplamento $\chi^{-1} = -.344$.

Esse modelo foi abordado por Liparini e Stringari [18] para o estudo de excitações coletivas em aglomerados metálicos e podemos notar que as expressões que obtivemos até o momento apresentam uma forma muito semelhante aos resultados que se obtém para os aglomerados quando se aproxima o potencial de interação de um corpo por um oscilador harmônico. Podemos checar isso através da expressão que eles obtém para o operador Q proporcional a yz tal como obtemos em 4.7 em coordenadas cilíndricas, sendo ela

$$Q = \left(2\omega_0^2 \left(1 - \frac{1}{3}\delta\right) - \frac{2}{5}\omega_p^2 \left(1 - \frac{1}{7}\delta\right)\right)yz \tag{4.8}$$

para o operador de quadrupolo, onde ω_p é a frequência de *plasmon*, ω_0 é a frequência do potencial de um corpo tipo oscilador harmônico e δ é a deformação desse potencial.

A diferença física entre esses dois sistemas começa a aparecer quando passamos ao cálculo da resposta do sistema ao operador de excitação coletiva, ou seja, o elemento de matriz que temos na relação de dispersão $2\frac{\sum_i \left|\langle i|\hat{Q}| 0\rangle\right|^2 \varepsilon_{i0}}{\varepsilon_{i0}-\omega^2} = \chi^{-1}$. Em aglomerados, ou sistemas fermiônicos em geral, dois termos apresentam elementos de matriz nãonulos, fato que está ligado a sistemas fermiônicos o estado fundamental deve ser do tipo determinante de Slater, ou seja, anti-simétrico por troca de índices. Isto faz com que a atuação do operador Q, que é do tipo $a_y^{\dagger}a_z^{\dagger}$, acople dois estados de partícula independente diferentes. Já no sistema que nos propomos analisar, todo o sistema está condensado ocupando o mesmo estado, ou a mesma função de onda. Com isso apenas um termo contribui para o elemento de matriz, pois permutações levarão no mesmo estado. Assim, encontramos uma justificativa microscópica em termos apenas um modo de excitação no condensado.

Para o cálculo de sua frequência devemos considerar que operadores do tipo $a_y^{\dagger} a_z^{\dagger}$ devem produzir uma excitação ligando estados de diferente momento angular tal que a sua variação seja $\Delta m = \pm 1$. Na tabela-2 encontra-se listado o autoestado de mais baixa energia para m = 1, e o valor da energia desse estado.

Na equação (3.43) consideraremos apenas o primeiro termo do somatório. Com

isso temos a relação de dispersão

$$\omega^2 = \epsilon_k^2 - 2\epsilon_k \frac{|\langle 0 | \hat{Q} | k \rangle|^2}{\chi^{-1}}$$
(4.9)

onde $\epsilon_k = E_1 - E_0$. A função de onda $|k\rangle$ está descrita na tabela-2 e o estado fundamental que usamos foi determinado no capítulo-2 variacionalmente.

Ao substituirmos esses valores, na equação (4.9), encontramos como resultado para a energia do modo tesoura $\omega = 1.46$.

Devemos então comparar esse resultado com o que temos na literatura, como por exemplo [1], que obtém como solução para o modo tesoura, nas mesmas unidades que tratamos, $\omega = \sqrt{2}$ partindo do formalismo hidrodinâmico de superfluidos, no caso em que todo o sistema se encontra condensado. Essa é uma evidência de superfluidez no sistema, pois o condensado apresenta apenas o modo de excitação irrotacional, não apresentando o modo elástico como o caso fermiônico e que discutimos nessa seção a sua natureza microscópica.

Como esperávamos, o resultado que obtemos nesse tratamento microscópico está em razoável acordo com o descrito por [1], com uma discrepância $\Delta = 3\%$, o que permitiu mostrar a validade de aplicação desse modelo em sistemas de bósons armadilhados além de encontrarmos uma justificativa microscópica para o desaparecimento do modo elástico. Melhorias desse resultado devem ser feitas através de computação numérica, aonde podemos, com menor custo computacional, expandir a base e observarmos o resultado com maior acordo.

Ci	$\Phi_{N,nz,m}$	Ci	$\Phi_{N,nz,m}$
.9646607857	$\Phi_{0,0,0}$.3518142249e-3	$\Phi_{8,8,0}$
.2689415227e-2	$\Phi_{2,0,0}$	2444757094e-11	$\Phi_{10,0,0}$
.2604970505	$\Phi_{2,2,0}$	1136052010e-8	$\Phi_{10,2,0}$
.1974661026e-4	$\Phi_{4,0,0}$	2751741706e-9	$\Phi_{10,4,0}$
.5180899416e-3	$\Phi_{4,2,0}$.1594019757e-7	$\Phi_{10,6,0}$
.3953577489e-1	$\Phi_{4,4,0}$	5809195507e-7	$\Phi_{10,8,0}$
.2105180812e-6	$\Phi_{6,0,0}$	6093112799e-4	$\Phi_{10,10,0}$
.2574865761e-5	$\Phi_{6,2,0}$		
.4495814721e-4	$\Phi_{6,4,0}$		
3833381255e-3	$\Phi_{6,6,0}$		
2797733698e-8	$\Phi_{8,0,0}$		
.1668263905e-7	$\Phi_{8,2,0}$		
7409306633e-7	$\Phi_{8,4,0}$		
2785477850e-5	$\Phi_{8,6,0}$		

Tabela 1- Estado fundamental: $E_0 = 8.393, m = 0.$

Ci	$\Phi_{N,nz,m}$	Ci	$\Phi_{N,nz,m}$
8915433613	$\Phi_{2,1,1}$	5625785e-4	$\Phi_{10,9,1}$
.4167704679	$\Phi_{4,1,1}$	6716978110e-4	$\Phi_{12,1,1}$
1324935166	$\Phi_{4,3,1}$.1074889217e-3	$\Phi_{12,3,1}$
1114621320	$\Phi_{6,1,1}$.1112682863e-4	$\Phi_{12,5,1}$
.3344435760e-1	$\Phi_{6,3,1}$	2909523382e-4	$\Phi_{12,7,1}$
4302081295e-2	$\Phi_{6,5,1}$.16817083e-4	$\Phi_{12,9,1}$
.1806594426e-1	$\Phi_{8,1,1}$	8404e-6	$\Phi_{12,11,1}$
2838949157e-2	$\Phi_{8,3,1}$		
7081529010e-3	$\Phi_{8,5,1}$		
.669581934e-3	$\Phi_{8,7,1}$		
1326812403e-2	$\Phi_{10,1,1}$		
4358234361e-3	$\Phi_{10,3,1}$		
.2801192068e-3	$\Phi_{10,5,1}$		
488555350e-4	$\Phi_{10,7,1}$		

tabela-2-Primeiro estado excitado: $E_1 = 10,658, m = 1.$

Apêndice A

Derivação Microscópica da Equação de Gross-Pitaveski

Nesse apêndice partiremos da descrição microscópica de campo médio (aproximação de Hartee-Fock) para um sistema de muitos corpos com o objetivo de derivarmos a equação de campo médio de um condensado de Bose-Einstein

A aproximação de Hartree-Fock consiste em trasformar um problema com correlação de dois corpos para um problema de partícula independente, considerando o potencial de interação somente em média, sendo assim uma teoria de campo médio, em que a solução para as equações de Hartree-Fock é a melhor base de partícula independente para o problema.

Devemos a partir de agora detalhar o sistema a que estamos tratando. Para uma hamiltoniana dada por

$$H = \sum_{i=1}^{N} (t_{i+}u_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1\\i\neq j}}^{N} v_{ij}$$
(A.1)

onde u_i é o potencial externo sentido por cada átomo, t_i é a energia cinética de cada átomo e v_{ij} é a interação entre dois átomos do sistema. Na representação $\{x\}$ a hamiltoniana se reescreve para

$$H = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + u\left(x_i\right)\right)}_{A} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1\\i \neq j}}^{N} v\left(x_i, x_j\right).$$
(A.2)

A hamiltoniana também pode ser escrita em segunda quantização

$$H = \sum_{i,j=1}^{N} \langle i \mid t+u \mid j \rangle a_{i}^{\dagger} a_{j} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l=1}^{N} \langle ij \mid v \mid kl \rangle a_{i}^{\dagger} a_{j}^{\dagger} a_{k} a_{l},$$
(A.3)

pois a parte A deve ser tratada como um operador de um corpo e a outra é um operador de dois corpos em segunda quantização. Vale ressaltar também que a parte A da equação A.2 é uma hamiltoniana de partícula independente (H_0) e o que se pretente em teorias de campo médio é transformar um problema com correlação de dois corpos em um problema de partícula independente tomando a média do potencial de dois corpos.

Colocando conjuntos completos em (A.3), teremos

$$\langle i \quad | \quad t+u \mid j \rangle = \int d^{3}\mathbf{x} d^{3}\mathbf{x}' \langle i \mid \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} \mid t+u \mid \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' \mid j \rangle$$

$$= \int d^{3}\mathbf{x} d^{3}\mathbf{x}' \phi_{i}^{*} \left(\mathbf{x} \right) \left(-\frac{\hbar^{2} \nabla_{i}^{2}}{2m} + u \left(\mathbf{x} \right) \right) \phi_{j} \left(\mathbf{x}' \right) \delta \left(\mathbf{x} - \mathbf{x}' \right)$$

$$= \int d^{3}\mathbf{x} \phi_{i}^{*} \left(\mathbf{x} \right) \left(-\frac{\hbar^{2} \nabla_{i}^{2}}{2m} + u \left(\mathbf{x} \right) \right) \phi_{j} \left(\mathbf{x} \right)$$
(A.4)

e para o potencial

$$\begin{aligned} \langle ij &| v | kl \rangle = \int d^{3}\mathbf{x} d^{3}\mathbf{x}' d^{3}\mathbf{y} d^{3}\mathbf{y}' \times \\ &\times (\langle i, j | \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | v | \mathbf{x}', \mathbf{y}' \rangle \langle \mathbf{x}', \mathbf{y}' | k, l \rangle + \\ &\langle i, j | \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | v | \mathbf{x}', \mathbf{y}' \rangle \langle \mathbf{x}', \mathbf{y}' | l, k \rangle) \\ &= \int d^{3}\mathbf{x} d^{3}\mathbf{x}' d^{3}\mathbf{y} d^{3}\mathbf{y}' \phi_{i}^{*}\left(\mathbf{x}\right) \phi_{j}^{*}\left(\mathbf{y}\right) \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | v | \mathbf{x}', \mathbf{y}' \rangle \times \end{aligned}$$

$$\times \left[\phi_{k}\left(\mathbf{x}'\right)\phi_{l}\left(\mathbf{y}'\right) - \phi_{l}\left(\mathbf{x}'\right)\phi_{k}\left(\mathbf{y}'\right)\right]\delta\left(\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}'_{i}\right)$$
$$= \int d^{3}\mathbf{x}d^{3}\mathbf{y}\phi_{i}^{*}\left(\mathbf{x}\right)\phi_{j}^{*}\left(\mathbf{y}\right)v\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\left[\phi_{k}\left(\mathbf{x}'\right)\phi_{l}\left(\mathbf{y}'\right) + \phi_{l}\left(\mathbf{x}'\right)\phi_{k}\left(\mathbf{y}\right)\right], \quad (A.5)$$

para o caso em que essa interação seja local.

Temos então a hamiltoniana completa escrita na representação de posição dada, bastando inserir as equações (A.4) (A.5) na equação (A.3). O que temos a fazer agora é transformar esse problema em

$$H = \sum_{i=1}^{N} h_{HF}(i) + v_{res}$$
 (A.6)

tal que tenha como solução

$$h_{HF}\phi_j = \epsilon_j\phi_j \tag{A.7}$$

com ϕ_j sendo a nossa nova base de partícula independente.

Mesmo a aproximação de Hartree-Fock tendo conseguido trasformar o problema tomando a média do potencial, é importante notarmos que ainda sobra uma interação residual, que terá um importante papel quando começarmos a descrever as excitações coletivas.Passaremos agora para a derivação das equações de Hartree-Fock.

Sua derivação pode ser feita usando o teorema de Wick, teorema de Thouless ou utilizando um método variacional. Essa ultima forma é que escolheremos, para estar em consonância com o segundo capítulo dessa dissertação. Todas essas possibilidades estão bem descritas nas referências [23][21][24], principalmente para os casos fermiônicos. O caso bosônico é muito semelhante.

Nesse método, partimos de uma função de onda de muitos corpos completamente

simetrizada. Essa função será do tipo permanente dada por

$$\Phi(\alpha_{1}, \alpha_{2}...\alpha_{N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\alpha_{1}}(1) & \phi_{\alpha_{2}}(1) & \dots & \phi_{\alpha_{N}}(1) \\ \phi_{\alpha_{1}}(2) & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & & & & \\ \phi_{\alpha_{1}}(N) & \phi_{\alpha_{2}}(N) & \phi_{\alpha_{N}}(N) \end{vmatrix}_{+}$$
(A.8)

Cada ϕ no permanente acima é uma função de onda de partícula independente.

Para obtermos a melhor função de onda nessa aproximação, utilizaremos um princípio variacional tal que este estabeleça que para pequenas variações de um autoestado, o valor esperado da energia seja estacionário. Para o estado fundamental, particularmente, ele será um mínimo. Essas condições são representadas por

$$\delta \langle \Phi \mid H \mid \Phi \rangle = \langle \delta \Phi \mid H \mid \Phi \rangle = 0 \tag{A.9}$$

e pequenas variações tal que preservem a normalização das funções de onda de um corpo

$$\int \phi_i^* \left(\mathbf{r} \right) \phi_i \left(\mathbf{r} \right) d\mathbf{r} = 1.$$
(A.10)

Aplicaremos então esse método, tomando apenas variações em torno do estado fundamental. isso significa variar os seus estados de partícula única, para acharmos qual o estado que minimiza a energia, deslocando partículas para níveis antes desocupados e deixando buracos em seu estado original.

A equação que faz isso é

$$\frac{\delta}{\delta\phi_{\alpha}^{*}(\mathbf{x})}\left(\left\langle\Phi\mid H\mid\Phi\right\rangle-\sum\epsilon_{i}\int\phi_{i}^{*}(\mathbf{x})\,\phi_{i}\left(\mathbf{x}\right)d\mathbf{x}\right)=0.\tag{A.11}$$

As grandezas ϵ_i são multiplicadores de Lagrange, colocados para assegurar o vínculo

de normalização (A.10).

Ao tomarmos variações do valor esperado de H, dado pelas equações (A.5) e (A.4), e exigindo a condição de mínimo, $\frac{\delta}{\delta \phi_{\alpha}^{*}(\mathbf{x})}$, teremos equações, para o termo 1, do tipo

$$0 = \frac{\delta}{\delta \phi_{\alpha}^{*}(\mathbf{x})} \left(\sum_{i=1}^{N} \int d\mathbf{x} \phi_{i}^{*}(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^{2} \nabla^{2}}{2m} + u(\mathbf{x}) \right) \phi_{j}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \phi_{i}^{*}(\mathbf{x}) \phi_{j}^{*}(\mathbf{y}) v(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi_{i}(\mathbf{x}) \phi_{j}(\mathbf{y}) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \phi_{i}^{*}(\mathbf{x}) \phi_{j}^{*}(\mathbf{y}) v(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi_{j}(\mathbf{x}) \phi_{i}(\mathbf{y}) - \sum \epsilon_{i} \int \phi_{i}^{*}(\mathbf{x}) \phi_{i}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)$$
(A.12)

Resolvendo essa equação, temos

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u\left(\mathbf{x}\right) + \int d\mathbf{y}\rho\left(\mathbf{y}\right)v\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\right)\phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right) + \int d\mathbf{y}\rho\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)v\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right) \quad (A.13)$$

e para os multiplicadores

$$\frac{\delta}{\delta\phi_{\alpha}^{*}(\mathbf{x})}\sum\epsilon_{i}\int\phi_{i}^{*}(\mathbf{y})\,\phi_{i}(\mathbf{y})\,d\mathbf{y}=\epsilon_{\alpha}\phi_{\alpha}(\mathbf{x}) \tag{A.14}$$

Juntando as equações (A.13) e (A.14) chegamos à equação de Hartree-Fock

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u\left(\mathbf{x}\right) + \int d\mathbf{y}\rho\left(\mathbf{y}\right)v\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\right)\phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right) + \int d\mathbf{y}\rho\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)v\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right)$$

$$= \epsilon_{\alpha}\phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right)$$
(A.15)

onde:

 $\rho(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{N} \phi_i^*(\mathbf{y}) \phi_i(\mathbf{y})$ é a densidade local, que fornece o termo direto do potencial de dois corpos e;

 $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{N} \phi_i^*(\mathbf{y}) \phi_i(\mathbf{x})$ é a densidade não local, que fornece o termo de troca do potencial de dois corpos.

Podemos ver que essa aproximação gera um problema de um corpo que só pode

ser resolvido se conhecemos as densidades. Com isso, acabamos por gerar um problema autoconsistente, pois devemos ter uma expressão inicial para a densidade e assim resolvermos o problema. A partir da nova solução recalcularmos uma nova densidade e repetir o processo até que a função de onda obtida após n-passos seja igual a obtida após n-1-passos.

A equação (A.15) é geral e serve para qualquer sistema de muitos corpos, formado por bósons, em seu estado fundamental. Para aplicarmos ao condensado e extrairmos a equação de Gross-Pitaevskii temos que considerar que todas as partículas encontram-se no estado fundamental $\phi_{\alpha} \equiv \phi_0$ e a equação (A.15) transformar-se-á em

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u\left(\mathbf{x}\right) + (N-1) \int d\mathbf{y} \phi_0^*\left(\mathbf{y}\right) v\left(\mathbf{x} - \mathbf{y}\right) \phi_0\left(\mathbf{y}\right)\right) \phi_\alpha\left(\mathbf{x}\right) = \epsilon_\alpha \phi_\alpha\left(\mathbf{x}\right).$$
(A.16)

Essa equação descreve em condensado para todo tipo de interação de dois corpos que ele apresente. Note também que a densidade local e não local nesse limite são as mesmas, pois trata-se de um sistema bosônico.

O que precisamos agora é substituir a interação de dois corpos pelo *pseudopotencial*

$$V\left(\mathbf{x} - \mathbf{y}\right) = g\delta\left(\mathbf{x} - \mathbf{y}\right) \tag{A.17}$$

onde g é uma constante dada em termos do comprimento de espalhamento para ondas-s pela equação

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}.\tag{A.18}$$

Substituindo esse potencial em (A.16), e tomando N muito grande tal que $N \approx N+1$

partículas, escrevemos a equação de Gross-Pitaevskii.

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u\left(\mathbf{x}\right) + Ng \mid \phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right) \mid^2\right) \phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right) = \epsilon_{\alpha} \phi_{\alpha}\left(\mathbf{x}\right), \quad (A.19)$$

Apêndice B

Descrição Hidrodinâmica

Faremos nesse apêndice uma descrição dos modos coletivos partindo do formalismo hidrodinâmico. Essa teoria traz como vantagem trabalharmos sob o conceito de densidade e corrente e obtermos expressões analíticas para a relação de dispersão. Nesse apêndice derivaremos resumidamente a relação de disperção para os modos de excitação coletiva, tal como obtido por [13] em condensados armadilhados.

O sistema tratado em [13], é um sistema de gás de Bose-Einstein armadilhado em um potencial harmônico como descritos em outros capítulos anteriormente, com interação de dois corpos repulsiva, e diluído, de forma tal que possamos desprezar a energia cinética dos átomos (aproximação de Thomas-Fermi).

A função de onda do sistema pode ser escrita pelo produto de um módulo e uma fase:

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \sqrt{n(\mathbf{r},t)} \exp(iS(\mathbf{r},t)).$$
(B.1)

A partir da densidade | $\Phi(\mathbf{r}, t)$ |², podemos calcular a velocidade do campo

$$\mathbf{v}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Phi^* \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^* \right) n(\mathbf{r},t)^{-1}.$$
 (B.2)

Resolvendo (B.2), obtemos a expressão para velocidade. Nesse caso ela representa o escoamento de um fluido irrotacional, propriedade de sistemas superfluidos,

$$\mathbf{v}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2mi} \nabla S(\mathbf{r},t). \tag{B.3}$$

A equação de Gross-Pitaevskii é reescrita nessa aproximação pelas equações

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla (\mathbf{v}n) = 0$$
$$m\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \left(\delta \mu + \frac{m\mathbf{v}^2}{2}\right) = 0, \tag{B.4}$$

onde

$$\delta\mu = V_{ext} + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}n - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}}\nabla^2\sqrt{n} - \mu \tag{B.5}$$

é a variação do potencial químico em relação ao seu valor no estado fundamental, e $\delta \mu = 0$ corresponde a equação de Gross-Pitaevskii para o parâmetro de ordem. Seguindo a descrição feita em [13], analisaremos o condensado no limite em que o termo cinético, proporcional a $\hbar^2 \nabla^2$, em (B.5) seja desprezível.

Na aproximação de Thomas-Fermi, a densidade do estado fundamental é dada por

$$n(\mathbf{r}) = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \left(\mu - V_{ext}\right). \tag{B.6}$$

A solução da equação (B.4) está determinada em [6][13], e a relação de dispersão obtida para o caso em que temos armadilha isotrópica é

$$\omega(n,l) = \omega_0 \left(2n^2 + 2nl + 3n + l\right)^{1/2}.$$
 (B.7)

A partir desse resultado, podemos analizar os modos pretendidos. Estamos interessados, principalmente nos modos de mais baixa amplitude, portanto os modos de superfície, devido a sua ligação com o fenômeno da superfluidez. Esses modos têm valor nulo para o número quântico n_r . Nesse caso a relação de dispersão se reduz a

$$\omega = \sqrt{l}\omega_0. \tag{B.8}$$

Como exemplo para valores desses modos encontramos a excitação de dipolo, que corresponde a l = 1 e $\omega = \omega_0$, e a de quadrupolo, que corresponde a l = 2 e $\omega = \sqrt{2}\omega_0$. O modo de monopolo, também conhecido como modo de respiração, corresponde a uma variação no número quântico principal e matendo o valor do momento angular, ou seja, $n_r = 1$ e l = 0 e a sua frequência é $\omega = \sqrt{5}\omega_0$.

É importante notarmos que as frequências obtidas não são múltiplos inteiros inteiros da frequência da armadilha, com exceção para o modo de dipolo. Isso fortalece a necessidade de incluirmos o efeito da interação para o cálculo, não sendo aplicada a hipótese de gás não interagente, principalmente por estarem esses resultados em acordo com os dados experimentais.

O acordo com os dados experimentais e a comparação com o modelo da gases não-interagentes encontran-se em [13], como a relação de dispersão obtida para armadilhas anisotrópicas.

Apêndice C

Pseudo-potencial

O cálculo do potencial de interação através de teoria de espalhamento, pode ser feito a partir da equação integral que determina a função de onda espalhada

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$$
(C.1)

a partir da qual podemos definir a amplitude de espalhamento, que está relacionada à seção de choque do sistema

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv -\frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$$
(C.2)

em que ao tomarmos o comportamento assintótico, $|\mathbf{r}| = r \to \infty$, a função de onda pode ser escrita, ao assumir por simplicidade que o potencial tem alcance finito e não tenha estados ligados, como

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{e^{ikr}}{r}$$

Essa expressão é uma soma de uma onda plana incidente e uma onda espalhada esfericamente na forma $\frac{e^{ikr}}{r}$ com fator de proporcionalidade dado pela amplitude de espalhamento $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ Usando a aproximação de Born para o seu cálculo, temos

$$f_{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{M}{4\pi\hbar^2} \widetilde{V}_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$$
(C.3)

Para um potencial esfericamente simétrico e espalhamento elástico, a amplitude de espalhamento depende de k e do ângulo de espalhamento θ , definido por $\cos \theta = \overset{\land}{k_{\bullet} k'}$, de forma que ela se escreve na expansão em ondas parciais

$$f(k,\theta) = \sum \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$$
(C.4)

onde δ_l é a diferença de fase da onda incidente com a onda parcial espalhada. No limite de baixas energias, ou seja, $k \to 0$, a diferença de fase para uma onda-s é dado por $\delta_0 = -ka$. Esse limite define o comprimento de espalhamento para ondas-s a. O único termo que deve contribuir a baixas energia deve ser mesmo o termo de momento angular nulo. Com isso a amplitude de espalhamento

$$\lim_{|\mathbf{k}'|=|\mathbf{k}|\to 0} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx a \tag{C.5}$$

Para se fazer uma ligação com o potencial efetivo, é conveniente tomarmos a transformada de Fourier

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \widetilde{\Psi_k}(\mathbf{p})$$
(C.6)

Substituindo essa expressão em (C.2), temos a amplitude de espalhamento

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv -\frac{M}{4\pi\hbar^2} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \widetilde{V}_{\mathbf{k}'-\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})$$
(C.7)

Por outo lado,

$$\frac{e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi^3)} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - q^2 + i\eta}$$
(C.8)

e a função de onda espalhada

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = (2\pi)^3 \,\delta^3 \left(\mathbf{k} - \mathbf{p}\right) - \frac{4\pi f\left(\mathbf{p}, \mathbf{k}\right)}{k^2 - q^2 + i\eta} \tag{C.9}$$

Voltando à expressão para amplitude de espalhamento (C.7) e tratando-a na aproximação de Born

$$\frac{4\pi\hbar^2}{M}f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} - 4\pi\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{V_{\mathbf{k}'-\mathbf{p}}V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}}{k^2 - q^2 + i\eta} + \dots$$

que no limite de $k^2 = k'^2 \to 0$ se torna numa série para comprimento de espalhamento

$$\frac{4\pi\hbar^2}{M}a \approx V_0 - \frac{4\pi}{M} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{|V_{\mathbf{p}}|^2}{p^2} + \dots$$
(C.10)

em primeira ordem tomamos

$$V_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{M}a = g \tag{C.11}$$



Figura-1 Imagens da distribuição de velocidades de átomos armadilhados. A figura da esquerda mostra o gás distribuído termicamente antes da Condensação de Bose-Einstein ocorrer. Na figura do meio o sistema se aproxima da Temperatura Crítica. Nota-se que a maior parte do sistema encontra-se com baixos momenta. No gráfico da direita o sistema encontra-se puramente na fase condensada. Essa figura foi obtida da referência [3].



Função de onda

Função de onda do condensado, a T=0, solução obtida numericamente a partir da equação de Gross-Pitaevskii em armadilha esférica com interação repulsiva entre os átomos do condensado. As três linhas sólidas correspondem a valores de Na/ a_{ho} = 1,10,100, enquanto a linha pontilhada corresponde ao gás ideal. Esse gráfico foi obtido por Dalfovo *et al.* Para maiores detalhes sobre o método consultar [6].



Método para excitar o modo tesoura a partir do giro repentino da barreira de potencial. As linhas sólidas indicam a forma da nuvem condensada em sei eixo maior. As linhas pontilhadas indicam a forma do potencial. (a) Temos a situação inicial, em que o potencial e o condensado estão alinhados. (b) Temos a configuração imediatamente após a nuvem condensada ser deslocada da sua posição de equilíbrio. (c) A seta maior indica a direção do modo tesoura enquanto a menor indica o modo de excitação quadrupolar. Essa figura foi obtida de [2].

Bibliografia

- [1] Guéry-Odelin D and Stringari S 1999 Phys. Rev. Lett. 83, 4452.
- [2] Maragò, O. M., Hopkins, S. A., Arlt, J., Hodby, E., Hechenblaikner, G. and Foot, C. J. 2000 Phys. Rev. Lett. 84, 2056
- [3] A. Grriffin, A brief History of our understanding of BEC: From Bose to Beliaev, Lecture in Varenna Summer School, 1998), cond-mat/9901123
- [4] Cohen-Tannoudji, C., 1998, Rev. Mod. Phys. 70, 707.
- [5] Phillips, W. D., 1998, Rev. Mod. Phys. 70, 721.
- [6] Dalfovo, F., Giorgini, S., Pitaevskii, L. and Stringari, S., 1999, *Rev. Mod. Phys.* 71, 463
- [7] Bogoliubov, N., 1947, J. Phys. USSR 11, 23
- [8] Lee, T. D., Huang, K., Yang, C. N., 1957 Phys. Rev 106,1135
- [9] Cohen-Tannoudji,C.,Trabalho de Introdução à Condensação de Bose-Einstein (http://www.ens.fr/cct)
- [10] E. P. Gross, 1960, Nucl. Phys. 14 389
- [11] Gross, E. P. 1961, Nuovo Cimento **20** 454.

- [12] Pitaevskii, L. P., 1961, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40** 646
- [13] Stringari, S., 1996, Phys. Rev Lett 77, 2360
- [14] M. O. C. Pires and E. M. Passos, 2000, J. Phys. B: at Mol. Opt. Phys. 33 3929
- [15] N. Lo Iudice and F. Palumbo, 1978, Phys. Rev. Lett. 41 1532
- [16] E. Lipparini and S. Stringari, *Phys. Rep.* 1989, **175** (3&4)
- [17] Lipparini E and Stringari S, 1983, Phys. Lett. 130B 139
- [18] Lipparini, E., Stringari, S., 1991, Z Phys D 18, 193
- [19] V.O. Nesterenko, W. Kleinig, F.F. de Souza Cruz, N. Lo Iudice 225- Collective Excitations in Fermi and Bose Systems-Proceedings of the International Workshop on -1999 Ed. - Carlos A. Bertulani, L. Felipe Canto, Mahir S. Hussein-World Scientific
- [20] Nesterenko, V. O.; Kleinig, W.; de Souza Cruz, F. F.; Lo Iudice, 1999 N. Phys. Rev. Lett. 83, 57
- [21] Rowe, D. J. Nuclear collective motion: models and Theory.London: Methuen,1970.
- [22] de Shalit A, Feschbach H. Theoretical Nuclear Physics. New York: J Willey, c1974
- [23] E. K. U. Gross, E. Runge and O. Heinonen 1991, Many Particle Theory (Adam Hilger)
- [24] A. L. Fetter and J. D. Wallecka 1971, Quantum Theory of Many Particle Systems (McGraw-Hill, New York)

- [25] Pitaevskii, L. P., 1961, Sov. Phys. JETP 13, 451
- [26] Fetter, A., Theory of a dilute low-temperature trapped Bose Condensate. Lectures from International School of Physics "Enrico Fermi" on Bose-Einstein Condensation in atomic gases, Varenna, July, 1998 - cond-mat 9811366
- [27] Ruprecht, P. A., M. Edwards, K. Burnett, and C. W. Clark, 1996, Phys. Rev. A 54, 4178.
- [28] Huang, K., Statistical Mechanics 1987, Second Edition (John Wiley and Sons, New York)
- [29] Salasnich L., 2000 Int. J. Mod. Phys. B14, 1.
- [30] Griffin, A., Snoke, D. W., Stringari, S., eds., 1995, Bose Einstein Condensation (Cambridge Univ, Press, Cambridge)
- [31] Blaizot J P and Ripka G 1986 Quantum Theory of Finite Systems (Cambridge, MA:MIT Press).
- [32] Baym G and Pethick C J 1996 Phys. Rev. Lett. 77 6.
- [33] Huang K and Yang C N 1957 Phys. Rev. 105 767.
- [34] Esry, B. D., 1997, Phys. Rev. A 55 1147
- [35] T. Suzuki and D. J. Rowe, 1977, Nucl. Phys. A289 461.
- [36] N. Lo Iudice and F. Palumbo, 1978, Phys. Rev. Lett. 41 1532
- [37] D. J. Thouless, 1960, Nucl. Phys. 21 225