



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.007/2009

**REDUÇÃO DIMENSIONAL DAS EQUAÇÕES DE
GROSS-PITAEVSKII E DENSIDADE FUNCIONAL**

Camilo Andrés Granados Buitrago

Orientador

Prof. Dr. Sadhan Kumar Adhikari

Agosto de 2009

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Agradecimientos

Porque no es de la grandes respuestas sino de las grandes preguntas que se construye el conocimiento. A mi familia a mis amigos y a todos aquellos que me brindaron una mano para salir adelante. Al Brasil al IFT-UNESP y al profesor S. K. Adhikari por darme la oportunidad de mejorar. LMS.

Resumo.

A realização experimental dos condensados de Bose-Einstein (BEC) e dos superfluidos fermiônicos teve uma grande importância dentro da física dos últimos 20 anos. Como é bem sabido, os BEC são bem descritos pela equação de Gross-Pitaevskii (GP) a qual é uma equação de campo médio ou efetiva, devido ao termo de interação entre partículas presente nesta equação. Em uma completa analogia com o BEC foi derivada uma equação não-linear para a descrição do superfluido de Fermi conhecida como equação de densidade funcional (DF) por S. K. Adhikari. Neste trabalho apresentaremos nos dois primeiros capítulos estudos sobre os BEC e superfluido de Fermi usando a GP e a DF. Serão mostradas as soluções para as duas equações nos limites de Thomas-Fermi e de acoplamento fraco, assim como serão discutida a relação das GP e DF com as equações da hidrodinâmica. Nos dois últimos capítulos serão derivadas equações reduzidas da GP e DF com o fim de estudar condensados em uma e duas dimensões na presença de um potencial harmônico com simetria cilíndrica. Estas equações reduzidas serão resolvidas nos limites de Thomas-Fermi e acoplamento fraco. Finalmente o método será comparado com a aproximação variacional com o fim de mostrar a sua validade.

Palavras Chaves: Condensação de Bose-Einstein, Superfluido de Fermi, Equação de Gross-Pitaevskii, Aproximação de Thomas-Fermi.

Abstract

The experimental realization of Bose-Einstein condensate (BEC) and the Fermi superfluid had great importance in the physics of the last 20 years. As is well known, the BEC is well described by the equation of Gross-Pitaevskii (GP) which is a mean field or effective equation because of the term of interaction between particles in it. In a complete analogy with the BEC was postulated a non-linear equation to describe the superfluid fermionic condensate known as the equation of density functional (DF) by S. K. Adhikari. This work presents in the first two chapters studies of the BEC and superfluid fermionic condensate using GP and DF. It will show the solutions for both equations in the Thomas-Fermi limit and weak coupling, as will be discussed the relationship of the GP and DF equations with the equations of hydrodynamics. In the last two chapters are postulated reduced equations for the GP and DF in order to study condensed into one and two dimensions in the presence of a harmonic potential with cylindrical symmetry. These reduced equations are solved in the Thomas-Fermi and weak coupling limit. Finally the method is compared with the variational approach in order to show its validity.

Key Words: Bose-Einstein Condensation, Fermi Superfluid, Gross-Pitaevskii Equation, Thomas-Fermi Approximation.

Sumário

1 Introdução	p. 7
2 Condensados de Bose-Einstein	p. 11
2.1 Parâmetro de Ordem	p. 11
2.2 Equação de Gross-Pitaevskii	p. 14
2.3 Leis de conservação	p. 18
2.4 Estados estacionários da equação de Gross-Pitaevskii	p. 20
2.4.1 Limite de Thomas-Fermi	p. 21
2.4.2 Solução variacional da equação de Gross-Pitaevskii	p. 23
Referências	p. 25
3 Gás de Fermi Superfluido	p. 26
3.1 Gás de Fermi numa armadilha harmônica. Gás inhomogêneo. . .	p. 27
3.2 Aproximação de Thomas-Fermi para férmions superfluidos	p. 30
3.2.1 Regime BCS	p. 33
3.2.2 Regime unitário	p. 34
3.3 Equações Hidrodinâmica para férmions superfluidos	p. 35
3.4 Relações Gerais	p. 36
3.4.1 Teorema do viral	p. 36
3.4.2 Energia, potencial químico e radio quadrático meio	p. 37
Referências	p. 41
4 Redução dimensional da equação de GP	p. 42
4.1 Redução de 3D-1D e 3D-2D da equação de GP	p. 43

4.1.1	Redução 3D-1D da equação GP (Cigar-Shaped BEC)	p. 43
4.1.2	Redução 3D-2D da equação de GP (Disk-Shaped BEC)	p. 46
4.2	Solução Variacional da equação de GP	p. 47
4.2.1	Condensado tipo cigarro	p. 48
4.2.2	Condensado tipo disco	p. 49
4.2.3	Solução Variacional da equação 3D de GP	p. 50
	Referências	p. 53
5	Redução dimensional da equação de DF	p. 54
5.1	Redução de 3D-1D e 3D-2D da equação DF para um superfluido de Fermi.	p. 54
5.1.1	Redução da equação DF de 3D-1D (Cigar-Shaped condensate)	p. 55
5.1.2	Redução da equação DF de 3D-2D (Disk-Shaped condensate) p.	57
5.2	Solução das equações reduzidas usando a aproximação variacional	p. 60
5.2.1	Condensado tipo cigarro	p. 60
5.2.2	Condensado tipo disco	p. 62
5.3	Solução variacional para a equação DF tridimensional	p. 63
5.4	Conclusões	p. 65
	Referências	p. 68
	Apêndice A - Off-diagonal long ranged order	p. 69
	Apêndice B - Interações Efetivas	p. 71
	Apêndice C - Dedução da equação de GP	p. 72
C.1	Equação de Heisenberg	p. 72
C.2	Aproximação de Hartree	p. 73

Apêndice D - Invariância de Galileo da função de onda do condensado	p. 75
D.1 Equação GP	p. 75
D.2 Equação DF	p. 77
Apêndice E - Superfluidiez	p. 78
E.1 Teoria Hidrodinâmica de superfluidos (Bosons): Temperatura zero	p. 78
E.2 Teoria Hidrodinâmica de superfluidos (Férmions): Temperatura zero	p. 79

1 Introdução

A história dos condensados de Bose-Einstein condensation (BEC) começou com a predição feita por Albert Einstein em 1925 baseada na grande idéia do físico indiano Satyendra Nath Bose que desenvolveu a física estatística para fónes sob a consideração de qual é a distribuição de partículas sobre um estado acessível do sistema de partícula única.

Einstein conseguiu entender que abaixo certa temperatura crítica o comportamento dos bósons (partículas de espim inteiro) mudava, uma vez que eles sofriam uma transição de fase de um estado normal a um estado onde uma parte deles preenchia o estado de mais baixa energia de partícula única. A estatística que descreve o fenômeno é conhecida como Estatística de Bose-Einstein. A transição de fase ocorre para um gás de partículas não interagentes e é determinada pela estatística e não pelas interações. Porém a BEC é manifesta na natureza em um gás inhomogéneo de partículas interagentes sob certas condições de dilues e estes efeitos são descritos pela Mecânica Quântica Estatística (MQE). Os efeitos da MQE só são relevantes quando a temperatura T_c é baixa o suficiente para que a longitude de onda de De Broglie começa a ser da ordem das dimensões do sistema

$$\lambda = \frac{h}{(mk_B T)^{1/2}}$$

embaixo desta temperatura crítica T_c os átomos se condensam e sofrem um fenômeno conhecido como crise de identidade. Esta crise de identidade é sofrida por bosons devido ao sobrelapamento da sua função de onda. Quando a temperatura é suficientemente baixa o tamanho do pacote de onda começa a ser maior e se o sistema esta frio o suficiente o sistema não se comporta como partículas individuais mais sim como partículas que perderam a sua identidade. Podemos afirmar então que o sistema esta em um grande estado quântico. Setenta e cinco anos depois da predição da BEC, esta foi feita experimentalmente usando o método de esfriamento laser em átomos de rubídio e sódio. Em uma analogia direta com a BEC sete anos depois da sua realização experimental foi realizado o superfluido de Fermi. Definimos a condensação de pares de átomos

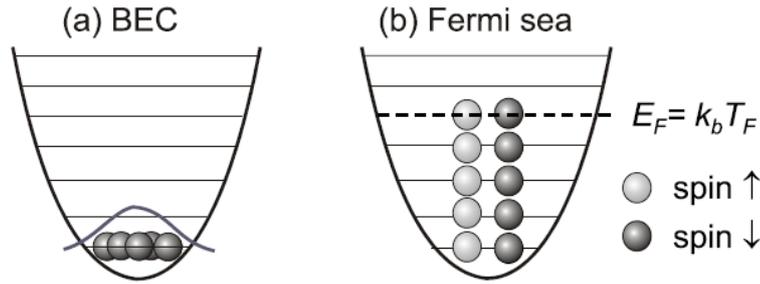


Figura 1: BEC e superfluido de Fermi em uma armadilha harmônica

fermiônicos ou equivalente a condensação de Fermi, como a condensação na qual a estatística de Fermi cumpre um papel fundamental. Isto quer dizer que o princípio de exclusão de Pauli será muito importante neste tipo de condensação.

O estudo dos sistemas de muitos fermions é em algum sentido complementar ao estudo dos sistemas de muitos bosons. Em contraste a idéia do gás de bosons o gás de fermions não sofre uma transição de fase nas temperaturas baixas, eles só sofrem um passo suave de um regime clássico para um regime quântico. Isto é uma consequência direta do princípio de exclusão de Pauli, a qual proíbe que dois fermions com os mesmos números quânticos ocupem o mesmo estado quântico. O que nos mostra que a componente s da função de onda de partícula única no sistema de fermions idênticos é proibida. Este efeito tem uma grande consequência no mecanismo de esfriamento. No limite da temperatura zero os fermions preenchem o estado de mais baixa energia da armadilha com exatamente um fermion por estado, em um sistema conhecido como mar de Fermi. Porém, no caso do gás de Fermi de dois componentes na presença de interações fracas e atrativas dentro de uma armadilha o sistema sofre uma transição de fase do estado normal a um estado superfluido descrito pela física dos pares de Cooper. Esta transição de fase é conhecida como transição de fase BCS (John Bardeen, Leon Cooper, y John Robert Schrieffer). Os pares de Cooper com momento e espin oposto tem a tendência a formar um estado ligado. Como veremos existe uma grande diferença no superfluido de Fermi dependendo do valor da comprimento de espalhamento que descreve o espalhamento entre os dois tipos de partículas.

O nosso interesse está dirigido a estudar o superfluido de Fermi por meio da equação de densidade funcional DF. O sistema que estudaremos será um gás de fermions com dois estados de espin diferentes confinados por uma ar-

madilha harmônica. O processo de interação será considerado elástico. No regime que trabalharemos esta caracterizado pelas colisões de dois corpos, temperatura zero e uma grande distancia entre partículas. Isto define o alcance espacial do potencial interatômico $R_0 \ll \lambda_B$ e $R_0 \ll k_F^{-1}$ onde sabemos que λ_B e k_F são a longitude de onda De Broglie e o momento de Fermi respectivamente. Esta condição R_0 faz que a contribuição ao espalhamento esteja dada pelos estados com momento angular $l = 0$.

Mesmo que muitos autores apontem a impossibilidade de escrever uma equação correta para descrever exatamente os condensados de Fermi superfluidos nos limites BCS e unitário o nosso interesse esta em usar o fato de que sendo o condensado um superfluido podemos derivar, usando as equações da hidrodinâmica, uma equação não linear um pouco diferente da GP mais formalmente na mesma linha de pensamento, o que quer dizer, uma equação de Schrodinger não linear com o termo de energia cinética mais o termo de energia potencial mais o termo não linear, que no caso dos Fermions estará dado pela energia de Fermi do gás homogêneo. Assim nosso objetivo neste trabalho esta justificado pelos bons resultados mostrados pela DF, como mostra a figura(Tomada de [9] do primeiro capítulo). A segunda parte do trabalho esta

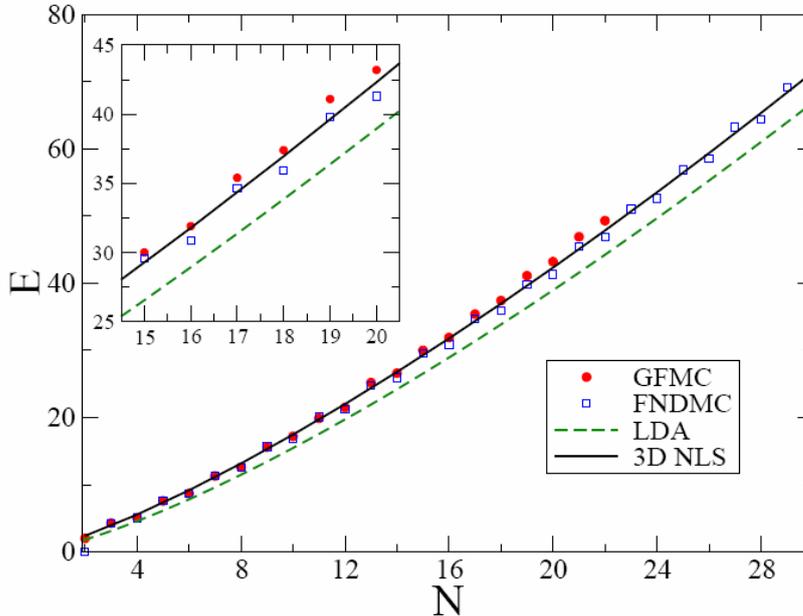


Figura 2: Energia do gás de Fermi superfluido usando a DF que corresponde a 3D NLS

motivada em estudar equações reduzidas para BEC e condensados de Fermi em uma e duas dimensões já que estes podem ser criados experimentalmente com a aplicação de um campo externo em alguma direção privilegiada, no nosso caso o

campo terá simetria cilíndrica e as direções que apontamos serão a radia e axial. Assim poderemos estudar condensados tipo cigarro (se a dinâmica do condensado estiver confinada na direção axial e o campo forte for aplicado na direção radial) e condensados tipo disco (se a dinâmica estiver confinada na direção radial e o campo forte for aplicado na direção axial), razão pela qual nos dois últimos capítulos da dissertação estão orientados a reduzir dimensionalmente a GP e DF para uma e duas dimensões.

Desta forma o trabalho esta distribuído como segue: Nos primeiro capítulos estudaremos os BEC por meio da equação GP e mostraremos algumas características desta equação. O segundo capítulo estará dedicado ao estudo do superfluido de Fermi por meio da equação DF. Mostraremos como derivar a equação de DF e algumas características desta nos limites BCS e unitário. Os capítulos 4 e 5 estarão dedicados a mostrar o método de redução dimensional das equações de GP e DF assim como mostraremos como solucionar estas nos limites de Thomas-Fermi e de acoplamento fraco.

2 *Condensados de Bose-Einstein*

Neste capítulo da dissertação estudaremos a equação de Gross-Pitaevskii (GP) a qual descreve o condensado de Bose-Einstein (BEC) na presença de uma armadilha criada por um campo magnético externo. Na presença do potencial confinante o gás de bósons é altamente diluído e este fato é usado para aproximar o termo de interação entre pares de partículas. O capítulo está distribuído como segue: a primeira parte introduz o parâmetro de ordem e o porque do potencial químico e não a energia estar presente na equação de GP quando tratamos estados estacionários. A dedução da equação de GP usando a aproximação de Bogoliubov é deixada para o apêndice (c) e vamos discutir as principais características físicas do sistema e só comentaremos generalidades da conta; A solução analítica da equação GP é feita para diferentes limites (limite de Thomas-Fermi e limite de acoplamento fraco) e algumas das características mais importantes da equação nesses limites serão discutidas. Finalmente discutiremos a invariância de Galileo da equação de GP em termos do parâmetro de ordem e como este muda dependendo do referencial usado. Todo este capítulo é uma introdução para o capítulo 2, no qual vamos usar os mesmos métodos utilizados para estudar a equação de GP no estudo da equação para descrever o superfluido de Fermi, conhecida como equação de funcional densidade (DF) [9].

2.1 **Parâmetro de Ordem**

Nesta seção discutiremos as consequências físicas da aproximação de Bogoliubov para apresentar a razão de escrever a equação de GP para estados estacionários em termos do potencial químico e não em termos da energia, como seria usual na equação de Schrödinger. Desta forma, usaremos a aproximação de Bogoliubov para o operador de campo bosônico e o expandiremos este em termos de variáveis clássicas, neste caso funções de onda do estado de partícula única. Esta aproximação está respaldada fisicamente pelo fato de existir uma macro ocupação de um dos estados de partícula única do sistema. O nosso for-

malismo e trabalhado a temperatura zero ($T = 0$) onde consideramos que todas as partículas se encontram no estado condensado. O parâmetro de ordem pode ser escrito (apêndice A) da forma [1]

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_i \varphi_i(\vec{r}) \hat{a}_i = \varphi_0(\vec{r}) \hat{a}_0 + \sum_{i \neq 0} \varphi_i(\vec{r}) \hat{a}_i, \quad (2.1)$$

onde \hat{a}_i (\hat{a}_j^\dagger) são os operadores de aniquilação (criação) de uma partícula no estado φ_i . Aqui temos separado a componente condensada ($i = 0$) das outras partes do sistema as quais não contribuem na $T = 0$. Os operadores de criação e aniquilação cumprem as relações de comutação [1]

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] &= \delta_{ij}, \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j] &= 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

As relações de comutação dos operadores são da ordem um ou zero, mais se é calculado seu valor esperado no estado de condensação, no qual consideramos que o número de partículas é muito grande, vemos que o seu valor esperado é de ordem N_0 (N_0 e o número total de partículas no estado condensado). Desta forma, a aproximação de Bogoliubov [1] consiste em substituir os operadores \hat{a}_0 e \hat{a}_0^\dagger pela raiz do número de partículas no estado condensado $\sqrt{N_0}$ sempre que $N_0 = \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle \gg 1$ no estado condensado. Com esta aproximação poderemos escrever o operador bosônico (2.1) na forma [1,2,4]

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}) + \delta\hat{\Psi}(\vec{r}), \quad (2.3)$$

onde temos definido $\Psi_0 = \sqrt{N_0} \varphi_0^*$ e $\delta\hat{\Psi} = \sum_{i \neq 0} \hat{\varphi}_i(\vec{r}) \hat{a}_i$. conforme apresentamos anteriormente podemos fazer zero os termos diferentes ao estado condensado $\delta\hat{\Psi}$, assim o operador de campo coincide com a função de onda clássica Ψ_0 e podemos descrever o nosso sistema agora em termos da função de onda do estado de partícula única [1,2,3,4,7]. A separação (2.3) é particularmente útil no caso de gases diluídos porque poderemos obter uma equação que descreve o comportamento de Ψ_0 e a sua validade esta garantida pela macro ocupação do estado de partícula única ($N_0 \gg 1$) [7]. A função Ψ_0 é chamada de função de onda do condensado e cumpre o papel de parâmetro de ordem[†][1,2,3,4,7]. Esta

* $\hat{\Psi}(\vec{r})$ aparte da normalização é a função de onda do estado de partícula única do estado no qual ocorre a condensação.

[†]O parâmetro de ordem é a quantidade que caracteriza a transição de fase. Isto significa que o parâmetro de ordem é zero em uma fase e diferente de zero na outra fase, neste caso a fase condensada.

quantidade esta caracterizada por um módulo $|\Psi_0(\vec{r})|$ e uma fase $S(\vec{r})$ [1,2,7]

$$\Psi_0(\vec{r}) = |\Psi_0(\vec{r})| \exp[iS(\vec{r})], \quad (2.4)$$

o módulo determina a contribuição da parte condensada à densidade total e a fase $S(\vec{r})$ é um parâmetro importante no fenômeno da superfluidez como veremos quando apresentarmos a equivalência entre a equação de GP e as equações da hidrodinâmica. A aproximação de Bogoliubov (2.3) para o operador de campo pode ser entendida mostrando que o valor esperado $\langle \hat{\Psi} \rangle$ é diferente de zero. Isso não seria possível se o estado da direita tivesse o mesmo número de partículas que o estado da esquerda. Do ponto de vista físico, isso significa que o condensado equivale a um reservatório, sempre que $N_0 \gg 1$, assim, adicionar uma partícula no condensado não muda as propriedades físicas do sistema. Desse modo os estados [1]

$$\begin{aligned} |N\rangle &\rightarrow N, \\ |N+1\rangle &\propto \hat{a}^\dagger |N\rangle, \\ |N-1\rangle &\propto \hat{a} |N\rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

são fisicamente equivalentes. Concluindo, pode-se escrever $\Psi_0 = \langle \hat{\Psi} \rangle$ e $\Psi_0^* = \langle \hat{\Psi}^\dagger \rangle$. Agora mostraremos porque o potencial químico é o valor próprio do parâmetro de ordem na equação de GP para estados estacionários e não a energia. Para isso, vamos usar o fato de que $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ para estados estacionários pode ser escrito da forma $\exp[-iEt/\hbar] |N\rangle$ e usando $\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = \Psi_0$ [1]

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle &= \langle N-1 | \exp[iH(N-1)t/\hbar] \hat{\Psi} \exp[-iH(N)t/\hbar] |N\rangle \\ &= \Psi_0(\vec{r}) \exp\left[\frac{iE(N-1) - iE(N)}{\hbar} t\right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde podemos usar a conhecida relação $\mu = E(N) - E(N-1) \sim \partial E / \partial N$ para obter finalmente temos a relação do parâmetro de ordem para estados estacionários do condensado [1,2,4,7]

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = \Psi_0(\vec{r}) \exp\left[-\frac{i\mu t}{\hbar}\right] \quad (2.7)$$

onde μ é o potencial químico. é interessante reafirmar que a evolução temporal do parâmetro de ordem não esta governada pela energia, como acontece na equação linear de Schrödinger, mas sim esta governada pelo potencial químico, que resulta ser uma quantidade muito importante na fisica dos BEC. Como mostraremos mais adiante, na ausência do termo de interação a expressão da energia e do potencial químico são as mesmas.

2.2 Equação de Gross-Pitaevskii

Nesta tópicos usaremos a aproximação de Bogoliubov e o fato que dentro do condensado só as interações entre dois corpos a baixas energias são relevantes [1], para mostrar como pode ser derivada a equação de GP, as contas detalhadas encontram-se no apêndice C. Consideremos um sistema de N bósons idênticos (dentro do nosso trabalho não consideraremos partículas com espin [1,4,7]) caracterizados pela coordenada espacial \vec{r} , e a interação entre partículas $V(\vec{r}' - \vec{r})$. A aproximação de Bogoliubov implica (a temperaturas muito baixas) que poderemos substituir o operador $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ com a função de onda clássica $\Psi_0(\vec{r}, t)$ [1]. Neste caso a presença de um grande número de partículas em um só estado (estado condensado) permite a introdução da função clássica $\Psi_0(\vec{r}, t)$. Com o fim de estabelecer a equação que descreve o BEC, usaremos a equação de Heisenberg para o campo $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ [1]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}], \quad (2.8)$$

onde \hat{H} é o Hamiltoniano aproximado do sistema [1,2]

$$\hat{H} = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla \hat{\Psi} \right) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^{\dagger'} V(\vec{r}') \hat{\Psi} \hat{\Psi}' d\vec{r}' d\vec{r}, \quad (2.9)$$

aqui $\hat{\Psi} \equiv \hat{\Psi}(\vec{r}, t)$, $\hat{\Psi}^\dagger \equiv \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t)$, $\hat{\Psi}' \equiv \hat{\Psi}(\vec{r}', t)$, $\hat{\Psi}^{\dagger'} \equiv \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t)$, $\hat{\Psi}'' \equiv \hat{\Psi}(\vec{r}'', t)$, $\hat{\Psi}^{\dagger''} \equiv \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}'', t)$. O primeiro termo em \hat{H} é a energia cinética do sistema, o segundo termo é a energia de interação entre partículas que é dada por o potencial de interação de dois corpos $V(\vec{r}' - \vec{r})$ [2,7]. A equação de GP é derivada usando as relações de comutação

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r}' - \vec{r}), \quad (2.10)$$

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}(\vec{r}')] = 0, \quad (2.11)$$

e o fato que o campo tem que comutar com o potencial de interação. A diluição do gás na armadilha permite aproximar o potencial real de interação entre partículas pelo potencial de contato (apêndice B)[1,2,3,4,7]

$$V(\vec{r}' - \vec{r}) = V_{\text{eff}} = g\delta(\vec{r}' - \vec{r}), \quad (2.12)$$

onde temos $g = 4\pi\hbar^2/2m$. Resumindo, em um gás de bósons diluído em temperaturas baixas só as colisões entre pares de partículas são relevantes e estas colisões estão caracterizadas por o comprimento de espalhamento da onda s [7]. Usando a aproximação de Bogoliubov para o campo e as condições anteriores

dentro da Eq. (2.9) teremos [1,2,3,4,7]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi_0(\vec{r}, t), \quad (2.13)$$

que é a conhecida equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo. A equação de GP descreve as propriedades na temperatura zero de um gás de bósons interajente quando o comprimento de espalhamento a é menor que o espaçamento meio entre as partículas. O signo de a define o tipo de interação, se a for positiva a interação é repulsiva e pode-se visualizar como o raio de um potencial tipo esfera rígida [7]. Se a for negativa a interação é atrativa e a estabilidade do sistema depende do número de partículas [10]. O comprimento de espalhamento é uma quantidade fundamental que determina a formação do condensado, i.e. se a interação interatômica é muito repulsiva a tendência para a condensação é maior. Os efeitos da interação no BEC estão descritos pelo termo não linear na equação de GP, este termo pode ser entendido como o resultado da interação de uma partícula com as demais numa aproximação de campo meio (Mean Field Theory)(apêndice C). Esta aproximação nos permite escrever a função de onda total do sistema como um produto simetrizado de funções de onda de uma partícula no estado fundamental [1,2,4,11]. Em conclusão a aproximação de campo meio nos permite escrever a energia de interação como [7]

$$\langle E_{\text{int}} \rangle = g \sum_{i,j} |\Psi_0(\vec{r} \rightarrow 0)|^2, \quad (2.14)$$

que é a energia de interação média do sistema de muitas partículas[7]. A primeira e talvez mais importante aproximação dentro da teoria de campo meio é que os estados internos dos átomos são ignorados [7]. Outra característica é que as colisões entre partículas não mudam estes estados internos dos átomos. O que significa que todas as colisões consideradas no sistema são elásticas. O potencial de interação real entre átomos é complexo. Porém esta complexidade é manifesta só quando os átomos estão próximos [1,2]. Na armadilha as temperaturas baixas e as condições de densidade ($a \ll n^{-1/3}$) fazem com que os eventos de espalhamento ocorram em energias baixas[1]. Então os átomos não estarão próximos uns aos outros, assim a interação entre átomos estará caracterizada pelo comprimento de espalhamento da onda s , o que nos permite escrever o potencial de interação na forma (2.12) [1,2,4,7]. O potencial confinante V_{ext} é comumente uma armadilha harmônica e muitas vezes tem um eixo de simetria de forma, que em um potencial tridimensional duas das frequências são iguais. A forma do potencial vai repercutir na forma do condensado como veremos adiante. Aqui iremos considerar potenciais com simetria cilíndrica por razões que

serão claras nos capítulos 3 e 4.

Se a temperatura do sistema é suficientemente baixa $T \rightarrow 0$ poderemos ignorar os efeitos de depleção quânticos e térmicos dentro do condensado [1], assim o parâmetro de ordem na temperatura zero coincide com o número total de partículas no sistema [1,2]

$$N = \int |\Psi_0|^2 d\vec{r}, \quad (2.15)$$

isto implica que a densidade total do condensado coincide com a densidade total do gás[1,2]

$$n(\vec{r}) = |\Psi_0(\vec{r})|^2. \quad (2.16)$$

A condição de normalização para a função de onda do condensado pode ser escrita como $\int n(\vec{r})d\vec{r} = 1$. Sempre que a função de onda do estado de partícula única esteja normalizado a 1, o parâmetro de ordem estará normalizado ao número total de partículas N como mostra a Eq.(2.15) [4].

Outra forma diferente de derivar a equação de GP é usando a condição de fase estacionária [2]

$$\delta \left[-i\hbar \int \Psi_0^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0 d\vec{r} dt + \int E dt \right] = 0, \quad (2.17)$$

onde E é a energia do sistema. A condição de fase estacionária leva a equação

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\vec{r}, t) = \frac{\delta E}{\delta \Psi_0^*(\vec{r}, t)}, \quad (2.18)$$

onde

$$E = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi_0|^2 + V_{ext}(\vec{r}) |\Psi_0|^2 + \frac{g}{2} |\Psi_0|^4 \right) d\vec{r}. \quad (2.19)$$

Esta relação para a energia será particularmente útil quando estabelecermos a equação que governa a dinâmica dos condensados fermiônicos. O fator 1/2 na frente do termo de interação garante que sob variações de Ψ^* a energia seja mínima e o termo não linear seja o mesmo que na equação de GP. Este fator de 1/2 estabelece uma notável diferença entre a energia e o potencial químico como será percebido quando discutirmos os estados estacionários do BEC.

A equação de GP pode ser derivada também usando a densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}_0 = \frac{i\hbar}{2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 - \frac{g}{2} |\Psi|^4 - V |\Psi|^2. \quad (2.20)$$

e as equações de Euler-Lagrange[3]

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\Psi}^*} + \nabla \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial (\nabla \Psi^*)} = \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \Psi^*}. \quad (2.21)$$

O uso da Lagrangiana (2.20) e a introdução do momento canônico e o momento canônico conjugado para as variáveis Ψ^* e Ψ [3]

$$P_\Psi = \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \Psi_t} = \frac{i\hbar}{2} \Psi^*, \quad (2.22)$$

$$P_{\Psi^*} = \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \Psi_t^*} = -\frac{i\hbar}{2} \Psi, \quad (2.23)$$

nos levará à densidade Hamiltoniana da forma

$$\begin{aligned} H &= p_\Psi \frac{\partial \Psi}{\partial t} + p_{\Psi^*} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \mathcal{L}_0 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 + g |\Psi|^3 + V_{\text{ext}} |\Psi|, \end{aligned} \quad (2.24)$$

integrando sob as coordenadas espaciais teremos a expressão da energia

$$E = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi_0|^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) |\Psi_0|^2 + \frac{g}{2} |\Psi_0|^4 \right) d\vec{r},$$

onde a interpretação de cada termo da energia é claro. O primeiro termo corresponde a energia cinética e usualmente é chamado termo de pressão quântica

$$E_{\text{kin}} = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi_0|^2 \right) d\vec{r}, \quad (2.25)$$

este termo desaparece para sistemas uniformes e a sua contribuição na energia total do sistema é menos importante no limite de Thomas-Fermi [1,2,4]. O segundo termo é a contribuição da energia do oscilador harmônico

$$E_{\text{ho}} = \int n(\vec{r}) V_{\text{ext}}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (2.26)$$

O terceiro termo é a energia devida a interação entre dois corpos [1,2]

$$E_{\text{int}} = \frac{g}{2} \int n^2(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (2.27)$$

Todas as formas mostradas para derivar a equação GP serão usadas no seguinte capítulo para estabelecer a equação que descreve os condensados superfluidos fermiônicos DF. A Eq. (2.20) também será usada para solucionar analiticamente a equação GP com uma técnica conhecida como aproximação variacional, a qual consiste basicamente em usar a Lagrangiana efetiva para calcular valores das diferentes quantidades que caracterizam o BEC usando as equações de Euler-Lagrange (2.21). Esta técnica variacional [4] também pode ser usada na solução da equação de GP dependente do tempo.

2.3 Leis de conservação

Agora queremos discutir algumas das quantidades conservadas pela equação de GP como são a energia e o número total de partículas do condensado. Usaremos a conservação do fluxo dentro do condensado para estabelecer uma relação entre o BEC com o fenômeno da superfluidez por meio do uso da fase do parâmetro de ordem e mostraremos que a equação GP é totalmente equivalente as equações da hidrodinâmica. O objetivo de mostrar esta equivalência será entender como essa relação entre o BEC e a superfluidez pode ser usada analogamente para garantir a validade da equação não linear que descreve os superfluidos fermiônicos a qual será também equivalente as equações da hidrodinâmica, desta vês com alguns fatores diferentes devido a física que descreve o fenômeno da superfluides fermiônica.

A equação de GP garante a conservação do número total de partículas $N = \int n(\vec{r}, t) d\vec{r}$ dentro do condensado, isso pode ser mostrado se conseguirmos mostrar que a GPE cumpre uma equação de continuidade. Para tal temos que multiplicar a equação de GP por Ψ_0^* , calcular o complexo conjugado da equação de GP e multiplicar-la por Ψ_0 e subtrair as duas equações resultantes. Assim teremos o resultado [1,4]

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi_0|^2 = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi_0^* \nabla \Psi_0 - \Psi_0 \nabla \Psi_0^*), \quad (2.28)$$

o qual se pode reescrever usando $n(\vec{r}, t) = |\Psi_0(\vec{r})|^2$ na forma da equação da continuidade

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0, \quad (2.29)$$

onde temos definido a densidade de corrente j

$$j = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi_0^* \nabla \Psi_0 - \Psi_0 \nabla \Psi_0^*). \quad (2.30)$$

Que a equação de GP cumpra uma equação de continuidade garante conservação do número total de partículas dentro do condensado $dN/dt = 0$.

Agora mostraremos como estabelecer uma relação entre o BEC e a superfluidez. Usando a Eq. (2.30) e definindo o parâmetro de ordem como [1,2,4,7]

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = \sqrt{n(\vec{r}, t)} \exp[iS(\vec{r}, t)], \quad (2.31)$$

podemos derivar uma equação que descreva a dinâmica da fase $S(\vec{r}, t)$ e relacionar a superfluidez com o BEC[5]. O uso da Eq. (2.31) dentro da Eq. (2.30)

tem como resultado

$$\begin{aligned}
 j &= -\frac{i\hbar}{2m}\Psi_0^* \left(\frac{\exp[iS]}{2n^{1/2}}\nabla n + \sqrt{\bar{n}}i\nabla S \right) + \Psi_0 \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\exp[iS]}{2n^{1/2}}\nabla n - \sqrt{\bar{n}}i\nabla S \right), \\
 &= -\frac{i\hbar}{2m}\sqrt{\bar{n}}\exp[-iS] \left(\frac{\exp[iS]}{2n^{1/2}}\nabla n + \sqrt{\bar{n}}i\nabla S \exp[iS] \right) \\
 &\quad + \sqrt{\bar{n}}\exp[iS] \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\exp[-iS]}{2n^{1/2}}\nabla n - \sqrt{\bar{n}}i\nabla S \exp[-iS] \right),
 \end{aligned}$$

fazendo uma álgebra simples encontramos que a densidade de corrente esta definida como

$$j = \frac{\hbar}{m}n(\vec{r}, t)\nabla S(\vec{r}, t) = n(\vec{r}, t)v_s, \quad (2.32)$$

onde a fase $S(x, t)$ define o vetor [1,2,4]

$$v_s = \frac{\hbar}{m}\nabla S(\vec{r}, t), \quad (2.33)$$

que pode ser interpretada como a velocidade do fluxo condensado. A identificação da velocidade do superfluido v_s com a fase do parâmetro de ordem S representa a relação procurada, que estabelece a relação entre o BEC e o fenômeno da superfluidade (apêndice E) [1]. Embora tenha sido mostrado que existe uma relação direta entre a superfluidade e BEC existem algumas diferenças que devem ser esclarecidas. 1) O BEC é confinado por um potencial externo, então a sua densidade não é homogênea, assim o BEC não pode ser bem descrito por uma função de onda espacialmente uniforme como ocorre no caso do líquido ^4He [8]. 2) Os BEC alcalinos são intrinsecamente metastáveis[4]. O equilíbrio do estado do sistema alcalino confinado, nas temperaturas da ordem dos micro Kelvin, é um sólido. Porém, o tempo de recombinação do gás é longo no limite diluído (experimentalmente é da ordem dos segundos).

Agora mostraremos que a equação de GP é totalmente equivalente as equações da hidrodinâmica. Usaremos o parâmetro de ordem $\Psi_0(\vec{r}, t) = \sqrt{n(\vec{r}, t)}\exp[iS(\vec{r}, t)]$ dentro da equação de GP. As equações da hidrodinâmica serão a equação de continuidade e a equação que descreve a evolução temporal da fase $S(\vec{r}, t)$. A equação para a fase contara com um termo chamado pressão quântica, este termo não aparece nas equações quando o número de partículas $N \rightarrow \infty$, num regime conhecido como limite de Thomas-Fermi. Introduzindo a Eq.(2.31) na equação de GP encontramos a equação da continuidade e da densidade de corrente (apêndice D)

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla j = 0, \quad (2.34)$$

$$\hbar \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n(\vec{r}, t)}} \left[\left(\nabla^2 \sqrt{n(\vec{r}, t)} \right) - \sqrt{n} (\nabla S(\vec{r}, t))^2 \right] - [V_{\text{ext}}(\vec{r}) + gn(\vec{r}, t)], \quad (2.35)$$

que pode ser escrita como

$$m \frac{\partial v_s}{\partial t} + \nabla \left[-\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n(\vec{r}, t)}} \left(\nabla^2 \sqrt{n(\vec{r}, t)} \right) + \frac{1}{2} m v_s^2 + gn(\vec{r}, t) + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \right] = 0, \quad (2.36)$$

onde o termo proporcional a \hbar é o termo de pressão quântica, que não está presente nas equações clássicas. A equação (2.36) estabelece a natureza irrotacional ($\nabla \times v_s = 0$) do movimento do superfluido. Assim, temos mostrado como a equação da continuidade (2.34) e a equação (2.36) que descreve a fase do parâmetro de ordem são totalmente equivalentes com a equação de GP [1,2,5].

2.4 Estados estacionários da equação de Gross-Pitaevskii

A equação de GP tem uma forma simples no caso de soluções estacionárias para o parâmetro de ordem, isso é quando o parâmetro de ordem evolui com o tempo de acordo a [1,2]

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = \Psi_0(\vec{r}) \exp\left[-\frac{i\mu t}{\hbar}\right], \quad (2.37)$$

o uso da Eq. (2.37) na equação de GP dependente do tempo terá como resultado

$$\mu \Psi_0(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r})|^2 \right] \Psi_0(\vec{r}), \quad (2.38)$$

onde como sabemos, $\mu = \partial E / \partial N$ é o potencial químico, $g = 4\pi\hbar^2 a / 2m$ é o termo de interação de dois corpos e V_{ext} é o potencial externo independente do tempo. O potencial químico é calculado na equação

$$\mu = \int d\vec{r} \Psi_0^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2) + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r})|^2 \right] \Psi_0(\vec{r}), \quad (2.39)$$

o potencial químico (2.39) e a energia (2.19) tem o mesmo valor na ausência de interações entre partículas. Como foi falado, a diferença entre o potencial químico e a energia é o fator 1/2 que multiplica o termo de interação na expressão da energia. A expressão (2.39) para o potencial químico pode ser escrita em termos das energias do sistema $E_{\text{kin}}, E_{\text{ho}}$ e E_{int} como

$$\mu = \frac{1}{N} (E_{\text{kin}} + E_{\text{ho}} + 2E_{\text{int}}) \quad (2.40)$$

onde usamos a condição de normalização para o parâmetro de ordem $\int |\Psi_0(\vec{r})|^2 d\vec{r} = N$. Outra importante relação pode ser encontrada usando o teorema do virial [2]. Usando a transformação de escala $\Psi_0(x, y, z) \rightarrow \lambda^{1/2} \psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)$ e impondo que a

variação da energia na primeira ordem em λ seja zero $\partial E/\partial\lambda|_{\lambda=1} = 0$, encontramos a relação entre as energias cinética, potencial e de interação em uma das direções espaciais

$$(E_{\text{kin}})_x + \frac{1}{2}E_{\text{int}} = (E_{\text{ho}})_x$$

. Expressões análogas são encontradas nas direções espaciais y e z , pelo qual, somando nas três direções encontramos a relação geral

$$2E_{\text{kin}} + 3E_{\text{int}} = 2E_{\text{ho}}, \quad (2.41)$$

que é conhecida como o teorema do virial. Podemos definir a energia de liberação [2]

$$E_{\text{rel}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{int}} \quad (2.42)$$

a qual depende fortemente no número total de partículas no condensado devido a presença do termo de interação.

2.4.1 Limite de Thomas-Fermi

Vamos mostrar nessa seção quais são as possíveis soluções analíticas para a equação de GP dependendo basicamente da intensidade da interação entre partículas. O limite de Thomas-Fermi é estabelecido usando o fato de que a interação entre partículas é grande o suficiente para não considerar a contribuição da energia cinética na energia total [2,7]. O segundo limite é devido a que a interação entre as partículas é suficientemente pequena $a \rightarrow 0$ e a solução da equação de GP pode ser considerada como aproximadamente Gaussiana. Este limite é conhecido como o limite de acoplamento fraco. Nesta seção discutiremos o limite de Thomas-Fermi [12,13]. Se assumirmos que a densidade do gás varia suficientemente devagar e que o número de átomos no condensado é suficientemente grande $aN \rightarrow \infty$ o termo da energia cinética (proporcional a \hbar^2) pode ser desprezado na Eq.(2.39), que terá a forma

$$\mu\Psi_0(\vec{r}) = \left[V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g|\Psi_0(\vec{r})|^2 \right] \Psi_0(\vec{r}), \quad (2.43)$$

e o potencial químico μ agora toma a forma

$$\mu = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g|\Psi_0(\vec{r})|^2, \quad (2.44)$$

esta é uma condição de equilíbrio local $\mu = g|\Psi_0(\vec{r})|^2$ na ausência do potencial externo $V_{\text{ext}}(\vec{r})$. Da Eq. (2.44) podemos encontrar uma expressão para a função

de onda nesse limite

$$n(\vec{r}) = |\Psi_0(\vec{r})|^2 = \frac{\mu - V_{\text{ext}}(\vec{r})}{g}. \quad (2.45)$$

Esta equação tem solução positiva $\Psi_0(\vec{r}) \geq 0$ na região onde o potencial químico varia de zero a μ e a forma da solução depende da forma do potencial, enquanto é zero $\Psi_0(\vec{r}) = 0$ fora desta região [1,6,7]. Este procedimento estabelece um limite para o tamanho do condensado $\mu = V_{\text{ext}}(\vec{r})$. O valor do potencial químico na Eq. (2.45) é fixo impondo a condição de normalização no parâmetro de ordem

$$N = \int |\Psi_0(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int \frac{\mu - V_{\text{ext}}(\vec{r})}{g} d\vec{r}, \quad (2.46)$$

resolvendo a integral para um potencial externo com simetria cilíndrica encontramos o valor do potencial químico no limite de Thomas-Fermi

$$\mu = \left[\frac{15 \hbar^2 N a}{2 m} \right]^{2/5}. \quad (2.47)$$

Integrando a relação termodinâmica $\mu = \partial E / \partial N$ podemos também encontrar o valor da energia por partícula

$$\frac{E}{N} = \frac{5}{7} \mu. \quad (2.48)$$

é interessante notar como a presença das interações na nossa teoria modifica a forma da solução Gaussiana para um sistema de bósons não interagentes. O sinal do comprimento de espalhamento cumpre um papel fundamental na forma do parâmetro de ordem, dependendo se for uma interação repulsiva ou atrativa. Se a interação for repulsiva a densidade central da solução do condensado é menor que a densidade central para a solução Gaussiana. Se a interação for atrativa a densidade central da solução para o condensado é maior que a densidade central para a solução Gaussiana. Em consequência o raio do condensado aumenta ou diminui dependendo do tipo de interação (retirado de [7])

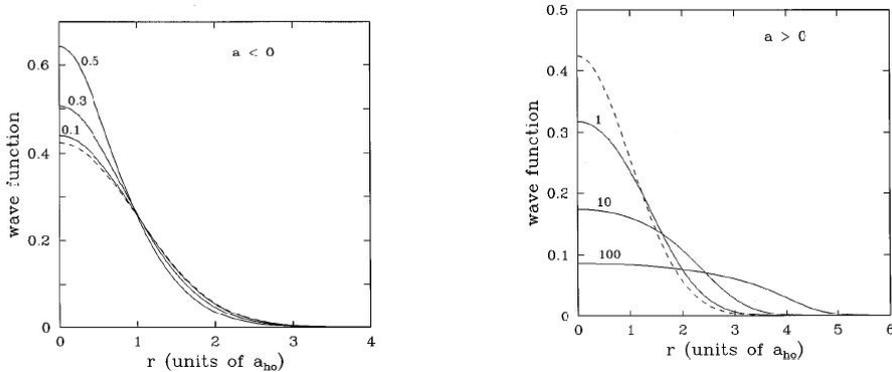


Figura 3: Função de onda do condensado na $T=0$ para interações repulsivas $a>0$ e interações atrativas $a<0$ em termos do número de partículas N .

2.4.2 Solução variacional da equação de Gross-Pitaevskii

O segundo limite no qual podemos solucionar analiticamente a equação de GP é o limite de acoplamento fraco. Neste limite a interação não contribui de forma significativa para a energia total do condensado ($Na \rightarrow 0$). Devido a esta consideração a solução da equação de GP é aproximadamente uma função Gaussiana da forma [2,4,7]

$$\phi_0(\vec{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4}(a_1 a_2 a_3)^{1/2}} \exp \left[-\frac{x^2}{2a_1^2} - \frac{y^2}{2a_2^2} - \frac{z^2}{2a_3^2} \right], \quad (2.49)$$

onde $\phi_0(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r})/N^{1/2}$ é a função de onda de partícula única e as $a_i (i = 1, 2, 3) = \hbar/mw_i$ são as longitudes do oscilador. Neste caso então, a distribuição da densidade $n(\vec{r}) = |\Psi_0(\vec{r})|^2 = N \phi_0^2(\vec{r})$ é uma Gaussiana. Como foi mostrado na seção anterior a introdução da interação na nossa teoria modifica o tamanho do condensado, por esta razão não podemos continuar usando os parâmetros a_i . Com esta restrição, adotamos uma função de onda prova $\psi(\vec{r})$ com a mesma forma de (2.49)

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4}(b_1 b_2 b_3)^{1/2}} \exp \left[-\frac{x^2}{2b_1^2} - \frac{y^2}{2b_2^2} - \frac{z^2}{2b_3^2} \right], \quad (2.50)$$

aqui os parâmetros $b_i (i = 1, 2, 3)$ são os parâmetros variacionais. A essência da aproximação variacional esta na vantagem que da o fato de o termo não linear ser aproximadamente zero. Assim com a solução (2.50) podemos calcular a energia total (2.19), potencial químico (2.39) e os parâmetros variacionais b_i que serão calculados usando a expressão para a Lagrangiana efetiva (2.19) nas equações de Euler-Lagrange. A energia (2.19) com o uso de (2.50) toma a forma

$$E = N \sum_i \hbar^2 w_i \left[\frac{a_i^2}{4b_i^2} + \frac{b_i^2}{4a_i^2} \right] + \frac{gN^2}{2(2\pi)^{3/2} b_1 b_2 b_3}. \quad (2.51)$$

Usando a relação já encontrada $\mu = \frac{1}{N} (E_{\text{kin}} + E_{\text{ho}} + 2E_{\text{int}})$ o potencial químico toma a forma

$$\mu = \sum_i \hbar^2 w_i \left[\frac{a_i^2}{4b_i^2} + \frac{b_i^2}{4a_i^2} \right] + \frac{gN}{(2\pi)^{3/2} b_1 b_2 b_3}. \quad (2.52)$$

Estes valores foram calculados usando a função Gamma para resolver as integrais, as quais são basicamente integrais Gaussianas. Os parâmetros variacionais b_i tem que ser calculados usando as equações de Euler-Lagrange (2.21) para cada parâmetro a_i, b_i e a Lagrangiana efetiva $L_{\text{eff}} = \int L d\vec{r}$ onde L e a Lagrangiana (2.20).

É interessante relembrar que toda a teoria desenvolvida nesse capítulo foi feita sob a consideração de $T = 0$ conseqüentemente a densidade total do gás coincide com a densidade total superfluida $n = n_s$ e não se tem a componente

normal. Devemos ter especial atenção com dois pontos: primeiro a relação existente entre a equação de GP e as equações da hidrodinâmica, e segundo a massa que está presente no termo de energia cinética da GP, isso porque no próximo capítulo esse termo de massa será fundamental na descrição dos condensados fermiônicos, os quais sofrem uma transição de fase do estado normal ao estado superfluido devido a presença dos pares de Cooper, e então a entidade fundamental que domina essa transição não será um só átomo, será então um par de átomos, assim esperamos que todas as relações nas quais está envolvida a massa, mudem. Esta será a principal diferença na descrição dos condensados bosônicos e os superfluidos fermiônicos.

Referências

- [1] L. Pitaevskii, S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. Oxford Science Publications (2003).
- [2] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, S. Stringari. *Rev. Mod. Phys.* 71, 463. (1999).
- [3] T. Dauxois, M. Peyrard. *Physics of solitons*. Cambridge University Press. (2006).
- [4] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, P. Zoller. *Phys. Rev. A* 56, (1997).
- [5] A. J. Leggett. *Rev. Mod. Phys.* 75, (2003).
- [6] G. Bayman, C. Pethick. *Phys. Rev. Lett.*, 76, 6. (1996).
- [7] C.J. Pethick, H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute gases*. Cambridge University Press. (2002)
- [8] J. F. Annet. *Superconductivity, Superfluids and Condensates*. Oxford Master Series in Condensed Matter Physics. (2004).
- [9] S. K. Adhikari and L. Salasnich. *Phys. Rev. A* 78, 043616 (2008).
- [10] S. K. Adhikari. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 38 (2005).
- [11] A.F.R de Toledo Piza. *Mecânica Quântica*. Editorial USP.
- [12] M. Edwards and K. Burnett. *Phys. Rev. A* 51, 1382. (1995).
- [13] G. Baym and C. Pethick. *Phys. Rev. Lett.* 76, 6. (1996).

3 *Gás de Fermi Superfluido*

O capítulo anterior constituiu uma revisão dos conceitos da condensação de Bose-Einstein (BEC) usando a equação de Gross-Pitaevskii (GP) e foi o embasamento para a apresentação deste capítulo. Numa completa analogia com a teoria do BEC estudaremos as propriedades mais importantes do superfluido de Fermi e mostraremos como estabelecer uma equação não linear equivalente as equações da hidrodinâmica para férmions chamada equação de densidade funcional (DF). O capítulo começa com um estudo estatístico de um gás inhomogêneo usando a aproximação de que o gás se comporta localmente como um gás ideal, a qual nos levará diretamente a introdução da equação DF para o superfluido de Fermi. Estudaremos os limites conhecidos para o superfluido de Fermi nos quais poderemos ter resultados analíticos; esses limites estão definidos em termos do valor da comprimento de espalhamento a . Como no caso do BEC, a dimensão da interação entre partículas ($a \rightarrow 0$ ou $a \rightarrow \infty$) define esses limites conhecidos como limite BCS (Bardeen, Cooper, e Schrieffer) e limite unitário. Como veremos o limite BCS e o limite unitário diferem pelo valor de uma constante no termo não linear, pelo qual poderemos estudar relações gerais válidas para os dois limites.

A diferença com os bósons, o gás de Fermi não interagente não sofre uma transição de fase na temperatura zero. Você poderia pensar que este fato se manteria ainda na presença de interações, pelo menos quando elas são fracas o suficiente. Isto acontece na presença de interações repulsivas e não será tratado aqui [5]. Porém, na presença de interações atrativas a situação muda consideravelmente. Mesmo quando as interações são fracas, os férmions conseguem formar pares e se tornar um superfluido.

É importante ressaltar como são feitos os condensados num gás de Fermi. Existem duas maneiras de fazer estes condensados. A primeira é baseada no fenômeno da condensação de Bose-Einstein de bósons compostos. Neste caso a ressonância de Feshbach [9] é usada para converter os átomos aparelhados em moléculas diatômicas as quais tem um tamanho menor que o tamanho meio

entre partículas. Estas moléculas são bósons e podem sofrer a condensação de Bose-Einstein da mesma forma que átomos bosônicos.

A segunda forma vem de uma analogia da Supercondutividade a baixas temperaturas e confirma a bem provada teoria BCS. Aqui uma interação fraca e atrativa resulta na formação de pares de Cooper. Os pares de Cooper são grandes e não podem ser pensados como partículas individuais já que seu tamanho é maior que a separação média entre férmions. Assim teremos a formação de um superfluido, se os férmions tivessem carga teríamos a formação de Supercondutividade. É notável perceber que a diferença entre o fenômeno de BEC e a superfluides no caso de Férmions sem carga e só que tão firmemente estão ligados os férmions como pares. Além disso temos que ressaltar que no caso dos férmions o mar de Fermi não é superfluido. Para existir superfluides precisamos da formação de pares de Cooper, o que implica uma interação do tipo atrativo entre férmions.

3.1 Gás de Fermi numa armadilha harmônica. Gás inhomogêneo.

Nesta seção usaremos o ensemble grão canônico para derivar uma equação de estado para um gás na presença de um potencial confinante. O cálculo da equação de estado será feito usando a consideração de que o gás se comporta localmente como um gás ideal.

Para o caso de um gás ideal a função de partição no ensemble grande canônico tem a forma [1]

$$Q = \sum_{\{n_j\}} \exp[-\beta \sum_j n_j E_j] = \exp[-\beta g], \quad (3.1)$$

onde $\beta = k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, E_j é a energia do nível j preenchido por o número de partículas n_j e $g = -\ln Q/\beta$. No caso dos férmions numa armadilha harmônica podemos expressar a energia do sistema como a energia usual do ensemble grande canônico mais a energia do potencial externo

$$E_j = \epsilon_j - \mu + V_{\text{ext}}(\vec{r}), \quad (3.2)$$

o potencial harmônico é $V_{\text{ext}}(\vec{r}) = mw_x^2 x^2/2 + mw_y^2 y^2/2 + mw_z^2 z^2/2$, μ é o potencial químico, m a massa de um fermion, w_i a frequência angular nas direções $i = x, y, z$. Como é usual o potencial externo define a simetria do problema, se as três frequências w_i foram diferentes entre elas o potencial será totalmente

antisimétrico, se tiver um eixo de simetria teremos uma simetria cilíndrica, a qual será usada de aqui para frente. Usando o potencial externo $V_{\text{ho}}(\vec{r})$ dentro da função de partição (3.1) teremos

$$Q = \sum_{\{n_j\}} \exp \left[-\beta n_j \sum_j (\epsilon_j - \mu + V_{\text{ext}}(\vec{r})) \right]. \quad (3.3)$$

Os férmions, como é bem sabido, cumprem o princípio de exclusão de Pauli, este princípio impõe uma restrição no número de ocupação deles por estado de energia, assim o número de ocupação é $n = 1, 0$, isto reduz a soma sobre os estados possíveis de ocupação a um produto das funções de partição para cada nível de energia

$$Q = \prod_j (\exp [-\beta (\epsilon_j + V_{\text{ho}}(\vec{r}) - \mu)] + 1). \quad (3.4)$$

Podemos escrever a função de partição Q da forma

$$\begin{aligned} g &= -\frac{1}{\beta} \sum_j \ln (1 + \exp [-\beta (\epsilon_j + V_{\text{ext}}(\vec{r}) - \mu)]) \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int \ln (1 + \exp [-\beta (\epsilon_j + V_{\text{ho}}(\vec{r}) - \mu)]) d^3p, \end{aligned} \quad (3.5)$$

e calcular o valor esperado do número de partículas por nível de energia [1]

$$\langle n_i \rangle = \frac{\partial g}{\partial \epsilon_i} = \frac{1}{1 + \exp [\beta (\epsilon_i + V_{\text{ext}}(\vec{r}) - \mu)]}, \quad (3.6)$$

que é a distribuição de Fermi-Dirac com o termo do potencial externo. O número total de partículas fixa o valor do potencial químico

$$N = \sum_j \langle n_i \rangle = \sum_i \frac{1}{1 + \exp [\beta (\epsilon_i + V_{\text{ext}}(\vec{r}) - \mu)]}. \quad (3.7)$$

No limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V \rightarrow \text{constante}$) podemos mudar a soma sobre estados pela integral sobre o volume de uma esfera [1]

$$\begin{aligned} N &= \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} dp \frac{1}{(1 + \exp [\beta (\epsilon_i + V_{\text{ext}}(\vec{r}) - \mu)])} \\ &= \frac{8\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} p^2 dp \frac{1}{(1 + \exp [\beta (\epsilon_i + V_{\text{ext}}(\vec{r}) - \mu)])}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Para resolver esta integral vamos assumir a condição de que o gás inhomogêneo se comporta localmente como um gás homogêneo, isso significa que o potencial confinante varia mais lentamente que a função de onda tal que o potencial localmente seja quase plano. Usando o fato de que o gás se comportara localmente como um gás ideal, o número total de partícula será

$$N = \frac{8\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \int p^2 dp \frac{1}{(1 + \exp [\beta (\epsilon_i - \mu(\vec{r}))])}, \quad (3.9)$$

onde o potencial químico $\mu(\vec{r}) = \mu - V_{\text{ext}}(\vec{r})$ varia espacialmente. Aqui $\mu(\vec{r})$ é o potencial químico do sistema não uniforme e μ é o potencial químico do sistema uniforme. Com a densidade total de partículas ρ no volume V a $T = 0$ definida como

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_0} p^2 dp = \frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p_0^3}{3}, \quad (3.10)$$

encontraremos a expressão para a energia de Fermi $E_F = k_B T_F$ a qual é modificada pelo potencial confinante $\mu_0 - V_{\text{ext}}(\vec{r})$ e como sabemos é igual a $p_0^2/2m$. Dessa forma teremos

$$\rho = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} (\mu - V_{\text{ext}}(\vec{r}))^{3/2}, \quad (3.11)$$

e o potencial químico estará agora modificado pela presença do potencial harmônico

$$\mu = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2\rho)^{2/3}. \quad (3.12)$$

Este potencial químico na aproximação de TF é o potencial químico de um gás inhomogêneo. A energia de Fermi representa uma escala de energia grande no sistema de muitas partículas devido à presença da densidade e será o termo não linear na equação dos férmions superfluidos. Como um exercício prévio aos dois próximos capítulos o sistema de férmions será confinado em uma armadilha com simetria cilíndrica $V_{\text{ext}}(\rho, z) = (mw_\rho^2\rho^2 + mw_z^2z^2)/2$ com $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$ e calcularemos a densidade linear $n_z(z)$ ao longo de o eixo z [2]

$$\begin{aligned} n_z(z) &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \rho d\rho (\mu - \frac{1}{2}mw_\rho^2\rho^2 - \frac{1}{2}mw_z^2z^2)^{3/2} \\ n_z(z) &= \frac{1}{15\sqrt{2}\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\frac{(2\mu - mw_z^2z^2)^{5/2}}{mw_\rho^2} \right], \end{aligned} \quad (3.13)$$

o limite de integração em ρ é dado por $R = [2(\mu_0 - mw_z^2z^2/2)/mw_\rho^2]^{1/2}$ para manter positiva a densidade linear. Também podemos calcular a densidade radial $n_\rho(\rho)$ ao longo do eixo ρ

$$\begin{aligned} n_\rho(\rho) &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^Z dz (\mu - \frac{1}{2}mw_\rho^2\rho^2 - \frac{1}{2}mw_z^2z^2)^{3/2} \\ n_\rho(\rho) &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left(\frac{4\mu - 2mw_\rho^2\rho^2}{mw_z^2} \right)^{1/2} (2\mu - mw_\rho^2\rho^2)^{3/2}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Os dois exemplos mostrados serão de grande utilidade nos próximos capítulos, nos quais investigaremos como calcular a densidade linear e radial para os condensados bosônicos e fermiônicos usando a equação GP e a equação DF. Um fato interessante de porque estamos usando a simetria cilíndrica é porque experimentalmente podem ser produzidas armadilhas com esta simetria e mediante a aplicação de um campo externo forte (diferente do potencial de confinamento),

podem ser produzidos condensados em 2D e 1D. Por esta razão será importante saber como calcular a contribuição da densidade radial e linear na densidade total.

3.2 Aproximação de Thomas-Fermi para férmions superfluidos

Com o uso da consideração de que um gás na presença de uma armadilha externa podia comportasse localmente como ideal, mostramos na seção anterior como derivar a densidade de um gás na presença de uma armadilha. Agora usaremos essa mesma aproximação com o fim de escrever uma expressão para a energia total do gás em termos da energia por partícula do sistema. Usando variações infinitesimais sobre a expressão da energia encontraremos uma equação no linear para descrever um gás de férmions superfluido.

A primeira expressão a derivar estará dada em termos da aproximação de Thomas-Fermi, na qual só contribui para a energia total o termo da energia de Fermi e a energia potencial devida a armadilha externa. é importante destacar que o termo de interação no superfluido de Fermi é considerado como pequeno (BCS) e pode ser apontado como zero, e só modificar a energia de Fermi por uma constante (regime unitário), como veremos.

A aproximação de TF nos permite escrever a densidade de energia do gás $\epsilon_p(n_p)$ como n vezes a energia por partícula E_p/N_p de um gás uniforme (o sub-índice indica quantidades em termos de pares de partículas)

$$\epsilon_p(n_p) = n_p \frac{E_p}{N_p}. \quad (3.15)$$

Na presença de uma armadilha $V_p(\vec{r})$ as propriedades do condensado fermiônico podem ser descritas pelo funcional de energia [3]

$$E_p = \int \left[\epsilon_p(n_p) + V_p(\vec{r}) |\Psi(\vec{r})|^2 \right] d\vec{r}, \quad (3.16)$$

aqui escrevemos a energia em termos de pares de átomos, não de férmions individuais*. As quantidades em termos de pares estão relacionadas com as quantidades de átomos individuais pelas equações $\mu_p = 2\mu_0$, $V_p(\vec{r}) = 2V(\vec{r})$, $m_p = 2m$, $n_p = n/2$. Os termos na energia (3.16) correspondem a energia de liberação

$$E_{\text{rel}} = \int \epsilon_p(n_p) d\vec{r}, \quad (3.17)$$

*A condensação do gás de Fermi gás implica uma transição de fase para o estado superfluido. Esta transição esta descrita pela teoria BCS.

e a energia do oscilador

$$E_{\text{ho}} = \int V_p(\vec{r}) n_p(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (3.18)$$

Minimizando o funcional de energia (3.16) $\delta(E - \mu N) \delta n(\vec{r}) = \delta(E_p/2 - \mu_p N_p) / \delta 2n_p(\vec{r})$ (onde $N = 2N_p = \int 2n_p(\vec{r}) d\vec{r} = \int n(\vec{r}) d\vec{r}$ † é o número total de partículas), encontramos a equação de Thomas-Fermi para o potencial químico do condensado em termos de pares de átomos

$$\mu_p = \frac{E_p}{2N_p} + V_p(\vec{r}), \quad (3.19)$$

que em termos da densidade de energia pode ser escrito como

$$\mu_p = \mu[n_p(\vec{r})] + V_p(\vec{r}), \quad (3.20)$$

onde $\mu[n_p(\vec{r})] = \frac{\partial \epsilon(n_p)}{\partial n_p} = E_p/N_p = 2(6\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar}{m_p} n_p^{2/3}$ é o "bulk chemical potential" de um gás uniforme determinado pela equação de estado. O μ_p é o potencial químico na aproximação de TF para o gás de férmions em termos das quantidades para pares de átomos. A equação (3.20) então toma a forma

$$\mu_p = 2(6\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar}{m_p} n_p^{2/3} + V_p(\vec{r}). \quad (3.21)$$

Para construir a equação (3.21) temos usado a relação $\mu_p = 2\mu_0$. Este resultado está em concordância com o resultado da referência [3].

Agora, usaremos o termo de energia cinética como uma correção para a aproximação de TF [11] é mostraremos como calcular a DF. Podemos reescrever a Eq. (3.16) como

$$\begin{aligned} E &= \int \left[\frac{\hbar^2}{2m_p} |\nabla \Psi_p(\vec{r})|^2 + V_p(\vec{r}) |\Psi_p(\vec{r})|^2 + \epsilon(n_p) \right] d\vec{r} \\ &= \int \left[\frac{\hbar^2}{2m_p} |\nabla \Psi_p(\vec{r})|^2 + V_p(\vec{r}) |\Psi_p(\vec{r})|^2 + 2(2^{2/3}) \frac{6\chi}{5} \frac{\hbar^2}{m_p} |\Psi_p(\vec{r})|^{10/3} \right] d\vec{r}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

que pode ser escrita para da forma (por simplicidade escreveremos $\Psi_p(\vec{r}) = \Psi(\vec{r})$)

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{4m} |\nabla \Psi(\vec{r})|^2 + 2V(\vec{r}) |\Psi(\vec{r})|^2 + 2^{2/3} \frac{6\chi}{5} \frac{\hbar^2}{m} |\Psi(\vec{r})|^{10/3} \right] d\vec{r}. \quad (3.23)$$

O parâmetro $\varepsilon = 2^{2/3} 6\chi \hbar^2 |\Psi_p(\vec{r})|^{10/3} / 5m_p$ onde temos usado a densidade total de pares definida como $n_p(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2 = n(\vec{r})/2$ onde $\Psi(\vec{r})$ é o parâmetro de ordem. Introduzimos o termo $\chi = (3\pi^2)^{2/3} \xi / 2$ um pouco cedo com o intuito de esclarecer que este termo depende do regime no qual estamos trabalhando (BCS ou unitário), assim as equações para o superfluido de Fermi só mudam de um regime para outro pelo valor da constante ξ . O parâmetro de ordem $\Psi(\vec{r})$ é

†Esta é a condição de normalização para a densidade n a qual fixa o potencial químico do gás na armadilha.

introduzido para descrever o estado superfluido e esta normalizado ao número de pares superfluidos

$$\int d\vec{r} |\Psi(\vec{r})|^2 = N_p = N/2, \quad (3.24)$$

como temos descrito a dinâmica do superfluido de Fermi pode ser apresentada em termos de pares de férmions ou de férmions individuais, é por esta razão que o parâmetro de ordem esta normalizado a o número de pares $N_p = N/2$. É bom esclarecer que de aqui para frente trabalharemos com as equações em termos de Fermions, so por facilidade e concordância com os resultados encontrados em outros trabalhos.

Para encontrarmos o parâmetro de ordem devemos minimizar a energia total Eq.(3.23) $\delta(E - \mu N)/\delta\Psi^*(\vec{r}) = 0$ o que nos permite encontrar a equação DF para fermions superfluidos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 + 2V(\vec{r}) + 2^{2/3} \chi \frac{2\hbar^2}{m} |\Psi(\vec{r})|^{4/3} \right] \Psi(\vec{r}) = 2\mu\Psi(\vec{r}), \quad (3.25)$$

esta equação esta escrita a temperatura zero e tem como termo não linear a energia de Fermi. Em analogia com a equação de GP podemos escrever uma equação geral, não só para estados estacionários do condensado, mais também para estados não estacionários, assim esta terá a forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 + 2V(\vec{r}) + 2^{2/3} \chi \frac{2\hbar^2}{m} |\Psi(\vec{r}, t)|^{4/3} \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.26)$$

Para recuperar a Eq.(3.25) temos que escrever o parâmetro de ordem da forma $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp[-i2\mu t/\hbar]$.

A DF pode também ser derivada da densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}_0 = \frac{i\hbar}{2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) + \frac{\hbar^2}{4m} \Psi^* \nabla^2 \Psi - \frac{6}{5} 2^{2/3} \chi \frac{\hbar^2}{m} |\Psi|^{10/3} - V_p |\Psi|^2, \quad (3.27)$$

usando as equações de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \Psi^*} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right)}. \quad (3.28)$$

A densidade Lagrangiana (3.27) será útil no momento de resolver variacionalmente a equação não linear para férmions superfluidos. Como foi mostrado no capitulo anterior a introdução de momentos canônicos e o uso da transformada de Legendre para encontrar a densidade Hamiltoniana nos leva diretamente a expressão (3.22) para a energia total do sistema. Usando a equação (3.27) e

introduzindo os momentos canônicos para as variáveis Ψ^* e Ψ

$$\begin{aligned} P_\Psi &= \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \Psi_t} = \frac{i\hbar}{2} \Psi^*, \\ P_{\Psi^*} &= \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \Psi_t^*} = -\frac{i\hbar}{2} \Psi, \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde os sub-índices estão indicando as derivadas respectivas. Podemos calcular a densidade Hamiltoniana

$$\begin{aligned} H &= p_\Psi \frac{\partial \Psi}{\partial t} + p_{\Psi^*} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} - \mathcal{L}_0 \\ &= \frac{\hbar^2}{4m} |\nabla \Psi|^2 + \frac{6}{5} 2^{2/3} \chi \frac{\hbar^2}{m} |\Psi|^{10/3} + 2V |\Psi|^2, \end{aligned} \quad (3.30)$$

integrando sob as coordenadas espaciais finalmente obtemos o funcional de energia para o superfluido de férmions

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{4m} |\nabla \Psi|^2 + \frac{6}{5} 2^{2/3} \chi \frac{\hbar^2}{m} |\Psi|^{10/3} + 2V |\Psi|^2 \right] d\vec{r} \quad (3.31)$$

que muda para o regime BCS e o regime unitário só por o valor da constante ξ . é interessante perceber que o potencial químico (3.25) e a energia (3.31) se diferenciam só na constante que multiplica o termo não linear.

3.2.1 Regime BCS

Nesta seção estabeleceremos o primeiro dos regimes nos quais podemos estudar o condensado de férmions superfluidos. O gás de Fermi em temperaturas suficientemente baixas sofre uma transição de fase na presença de interações fracas e atrativas ($k_F |a| \ll 1$), entre os átomos fermiônicos, os quais formam um par conhecido como par de Cooper. O par de Cooper é a entidade básica que domina o mecanismo da superfluidez no sistema fermiônico. Este conceito foi primeiro introduzido Leon N. Cooper para explicar a forma na qual os elétrons interagem atrativamente por meio de um fônon da rede para formar o estado supercondutor; Cooper explicou a instabilidade do mar de Fermi sob a presença de interações fracamente atrativas e como consequência a formação de estados ligados chamados pares de Cooper.

Neste caso o conceito do par de Cooper é diferente no sentido que não estamos trabalhando em uma rede de átomos e não temos um meio natural para que os férmions interajam atrativamente, assim o uso da ressonância de Feshbach [4] permite-nos variar o tipo de interação (atrativo ou repulsivo) e a magnitude desta, com o qual poderemos ter o superfluido fermiônico no limite de BCS ($a \rightarrow 0$) [1,5,8,9]. O par de Cooper no nosso sistema faz referência a que o tipo

de interação e fraca e atrativa. No caso de átomos fermiônicos, a interação por meio da ressonância envolve átomos em dois estados de espim diferentes. No regime BCS o "bulk chemical potential" toma a forma [13]

$$\mu(n) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad (3.32)$$

neste regime $\xi = 1$ e o termo de interação é praticamente zero, uma vez que a energia de Fermi é considerada muito maior que o termo de interação. Assim a equação DF que descreve o superfluido de Fermi no limite BCS toma a forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 + 2U(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi^2)^{2/3} |\Psi(\vec{r})|^{4/3} \right] \Psi(\vec{r}) = 2\mu\Psi(\vec{r}). \quad (3.33)$$

Como no caso dos BEC podemos derivar desta equação as equações da hidrodinâmica e vice-versa mostrando a validade do estudo do gás de férmions superfluido nos dois modelos teóricos, os quais então resultam ser totalmente equivalentes.

3.2.2 Regime unitário

No regime unitário a comprimento de espalhamento diverge e deixa a distância entre partículas como a única escala de longitude relevante no sistema. Desta forma a única escala de energia é a energia de Fermi $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$. O regime então é chamado universal. No caso de um gás confinado podemos usar esta relação localmente e relacionar o potencial químico local $\mu(\vec{r}) = \mu - V(\vec{r})$ com a energia local de Fermi $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m \equiv \hbar^2 (6\pi^2 n(\vec{r}))^{2/3} / 2m$, onde $n(\vec{r})$ é a densidade de átomos em um estado de espim. Poderemos então encontrar uma relação para a densidade do gás de Fermi no regime unitário $n(\vec{r}) = \left(\frac{2m}{\xi \hbar^2} \right)^{2/3} (\mu - V(\vec{r}))^{3/2} / 6\pi^2$. Veremos como neste limite não podemos só fazer zero o termo de interação mais pelo contrário construir o termo não linear para a equação em termos da energia de Fermi.

A energia do gás de Fermi no regime unitário é encontrada usando fixed-node Green's function Monte Carlo method (FN-GFMC) (que não é parte deste trabalho) dando como resultado

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \xi E_F = 2^{2/3} \frac{6}{5} \chi \frac{\hbar^2}{2m} n_p^{2/3}, \quad (3.34)$$

onde $\xi = 0.44$ e $\chi = (3\pi^2)^{2/3} \xi / 2$. Aqui temos usado $nE(n)/N = n_p 2E(n_p/N_p)$. O potencial químico μ pode ser escrito como uma constante universal multiplicada pela energia de Fermi $\mu = \partial E / \partial N = \xi E_F$. O valor da constante ξ vem do termo [16]

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} E_F (1 + \beta), \quad (3.35)$$

utilizando apenas a expansão até a primeira ordem na constante adimensional β é claro que o termo β tem valor -0.56 o qual leva ao resultado $E/N = 3\xi E_F/5$. Estas características da energia por partícula no regime unitário foram confirmadas experimentalmente e numericamente [12]. Finalmente a DF possuem a mesma forma no regime unitário que no regime BCS, isso nos permitira encontrar relações validas para os dois limites.

3.3 Equações Hidrodinâmica para férmions superfluidos

Em analogia com o caso dos condensados de bósons, as equações da hidrodinâmica podem ser derivadas usando a Eq. (3.26). O procedimento é o mesmo que o feito para o caso da BEC. O calculo da equação DF pode ser feita também usando as equações da hidrodinâmica e a correta definição da velocidade do superfluido [11]. Esta conta tem um ingrediente especial que é o valor do parâmetro de massa, se não se considera corretamente a massa do par como a quantidade fundamental dentro do superfluido a descrição dos parâmetros como a energia e potencial químico não será correta, como foi mostrado nos trabalhos de Adhikari [13], Adhikari e Salasnich [14] e Salasnich[11]. Assim baseados nestes trabalhos as equações da hidrodinâmica corretas serão

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \nabla \cdot (n\vec{v}) = 0, \quad (3.36)$$

$$m \frac{\partial}{\partial t}\vec{v} + \nabla \left[-\frac{\hbar^2}{8m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{2}mv^2 + V + \mu(n) \right] = 0. \quad (3.37)$$

A equação (3.36) é a conhecida equação da continuidade do fluxo hidrodinâmico e a equação (3.37) é a equação de conservação do momento linear. Aqui $\mu(n) = \partial(n\epsilon(n))/\partial n$ é o "bulk chemical potential" dado pela equação de estado do gás uniforme. é bom lembrar que a relação das quantidades descrevendo pares de férmions estão relacionadas com as quantidades que descrevem férmions pelas relações $m_p = 2m_f$, $\mu_p = 2\mu_f$, $V_p = 2V$, $N_f = 2N_p$. Note que as equações (3.36) e (3.37) são formalmente similares as equações da hidrodinâmica para bósons, mas as quantidades envolvidas são muito diferentes. Em particular o "bulk chemical potential" da BEC é completamente diferente do "bulk chemical potential" para o superfluido de férmions [13]. Por exemplo, o termo de energia cinética para férmions é $\propto (8m)^{-1}$ e para bósons é $\propto (2m)^{-1}$ isso é uma consequência direta das relações entre a fase do parâmetro de ordem e a velocidade superfluida [11]

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{2m} \nabla \theta \quad (3.38)$$

enquanto para bósons a relação esta dada por $\vec{v} = \hbar\nabla\theta/m$. Este termo esta relacionado diretamente com a pressão quantica, a qual para o caso de férmions toma a forma

$$T_{QP} = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \quad (3.39)$$

para o caso de bósons esta relação tem a forma $T_{QP} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2\sqrt{n}/\sqrt{n}$. é bom remarcar que o termo de pressão quântica é visto por muitos autores como uma correção para a aproximação de TF [11].

3.4 Relações Gerais

Estabeleceremos as relações do virial, la relação para a energia o potencial químico e o radio cuadratico médio em termos da constante ξ para estabelecer estas relações em termos dos dois limites. Só para lembrar o valor de ξ é um no limite BCS e 0.44 no limite unitário.

3.4.1 Teorema do virial

Mostraremos agora o teorema do virial para o caso dos condensados de férmions. No regime BCS e no regime unitário o "bulk chemical potential" $\mu(n, a)$ tem respectivamente as formas $\hbar^2(3\pi^2n)^{2/3}/2m$ e $(0.44)\hbar^2(3\pi^2n)^{2/3}/2m$, os dos mostrando que $\mu(n, a) \sim n^{2/3}$. Nos dois limites o funcional de energia tem a forma

$$\begin{aligned} E &= \int d\vec{r} \left[\frac{\hbar^2}{8m} |\nabla\Psi|^2 + V |\Psi|^2 + \frac{3\hbar^2\xi}{20m} (3\pi^2)^{2/3} |\Psi|^{10/3} \right] \\ &\equiv \langle E_{kin} \rangle + \langle E_{ho} \rangle + \langle E_{fermi} \rangle, \end{aligned} \quad (3.40)$$

que corresponde a o valor esperado da energia cinética, potencial e de Fermi e será um mínimo para o correto parâmetro de ordem. Tomando vantagem da transformação de escala

$$\Psi(\vec{r}) \rightarrow \sqrt{\lambda}\phi(\lambda x, y, z), \quad (3.41)$$

onde $\lambda x = \tilde{x}$ e $\vec{r} \equiv (x, y, z)$ no sistema de coordenada cartesiano. Podemos calcular as energias promedio $\langle E_{kin} \rangle$, $\langle E_{ho} \rangle$ e $\langle E_{fermi} \rangle$ para a novo parâmetro de ordem

$\phi(x, y, z)$

$$\begin{aligned}
\langle E_{kin} \rangle_{\Psi} &= \int dx dy dz \left[\frac{\hbar^2}{8m} \left| \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \Psi \right|^2 \right] \\
&= \int \frac{\lambda}{\lambda} dx dy dz \left[\frac{\hbar^2}{8m} \left| \left(\lambda^2 \frac{d^2}{d(\lambda x)^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \sqrt{\lambda} \phi(\lambda x, y, z) \right|^2 \right] \\
&= \int \frac{\lambda^3}{\lambda} d\tilde{x} dy dz \left[\frac{\hbar^2}{8m} \left| \left(\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \phi(\lambda x, y, z) \right|^2 \right] \\
&= \lambda^2 \langle E_{kin} \rangle_{\phi}.
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Da mesma forma encontramos $\langle E_{ho} \rangle_{\Psi} = \lambda^{-2} \langle E_{ho} \rangle_{\phi}$ e $\langle E_{fermi} \rangle_{\Psi} = \lambda^{2/3} \langle E_{fermi} \rangle_{\phi}$. Usando a condição do mínimo de energia $dE/d\lambda|_{\lambda=1} = 0$ encontramos

$$\langle E_{ho} \rangle = \langle E_{kin} \rangle + \frac{1}{3} \langle E_{fermi} \rangle, \tag{3.43}$$

que somando nas três direções toma a forma

$$\langle E_{ho} \rangle = \langle E_{kin} \rangle + \langle E_{fermi} \rangle, \tag{3.44}$$

o equivalentemente

$$E = 2 \langle E_{ho} \rangle. \tag{3.45}$$

A relação (3.45) é igual para o regime BCS e o regime unitário. Usando a energia de liberação $\langle E_{rel} \rangle = \langle E_K \rangle + \langle E_F \rangle$ o teorema do virial toma a forma

$$\langle E_{rel} \rangle = \langle E_{ho} \rangle = \frac{1}{2} E, \tag{3.46}$$

que continua sendo dependente do regime no qual estamos trabalhando só por meio de ξ , isso significa só que a relação matemática nos dos regimes será a mesma, não que os valores das energias serão iguais.

3.4.2 Energia, potencial químico e radio quadrático meio

Como já foi mostrado, podemos escrever a equação DF para férmions no regime BCS e unitário da forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{8m} \nabla^2 + V + \xi \frac{\hbar^2}{2m} 2^{2/3} (3\pi^2)^{2/3} \Psi(\vec{r})^{4/3} \right] \Psi(\vec{r}) = \mu_0 \Psi(\vec{r}), \tag{3.47}$$

Na aproximação de TF podemos encontrar soluções para a energia e o potencial químico usando a equação

$$\left[V + B |\Psi(\vec{r})|^{4/3} \right] \Psi(\vec{r}) = \mu_0 \Psi(\vec{r}), \tag{3.48}$$

onde $B = \xi \frac{\hbar^2}{2m} 2^{2/3} (3\pi^2)^{2/3}$. Da equação (3.48) podemos obter uma expressão para o parâmetro de ordem

$$\left(\frac{\mu_0 - V}{B}\right)^{3/2} = |\Psi(\vec{r})|^2, \quad (3.49)$$

usando simetria esférica para o potencial $V = \frac{1}{2}mw^2r^2$ e a condição de normalização para o parâmetro de ordem $\int d\vec{r} |\Psi(\vec{r})|^2 = N/2$

$$\frac{N}{2} = 4\pi \int r^2 dr \left(\frac{\mu_0 - U}{B}\right)^{3/2}, \quad (3.50)$$

onde por simplicidade temos usado $\hbar = w = 1$ e $m = 2$, assim a constante B toma a forma $B = \xi 2^{2/3} (3\pi^2)^{2/3} / 4$. A integral a ser resolvida é

$$\frac{N}{2} = \frac{4\pi}{B^{3/2}} \int r^2 dr (\mu_0 - r^2)^{3/2} \quad (3.51)$$

que tem como resultado

$$\frac{N}{2} = \frac{4\pi}{B^{3/2}} \frac{\mu_0^3 \pi}{32} \quad (3.52)$$

assim o potencial químico será

$$\mu_0 = 3^{1/3} \xi^{1/2} N^{1/3}, \quad (3.53)$$

que é o potencial químico para uma partícula. A forma para N partículas será então [13]

$$\mu_0 = \xi^{1/2} \frac{(3N)^{4/3}}{3} \quad (3.54)$$

Esta expressão depende do regime BCS ou unitário só através da constante ξ . Calcularemos agora a energia, a qual na aproximação de TF tem a expressão

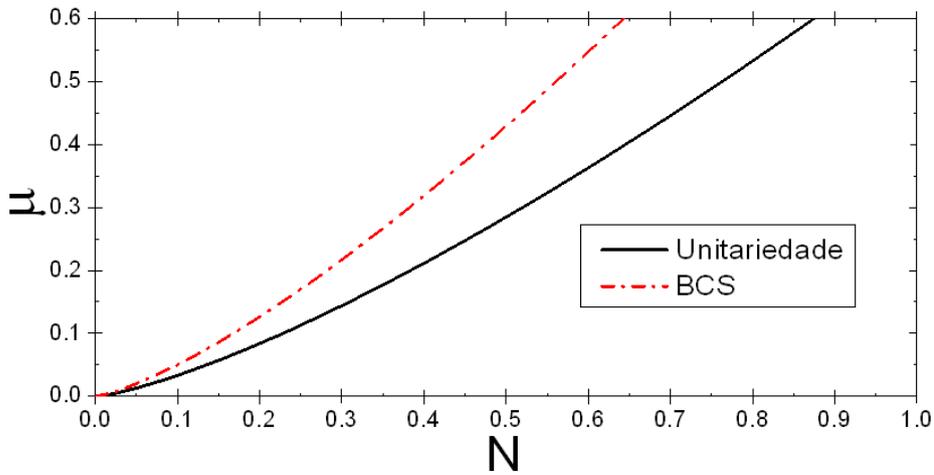


Figura 4: Potencial químico para os limites BCS e unitário em termos do número total de partículas dentro do condensado.

$$E = \int \left[2V |\Psi(\vec{r})|^2 + 2^{2/3} \frac{6 \hbar^2 \xi}{5 m 2} (3\pi^2)^{2/3} |\Psi(\vec{r})|^{10/3} \right] d\vec{r}, \quad (3.55)$$

onde $B = 2^{2/3} \xi (3\pi^2)^{2/3} / 4$ e $\hbar = w = 1$, $m = 2$. Usando o potencial externo $U = mw^2 r^2 / 2$ teremos

$$\begin{aligned} E &= \int \left[2r^2 \left(\frac{\mu_0 - r^2}{B} \right)^{3/2} + \frac{12}{5} 2^{2/3} \frac{\xi}{4} (3\pi^2)^{2/3} \left(\frac{\mu_0 - r^2}{B} \right)^{5/2} \right] d\vec{r} \\ &= \frac{4\pi}{B^{3/2}} \int \left[2r^4 (\mu_0 - r^2)^{3/2} + \frac{12}{5} r^2 (\mu_0 - r^2)^{5/2} \right] d\vec{r} \\ &= \frac{4\pi}{B^{3/2}} \frac{3\pi\mu_0^4}{64}, \end{aligned} \quad (3.56)$$

que tem finalmente a expressão para a energia [13]

$$E = \frac{\mu_0^4}{4} = \xi^{1/2} \frac{(3N)^{4/3}}{4}, \quad (3.57)$$

onde temos usado a expressão para o potencial químico $\mu_0 = 3^{1/3} \xi^{1/2} N^{1/3}$. De novo esta expressão depende do regime BCS ou unitário só através do parâmetro ξ como é esperado. O radio quadrático meio do condensado de férmions esta

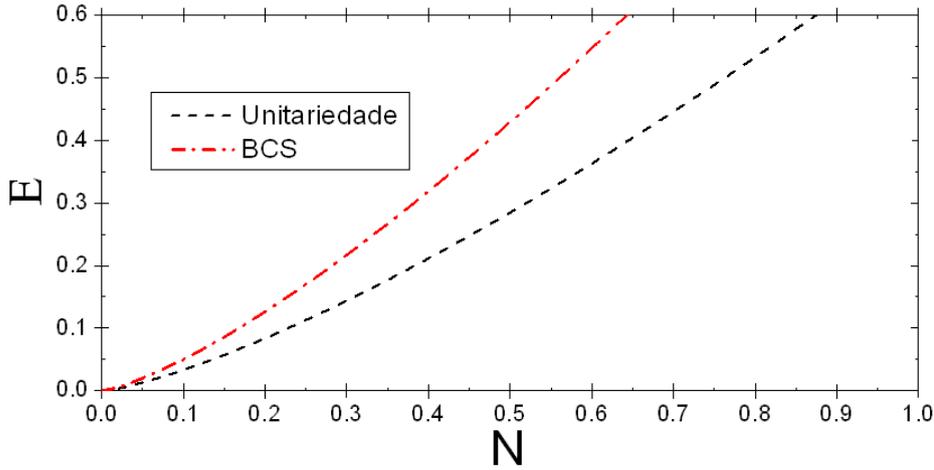


Figura 5: Energia para os limites BCS e unitário em termos do número total de partículas dentro do condensado.

definido como

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int \vec{r}^2 d\vec{r} n(\vec{r})}{\int d\vec{r} n(\vec{r})}, \quad (3.58)$$

reescrevendo esta definição para pares de férmions, e usando o parâmetro de ordem (3.49)

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{r}^2 \rangle &= \frac{4}{N} \int \vec{r}^2 d\vec{r} n_p(\vec{r}) \\
 &= \frac{16\pi}{N} \int r^2 dr \left(\frac{\mu_0 - r^2}{B} \right)^{3/2} \\
 &= \frac{16\pi}{NB^{3/2}} \frac{3\mu_0^4\pi}{256},
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

que finalmente usando a expressão para o potencial químico (3.54) e simplificando termos comuns teremos [13]

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3^{4/3} \xi^{1/2} N^{1/3}}{4} \tag{3.60}$$

Com estas propriedades gerais nos limites unitário e BCS temos concluído o es-

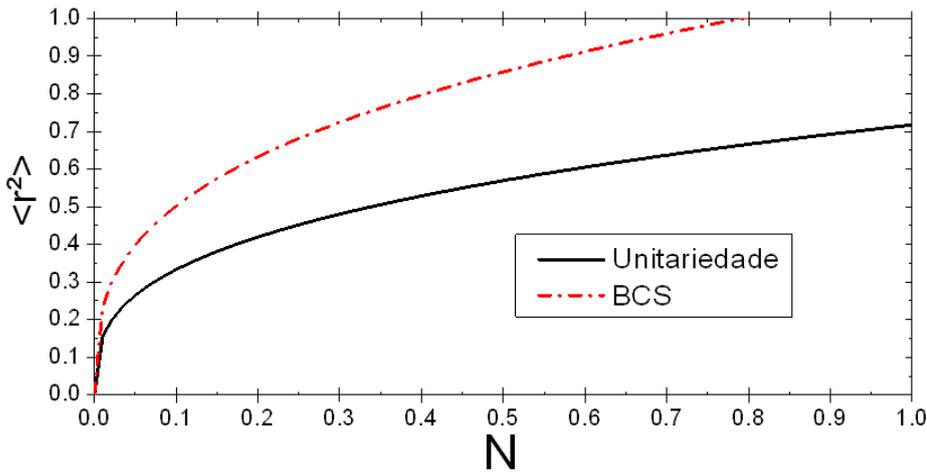


Figura 6: Radio quadrático meio para os limites BCS e unitário em termos do número total de partículas dentro do condensado.

tudo do gás de férmions superfluido por meio da equação DF. Nos seguintes capítulos reduziremos as equações de Gross-Pitaevskii e de Densidade Funcional de três a duas e uma dimensão com o fim de estudar os condensados tipo cigarro (1D) e tipo disco (2D). Estes tipos de condensados são possíveis graças a aplicação de uma armadilha magnética com uma certa simetria. No nosso caso usaremos uma armadilha com uma simetria cilíndrica ($r = (\rho, z)$) a qual com a aplicação do campo mais forte na direção z confinara a dinâmica do condensado na direção ρ com o que teremos um condensado bidimensional. Se o campo for mais forte na direção ρ a dinâmica estará confinada na direção z e teremos um condensado unidimensional.

Referências

- [1] R. Feynman. *Statistical mechanics: A Set Of Lectures* (Advanced Book Classics) (1985).
- [2] H.T. Stoof, K.B. Gubbels, D.B.M. Dickerscheid. *Ultra Cold Quantum Fields* (Springer) (2005).
- [3] S.K. Adhikari, L. Salasnich. *New J. Phys.* 11, 023011 (2009).
- [4] C. A. Regal and D. S. Jin, *Advanced in Atomic, Molecular and Optical Phys.* 54 (2007).
- [5] M. Greiner, C. A. Regal, D. S. Jin. *Fermi Condensates*. JILA Publications (2002).
- [6] S. Jochim, et AL. *Science* 302, 2101 (2003).
- [7] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Science* 298, 2144 (2002).
- [8] W. Ketterle and M. W. Zwierlein. *Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course CLXIV, Varenna, 20 - 30 June 2006.*
- [9] D. S. Jin and C. A. Regal. *Fermi gás experiments*. JILA Publications.
- [10] A. J. Legget. *J. Physics, C. (Paris)* 41, 7 (1980).
- [11] L. Salasnich, *Laser Phys.* 12, 198 (2002).
- [12] D. Blume, J. von Stecher and C. H. Greene. *Phys. Rev. Lett.* 99, 233201 (2007).
- [13] S.K. Adhikari. *Phys. Rev. A* 79, 023611 (2009).
- [14] S.K. Adhikari and L. Salasnich. *Phys. Rev. A* 78, 043616 (2008).
- [15] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanis* (Pergamon Press) (1986).
- [16] T.D. Lee and C.N. Yang, *Phys. Rev.* 105, 1119 (1957). K. Huang and C.N. Yang, *Phys. Rev.* 105,767 (1957).

4 Redução dimensional da equação de GP

Os dois primeiros capítulos foram dedicados ao estudo das propriedades das equações de Gross-Pitaevskii (capítulo 1) e a equação DF para condensados de férmions (capítulo 2) e por meio delas foram estudados alguns aspectos relevantes dos condensados de Bose-Einstein e do superfluido de Fermi. Neste capítulo estudaremos a forma de reduzir para duas e uma dimensões a equação de GP.

Trabalhos experimentais [1,2] mostram que podem ser construídos condensados em duas e uma dimensões aplicando um campo externo que confine a dinâmica do condensado. No caso de um potencial com simetria cilíndrica, a aplicação do campo na direção radial confinada a dinâmica do condensado na direção axial e teremos um condensado unidimensional, chamado condensado tipo cigarro. Se o campo for aplicado na direção axial a dinâmica do condensado será confinada na direção radial e teremos um condensado bidimensional, chamado condensado tipo disco. Por estas razões o estudo da solução da GP em uma e duas dimensões tem especial importância.

A propósito deste capítulo será escrever uma expressão para a equação de GP em duas e uma dimensões e ter um modelo teórico que nos permita calcular as quantidades importantes do condensado em duas e uma dimensões e comparar-las com as quantidades em três dimensões. Existem muitas propostas para o estudo do BEC em 1D e 2D [3,4] em termos de equações efetivas que mostram ser muito exatas. A partir de algumas idéias que estes trabalhos apresentam proporemos um procedimento para a redução da equação de GP. Usaremos então este capítulo para introduzir este procedimento. No final de cada tópico mostraremos como poderá ser solucionada a equação de GP no limite de Thomas-Fermi e no limite de acoplamento fraco usando a conhecida aproximação variacional.

4.1 Redução de 3D-1D e 3D-2D da equação de GP

Como foi mostrado no primeiro capítulo a equação de GP dependente do tempo, tem a forma

$$\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{t}} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\hat{r}}^2 + V(\hat{r}) + \hat{g}N |\Phi|^2 \right] \Phi(\hat{r}, \hat{t}) = 0, \quad (4.1)$$

onde o potencial confinante está dado por $V(\hat{r}) = mw^2 (\hat{\rho}^2 + \lambda^2 \hat{z}^2) / 2$ com $\hat{\rho}$ a coordenada radial e \hat{z} a coordenada axial ($\hat{r} \equiv (\hat{\rho}, \hat{z})$), $\hat{g} = 4\pi\hbar^2 \hat{a}$; m com \hat{a} a comprimento de espalhamento, m a massa do átomo e as frequências w e λw as frequências nas direções ρ e z . A condição de normalização para a função de onda de partícula única $\Phi(\hat{r}, \hat{t})$ é

$$\int d\hat{r} |\Phi(\hat{r}, \hat{t})|^2 = 1. \quad (4.2)$$

Vamos usar a transformação de coordenadas em termos das unidades adimensionais do oscilador harmônico (que não é a única escolha possível) $t = \hat{t}w$, $a = \hat{a}/a_\rho$, $r = \hat{r}/a_\rho$, $z = \hat{z}/a_\rho$, $\rho = \hat{\rho}/a_\rho$, $\psi = \Phi a_\rho^{3/2}$ onde $a_\rho = \sqrt{\hbar/mw}$ para reescrever a equação de GP. Assim a Eq. (4.1) pode ser escrita como

$$\left[-i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) + gN |\psi|^2 \right] \psi(\vec{r}, t) = 0, \quad (4.3)$$

onde $g = 4\pi a$ e a normalização $\int d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$. Esta equação será reduzida a uma equação em uma e duas dimensões. Será usado o parâmetro λ como o portador do valor magnético do campo nas direções ρ e z , assim se $\lambda > 1$ teremos um condensado bidimensional, se $\lambda < 1$ teremos um condensado unidimensional. Nestes limites ($\lambda < 1$ cigar-shaped e $\lambda > 1$ disk-shaped) as escalas de longitude nas direções axial e radial são muito diferentes. Consequentemente as correlações entre estas duas direções podem ser esquecidas e a função de onda $\psi(\vec{r}, t)$ pode ser fatorizada nas variáveis ρ e z [3,4]. Para soluções estacionárias $\psi(\vec{r})$ da Eq. (4.3) em uma armadilha 1D podemos definir a densidade linear $\phi^2(z) \equiv \int d^2\rho \psi(\vec{r})$. Da mesma forma, para uma armadilha 2D podemos definir a densidade radial como $\varphi(\rho) \equiv \int dz \psi(\vec{r})$.

4.1.1 Redução 3D-1D da equação GP (Cigar-Shaped BEC)

No caso da aplicação de um campo externo forte na direção ρ ($\lambda < 1$) a função de onda do condensado pode ser escrita como

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\rho, n_1(z, t)) \phi(z, t), \quad (4.4)$$

onde a densidade linear $n_1(z, t)$ esta definida como $n_1(z, t) \equiv N |\phi(z, t)|^2 = N \int d^2\rho |\psi|^2$.
A normalização para a função $\phi(z, t)$ e $\varphi(\rho, n_1)$ é

$$\int d^2\rho |\varphi(\rho, n_1)|^2 = \int dz |\phi(z, t)|^2 = 1. \quad (4.5)$$

A substituição da Eq. (4.4) na Eq. (4.3) e a assunção de que $\varphi(\rho, n_1)$ não depende explicitamente do tempo nem da direção z leva a (aqui por facilidade vamos escrever $\varphi \equiv \varphi(\rho, n_1)$ e $\phi \equiv \phi(z, t)$)

$$\left[-i\varphi \frac{\partial}{\partial t} \phi - \frac{1}{2} \left(\varphi \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \phi \nabla_\rho^2 \varphi \right) + \frac{1}{2} (\rho^2 + \lambda^2 z^2) \varphi \phi \right] + [gN |\varphi|^2 |\phi|^2] \varphi \phi = 0, \quad (4.6)$$

onde temos usado o operador $\nabla_r^2 = \nabla_\rho^2 + \partial^2 \phi / \partial z^2$ em coordenadas cilíndricas. Separando as dependências das funções φ e ϕ em z e ρ

$$\varphi \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{2} \lambda^2 z^2 \right] \phi = \phi \left[-\frac{1}{2} \nabla_\rho^2 + gn_1 |\varphi|^2 + \frac{1}{2} \rho^2 \right] \varphi \quad (4.7)$$

e multiplicando por $\int \varphi^* d^2\rho$ teremos

$$\int d^2\rho \varphi^* \varphi \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{2} \lambda^2 z^2 \right] \phi = \phi \int \varphi^* d^2\rho \left[-\frac{1}{2} \nabla_\rho^2 + gn_1 |\varphi|^2 + \frac{1}{2} \rho^2 \right] \varphi, \quad (4.8)$$

onde do lado direito da Eq. (4.8) definimos a quantidade

$$\mu_\rho(n_1) = \int \varphi^* d^2\rho \left[-\frac{1}{2} \nabla_\rho^2 + g |\varphi|^2 n_1 + \frac{1}{2} \rho^2 \right] \varphi, \quad (4.9)$$

que é o potencial químico emergindo da equação bidimensional

$$\mu_\rho(n_1) \varphi = \left[g |\varphi|^2 n_1 + \frac{1}{2} \rho^2 - \frac{1}{2} \nabla_\rho^2 \right] \varphi. \quad (4.10)$$

Usando (4.9) a equação (4.8) toma então a forma

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{2} \lambda^2 z^2 - \mu_\rho(n_1) \right] \phi(z, t) = 0, \quad (4.11)$$

onde o potencial químico $\mu_\rho(n_1)$ será o termo não linear da equação de GP em uma dimensão (4.11). Temos então duas equações básicas para o condensado em 1D, uma equação principal (4.11) e uma equação auxiliar (4.9). Como foi proposto no inicio do capítulo temos desacoplado os graus de liberdade axial e radial na presença de um campo confinante com simetria ciliíndrica, neste caso o grau de liberdade axial é que tem a informação sobre a dinâmica do condensado. A solução da equação (4.10) leva ao potencial químico da equação (4.9) que é o termo não linear da equação (4.11).

Resolveremos a equação (4.10) para encontra o potencial químico. No limite do acoplamento fraco, como foi mostrado no primeiro capítulo, a função de onda

do condensado $\varphi(\rho, n_1)$ pode ser aproximada pela função Gaussiana

$$\varphi(\rho, n_1) = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 \pi}} \exp \left[-\frac{\rho^2}{2\alpha^2} \right], \quad (4.12)$$

onde α é a largura. Quando $n_1 \rightarrow 0$ o parâmetro $\alpha \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}$ e a equação (4.12) satisfaz a equação (4.10). A substituição da equação (4.12) dentro da equação (4.10) resulta no potencial químico

$$\mu_\rho(n_1) = \frac{\alpha^2}{2} + \frac{1}{2\alpha^2} + \frac{2an_1}{\alpha^2}. \quad (4.13)$$

Agora, no limite de Thomas-Fermi o potencial químico pode ser calculado da equação (4.11) assumindo que o termo de energia cinética não contribui consideravelmente com o potencial químico

$$\mu_\rho(n_1) = \left[gn_1 |\varphi|^2 + \frac{1}{2}\rho^2 \right]. \quad (4.14)$$

Desta equação extraímos o valor da função de onda do condensado

$$|\varphi|^2 = \frac{\mu_\rho(n_1) - \frac{1}{2}\rho^2}{gn_1}, \quad (4.15)$$

Sabemos que $|\varphi|^2$ não pode ser negativa, assim o limite superior de integração para calcular o potencial químico será $\rho = \sqrt{2\mu_\rho(n_1)}$, que é o máximo valor que pode tomar ρ . usando a condição de normalização para a função de onda do condensado $\varphi(\rho, n_1)$ teremos

$$\int d^2\rho |\varphi(\rho, n_1)|^2 = \int_0^{\sqrt{2\mu_\rho(n_1)}} \left(\frac{\mu_\rho(n_1) - \frac{1}{2}\rho^2}{gn_1} \right) d^2\rho = 1, \quad (4.16)$$

que tem como resultado o potencial químico

$$\mu_\rho(n_1) = 2\sqrt{an_1}. \quad (4.17)$$

Nosso objetivo é construir uma função suave que possa reproduzir os dois limites. O fato de usar uma função suave no passo do limite de acoplamento fraco para o limite de Thomas-Fermi foi mostrado por Adhikari e Salasnich [5]. As equações (4.17) e (4.13) podem ser reproduzidas pelo potencial químico

$$\mu_\rho(n_1) = \frac{1}{2\alpha^2} - \frac{\alpha^2}{2} + \sqrt{\alpha^4 + 4an_1}. \quad (4.18)$$

que para os limites de $an_1 \rightarrow 0$ reproduz o potencial químico (4.13) e para o limite $an_1 \rightarrow \infty$ reproduz o potencial químico (4.17)

4.1.2 Redução 3D-2D da equação de GP (Disk-Shaped BEC)

Vamos supor agora que aplicamos um campo externo grande na direção axial ($\lambda > 1$), assim esperamos que o movimento na direção ρ seja aplacado pelo campo externo, deste modo a função de onda do condensado pode ser escrita como [3,4]

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\rho, t)\phi(z, n_2(\rho, t)), \quad (4.19)$$

onde a densidade superficial esta definida como $n_2(\rho, t) \equiv N |\varphi(\rho, t)|^2 = N \int dz |\psi|^2$ e a normalização $\int d^2\rho |\varphi(\rho, t)|^2 = \int dz |\phi(z, n_2)|^2 = 1$. A substituição da Eq. (4.19) na Eq. (4.3) da como resultado

$$\phi(z, n_2) \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla_\rho^2 - \frac{1}{2} \rho^2 \right] \varphi(\rho, t) = \varphi(\rho, t) \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} \lambda^2 z^2 + g n_2 |\phi|^2 \right] \phi(z, n_2), \quad (4.20)$$

onde $g = 4\pi$. Temos separado as diferentes dependências das funções $\varphi(\rho, t)$ e $\phi(z, n_2)$. Multiplicando a Eq. (4.20) por ϕ^* e integrando em z teremos

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla_\rho^2 - \frac{1}{2} \rho^2 \right] \varphi(\rho, t) = \mu(n_2) \varphi(\rho, t). \quad (4.21)$$

onde temos definido o potencial químico $\mu_z(n_2)$ como

$$\mu_z(n_2) = \int \phi^* dz \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} \lambda^2 z^2 + g n_2 |\phi|^2 \right] \phi, \quad (4.22)$$

esta definição nos permite estabelecer que $\mu_z(n_2)$ é o potencial químico emergindo da equação unidimensional

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} \lambda^2 z^2 + g n_2 |\phi|^2 - \mu_z(n_2) \right] \phi(z, n_2) = 0. \quad (4.23)$$

Como no caso anterior, a solução da Eq. (4.23) da como resultado o potencial químico dado pela equação (4.22) que é o termo não linear da equação (4.21).

Vamos introduzir as variáveis $\bar{z} = z/a_z$, $\bar{\phi} = \sqrt{a_z} \phi$, $\bar{\mu}_z = \mu_z a_z^2$, $a_z = \sqrt{1/\lambda}$ para reescrever a Eq. (4.23) e (4.22)

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} + \frac{1}{2} \bar{z}^2 + a_z^2 g n_2 |\bar{\phi}|^2 \right] \bar{\phi}(z, n_2) = \bar{\mu}_z(n_2) \bar{\phi}(z, n_2), \quad (4.24)$$

$$\bar{\mu}_z(n_2) = \int \bar{\phi}^* dz \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} + \frac{1}{2} \lambda^2 \bar{z}^2 + g n_2 |\bar{\phi}|^2 \right] \bar{\phi}. \quad (4.25)$$

Como no caso da redução 3D-1D vamos solucionar Eq. (4.24) nos limites de Thomas-Fermi e no limite de acoplamento fraco. O potencial químico tem solução no limite de acoplamento fraco, esta solução pode ser aproximada por uma

função Gaussiana da forma

$$\bar{\phi}(z, n_2) = \frac{1}{(\beta^2 \pi)^{1/4}} \exp \left[-\frac{\bar{z}^2}{2\beta^2} \right], \quad (4.26)$$

onde β é a largura com $\bar{\phi}(z, n_2)$ desta forma (4.26) o potencial químico (4.24) será

$$\bar{\mu}_z(n_2) = \frac{1}{4\beta^2} + \frac{\beta^2}{4} + 2aa_z n_2 \frac{\sqrt{2\pi}}{\beta}. \quad (4.27)$$

No limite de Thomas-Fermi podemos aproximar o potencial químico pela equação

$$\left[\frac{1}{2} \bar{z}^2 + a_z g n_2 |\bar{\phi}|^2 \right] = \bar{\mu}_z(n_2), \quad (4.28)$$

que nos dá a forma da função de onda neste limite

$$|\bar{\phi}|^2 = \left(\bar{\mu}_z(n_2) - \frac{1}{2} \bar{z}^2 \right) \frac{1}{a_z g n_2}, \quad (4.29)$$

substituindo $|\bar{\phi}|^2$ na condição de normalização $\int dz |\bar{\phi}|^2 = 1$ teremos

$$\int_0^{\sqrt{2\bar{\mu}_z}} dz \left(\bar{\mu}_z - \frac{1}{2} \bar{z}^2 \right) \frac{2}{a_z g n_2} = 1, \quad (4.30)$$

solucionando a integral (4.30) teremos o potencial químico no limite de Thomas-Fermi

$$\bar{\mu}_z = \left[\frac{3\pi a a_z n_2}{\sqrt{2}} \right]^{2/3} \quad (4.31)$$

Como foi falado temos que construir a função de interpolação para o potencial químico $\bar{\mu}_z$ com o fim de reproduzir os limites de acoplamento fraco e de Thomas-Fermi. O função de interpolação será

$$\bar{\mu}_z = \frac{1}{4\beta^2} - \frac{(\pi - 1)\beta^2}{4} + \left(\frac{[\pi\beta^2]^{3/2}}{4} + \frac{3\pi a a_z n_2}{\sqrt{2}} \right)^{2/3} \quad (4.32)$$

o potencial químico (4.32) para valores de $aa_z n_2 \rightarrow 0$ se reduz a o potencial químico (4.27). Para valores grandes de $aa_z n_2$ o potencial químico adquire a forma (4.31).

4.2 Solução Variacional da equação de GP

O objetivo desta parte do capítulo é mostrar a validade da aproximação feita na seção anterior e compara-la com os resultados da solução variacional das equações (4.11) e (4.24) os quais são já conhecidos[6].

4.2.1 Condensado tipo cigarro

A equação (4.11) pode ser derivada da densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}[\varphi] = -\mu_\rho \varphi^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi^*}{\partial \rho} \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} + \frac{1}{2} \rho^2 \varphi^2 + \frac{gn_1}{2} \varphi^4, \quad (4.33)$$

usando a equação de Euler-Lagrange

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho} \right) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\rho^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^*}. \quad (4.34)$$

Na aproximação variacional podemos escrever a função $\varphi(\rho, n_1)$ como

$$\varphi(\rho, n_1) = \frac{\sqrt{A}}{(\pi\alpha^2)^{1/2}} \exp \left[-\frac{\rho^2}{2\alpha^2} \right], \quad (4.35)$$

onde α e a largura da função e o parâmetro A foi introduzido para calculo do potencial químico. A Lagrangiana efetiva para calcular os parâmetros variacionais será

$$L_{eff} = \mu_\rho + 2\pi \int \mathcal{L}[\varphi] \rho d\rho, \quad (4.36)$$

onde μ é o potencial químico total e foi introduzido para garantir que o parâmetro A mantenha a correta normalização da função $\varphi(\rho, n_1)$. A substituição da função (4.35) na Lagrangiana efetiva (4.36) tem como resultado

$$L_{eff} = \mu_\rho(1 - A) + \frac{A}{2\alpha^2} + \frac{1}{2} A\alpha^2 + \frac{an_1 A^2}{\alpha^2}. \quad (4.37)$$

O uso das equações de Euler-Lagrange $\partial L_{eff}/\partial \mu = 0$, $\partial L_{eff}/\partial N = 0$, $\partial L_{eff}/\partial \alpha = 0$ tem como resultado respectivamente $N = 1$ e $\mu_\rho = \alpha^2/2 + 1/2\alpha^2 + 2an_1/\alpha^2$ (que é o mesmo resultado (4.13)) e a resultado para a variaver α

$$\alpha^4 = 1 + 2an_1. \quad (4.38)$$

Temos que ressaltar que a vantagem da aproximação variacional sob a aproximação feita neste trabalho é que temos um valor para o parâmetro α dependendo de an_1 e não temos que impor um valor para ele. Desta forma, usando a Eqs. (4.38) para α e para o potencial químico μ_ρ teremos os valores numéricos para μ_ρ . Os valores de μ_ρ da primeira coluna são obtidos resolvendo a equação (4.9), a segunda coluna vem do potencial químico (4.18) e a equação (4.11) com o valor de $\alpha = 0.98$

an_1	Numérico	Presente	Variacional	MMD	SPR
0	1	1	1	1	1
0.2	1.346427	1.34983	1.35225	1.34165	1.35225
0.6	1.859095	1.85816	1.88776	1.84391	1.88776
1	2.257135	2.25314	2.3094	2.23607	2.30940
5	4.612953	4.60640	4.82418	4.58258	4.82418
10	6.432456	6.42877	6.76475	6.40312	6.76475

Os dados "Numérico" e "Presente" foram tomados de [7]. Os dados MMD e SPR foram tirados de [8] e [4] respectivamente. A comparação mostra que os métodos já existentes são comparáveis com a solução variacional do nosso método o que sugere a maior exactitude do método aqui apresentado.

4.2.2 Condensado tipo disco

A equação (4.25) pode ser derivada usando a densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}[\bar{\phi}] = -\bar{\mu}_z |\bar{\phi}|^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{\phi}^*}{\partial \bar{z}} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{2} \bar{z}^2 |\bar{\phi}|^2 + \frac{g}{2} a_z n_2 |\bar{\phi}|^4, \quad (4.39)$$

e a equação de Euler-Lagrange

$$\left(\frac{d}{dz} \right) \frac{\partial \mathcal{L}[\bar{\phi}]}{\partial \bar{\phi}_z^*} = \frac{\partial \mathcal{L}[\bar{\phi}]}{\partial \bar{\phi}^*}. \quad (4.40)$$

Na aproximação variacional a função de onda do condensado pode ser aproximada pela função Gaussiana

$$\bar{\phi} = \frac{\sqrt{B}}{(\pi\beta^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{\bar{z}^2}{2\beta^2} \right], \quad (4.41)$$

que usada dentro da Lagrangiana efetiva

$$L_{eff} = \bar{\mu}_z + \int \mathcal{L}[\bar{\phi}] dz \quad (4.42)$$

tem como resultado

$$L_{eff} = \bar{\mu}_z (1 - B) + \frac{B\beta^2}{4} + \frac{B}{4\beta^2} + \frac{aa_z n_2 (2\pi)^{1/2} B^2}{\beta}. \quad (4.43)$$

O uso das equações de Euler-Lagrange $\partial L_{eff}/\partial \bar{\mu}_z = 0$, $\partial L_{eff}/\partial N = 0$, $\partial L_{eff}/\partial \beta = 0$ tem como resultado $B = 1$ e $\bar{\mu}_z = \beta^2/4 + 1/4\beta^2 + 2aa_z n_2 (2\pi)^{1/2}/\beta$ e o resultado para a variável β

$$\beta^3 = \frac{1}{\beta} + 2aa_z (2\pi)^{1/2} n_2. \quad (4.44)$$

O uso da Eq. (4.44) para o parâmetro β e o potencial químico $\bar{\mu}_z$ tem como resultado os dados da coluna Variacional. Os dados "Numérico" e "Presente" foram tirados de [7] que soluciona a equação (4.24) e (4.32) onde o parâmetro $\beta = 0.93$.

an_1	Numérico	Presente	Variacional	MMD	SPR
0	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
0.2	1.348783	1.35611	1.36149	1.31186	1.36149
0.6	2.596146	2.57522	2.65111	2.51976	2.65111
1	3.599892	3.56301	3.69266	3.50165	3.69266
5	10.37932	10.2967	10.7161	10.2104	10.7161
10	16.45405	25.9920	17.0012	16.2547	17.0012

os dados das colunas MMD e SPR foram tirados de [8] e [4] respectivamente. Como pode ser notado, a solução feita aqui pelo método variacional coincide com a solução na SPR, que se mostrava como a aproximação mais exata para a redução da GP.

4.2.3 Solução Variacional da equação 3D de GP

A equação tridimensional de Gross-Pitaevskii é

$$\left[-i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) + gN |\psi|^2 \right] \psi(\vec{r}, t) = 0, \quad (4.45)$$

onde $g = 4\pi a$ e a normalização da função de onda é $\int d\vec{r} |\psi|^2 = 1$. Esta equação pode ser escrita para estados estacionários usando a separação de $\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \exp[-i\mu t]$, com μ o potencial químico em três dimensões. Desta forma a equação de GP em 3D toma a forma

$$\left[-\mu - \frac{1}{2} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) + gN |\phi|^2 \right] \phi(\vec{r}) = 0. \quad (4.46)$$

Esta equação pode ser derivada usando a densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}[\phi] = -\mu |\phi|^2 - \frac{1}{2} |\phi|^* \nabla^2 \phi + \frac{1}{2} (\rho^2 + \lambda^2 z^2) + gN |\phi|^2 \quad (4.47)$$

dentro da equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}[\phi]}{\partial \phi^*} = 0. \quad (4.48)$$

Na aproximação variacional podemos tomar a função de onda do condensado como

$$\Psi = \frac{\sqrt{C}}{(\pi\alpha^2)^{1/2} (\pi\beta^2)^{1/4}} \exp \left[-\rho^2/2\alpha^2 - z^2/2\beta^2 \right] \quad (4.49)$$

que usada dentro da Lagrangiana efetiva

$$L_{eff} = \mu + 2\pi \int \mathcal{L}[\phi] d^2\rho dz, \quad (4.50)$$

tem como resultado

$$L_{eff} = \mu(1 - C) + \frac{C}{2\alpha^2} + \frac{1}{2}C\alpha^2 + \frac{\lambda^2\beta^2 C}{4} + \frac{C}{4\beta^2} + \frac{gNC^2}{2^{1/2}\pi^2\alpha^2\beta}. \quad (4.51)$$

Usando as equações de Eule-Lagrange $\partial L_{eff}/\partial\mu = 0, \partial L_{eff}/\partial C = 0, \partial L_{eff}/\partial\alpha = 0, \partial L_{eff}/\partial\beta = 0$ teremos $C = 1$ e os valores de μ, α e β

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{2\alpha^2} + \frac{1}{2}\alpha^2 + \frac{\lambda^2\beta^2}{4} + \frac{1}{4\beta^2} + \frac{8aN_1}{2^{1/2}\pi\alpha^2\beta} \\ \alpha &= \frac{1}{2\alpha^3} + \frac{2gN_1}{2^{1/2}\pi^2\alpha^2\beta} \\ \beta^2 &= \frac{1}{\lambda^2} + \frac{2^{1/2}gN_1}{\lambda^2\pi^2\alpha^2\beta} \end{aligned}$$

se o número de partículas N_1 for zero $\alpha = 1/(2)^{1/4}$ e $\beta = \lambda^{-1}$ e o potencial químico $\mu = 1.31066 + \lambda^2/4$. Usando $\lambda = 1/4$

aN_1	α	β	função de Onda	μ
0	0.840896	4	$0.141047 \exp[-0.0625z^2]$	1.32629
0.2	0.810407	4.2502	$0.132744 \exp[-0.0553581z^2]$	1.5148
1	0.709916	5.19627	$0.108576 \exp[-0.0370354z^2]$	2.36282
2	0.61898	6.31108	$0.0893967 \exp[-0.0251069z^2]$	3.61456
5	0.467686	9.31238	$0.0605849 \exp[-0.0115313z^2]$	8.1732
10	0.360674	13.4438	$0.0419665 \exp[-0.00553294z^2]$	17.0301
20	0.27429	19.982	$0.0282349 \exp[-0.00250451z^2]$	36.8779

onde a função de onda é encontrada a partir de $2\pi \int d\rho\rho |\phi(\vec{r})|^2 = \frac{1}{(\pi\beta^2)^{1/2}} \exp[-z^2/\beta^2]$ que será a densidade linear.

Com o uso de $\lambda = 4$ teremos os valores para a densidade radial $2 \int_0^\infty dz |\phi(\vec{r})|^2 = \frac{1}{(\pi\alpha^2)} \exp[-\rho^2/\alpha^2]$ teremos os resultados

aN_1	α	β	função de Onda	μ
0	0.840896	0.25	$0.450159 \exp[-1.41421\rho^2]$	5.31066
0.2	0.542862	0.473188	$1.08012 \exp[-3.39329\rho^2]$	6.43867
1	0.299762	1.09724	$3.54239 \exp[-11.1288\rho^2]$	28.8957
2	0.227305	1.64596	$6.16073 \exp[-19.3545\rho^2]$	62.9788
5	0.157455	2.83867	$12.8392 \exp[-40.3355\rho^2]$	180.372
10	0.119283	4.29742	$22.3714 \exp[-70.2818\rho^2]$	403.518
20	0.0903794	6.51047	$38.9683 \exp[-122.422\rho^2]$	907.946

A idéia de calcular variacionalmente a solução da equação de GP em uma e duas dimensões e mostrar que o método introduzido aqui é equivalente a esta aproximação e que além disso, com o nosso método encontramos expressões analíticas simples para o potencial químico em 1D e 2D. Temos mostrado o procedimento para a redução da equação de GP e comparamos este com a aproximação variacional. Este procedimento será o mesmo usado no próximo capítulo onde estudaremos a redução para a equação de DF para fermions superfluidos.

Referências

- [1] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 87, 130402 (2001).
- [2] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* 71, 463 (1999).
- [3] A. Muños Mateo and V. Delgado, *Phys Rev. A* 75, 063610 (2007).
- [4] L. Salasnich, A. Parola and L. Reatto. *Phys. Rev A* 65, 043614 (2002).
- [5] S. K. Adhikari and L. Salasnich. *Phys. Rev. A* 78, 043616 (2008).
- [6] V. M. Pérez-Garcia, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein and P. Zoller, *Phys. Rev. A* 56, 1424 (1997).
- [7] C. A. G. Buitrago and S. K. Adhikari. To be published.
- [8] A. Muños Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. A* 77, 013617 (2008).
- [9] S. Zhang and A. J. Leggett, *Phys. Rev. A* 79, 023601 (2009).
- [10] L. Pitaevskii, S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. (Oxford Science Publications) (2003).
- [11] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* 71, 463. (1999).
- [12] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell, *Science* 296, 198 (1995).
- [13] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969 (1995).
- [14] C. C. Bradley, C. A. Sackett and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* 78, 985 (1997).
- [15] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* 20, 454 (1961); *J. Math. Phys.* 4, 195 (1963); L. P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 40, 646 (1961).
- [16] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* 81, 938 (1998).
- [17] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* 84, 2551 (2000).
- [18] K. K. Das, *Phys. Rev. A* 66, 053612 (2002).
- [19] C. Menotti and S. Stringari, *Phys. Rev. A* 66, 043610 (2002).

5 Redução dimensional da equação de DF

No capítulo anterior foi introduzido o modelo para a redução da equação de GP de 3D-1D e 3D-2D. Neste capítulo usaremos esse mesmo procedimento para mostrar como podem ser construídas equações reduzidas da equação DF para 1D e 2D com o fim de estudar os superfluidos de fermions nessas dimensões.

Estudaremos a solução das equações reduzidas em 1D e 2D usando o limite de Thomas-Fermi e de acoplamento fraco, além de solucionar a equação tridimensional e as equações reduzidas para uma e duas dimensões pelo conhecido método da aproximação variacional.

Como foi mostrado no capítulo anterior construiremos uma expressão aproximada para o potencial químico com o fim de reproduzir os resultados do potencial químico nos limites de Thomas-Fermi e de acoplamento fraco. Finalmente mostraremos os resultados para a densidade de átomos e como esta varia dependendo da direção de aplicação do campo confinante.

5.1 Redução de 3D-1D e 3D-2D da equação DF para um superfluido de Fermi.

Como foi mostrado no capítulo 2, a dinâmica do condensado de férmions superfluidos pode ser descrita pela equação DF [1,2,3]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_p(\hat{r}, \hat{t}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_{\hat{r}}^2 + U_p + \mu_p(n_p) \right] \Psi_p(\hat{r}, \hat{t}), \quad (5.1)$$

onde N é o número total de átomos, $U_p = m_p w^2 (\hat{\rho}^2 + \lambda^2 \hat{z}^2)$ é o potencial confinante atuando sob pares de férmions e $\mu_p(n_p) = \frac{2\hbar^2}{m_p} (6\pi^2 n_p)^{2/3}$ é o "bulk chemical potential" dado pela equação de estado do gás homogêneo. A normalização do parâmetro de ordem esta dada por $\int d\vec{r} |\Psi_p|^2 = N_p = N/2$, onde o índice p indica que as quantidades estão em termos de pares.

A Eq. (5.1) pode ser escrita usando as relações entre pares e férmions individuais $m_p = 2m_f$, $U_p = 2U_f$, $\mu_p = 2\mu_f$ da forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \Psi_p(\hat{r}, \hat{t}) = \left[-\frac{\hbar^2}{4m_f} \nabla_{\hat{r}}^2 + 2U_f + 2\mu_f(n_p) \right] \Psi_p(\hat{r}, \hat{t}), \quad (5.2)$$

onde o $\mu_f(n_f) = \frac{\hbar^2}{m_f} \chi n_f 3\pi^{2/3}$ esta generalizando a equação para o regime BCS e unitário com a constante $\chi = (3\pi^2)^{2/3} \xi/2$ onde $\xi = 1$ para o regime BCS e $\xi = 0.44$ para o regime unitário [2]. Usando o potencial químico para pares a Eq. (5.1) toma a forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \Psi_p(\hat{r}, \hat{t}) = \left[-\frac{\hbar^2}{4m_f} \nabla_{\hat{r}}^2 + 2U_f + 2^{2/3} \frac{2\hbar^2}{m_f} \chi |\Psi_p|^{4/3} \right] \Psi_p(\hat{r}, \hat{t}), \quad (5.3)$$

onde temos usado a relação $n_p = |\Psi_p|^2$. Reescreveremos a equação (5.3) usando as variáveis adimensionais do oscilador harmônico $t = \hat{t}w$, $r = \hat{r}w$, $z = \hat{z}w$, $\rho = \hat{\rho}w$, $a = \hat{a}/a_\rho$, $\psi \sqrt{\frac{N}{2}} = \Psi a_\rho^{3/2}$. Assim (5.3) toma a forma

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{1}{4} \nabla_r^2 + (\rho^2 + \lambda^2 z^2) + 2\chi N^{2/3} |\psi|^{4/3} \right] \psi(\vec{r}, t), \quad (5.4)$$

com a normalização dada por $\int d\vec{r} |\psi|^2 = 1$. A equação para férmions superfluidos nesta forma será reduzida para o caso do condensado em uma (cigar-shaped) e duas (disk-shaped) dimensões.

5.1.1 Redução da equação DF de 3D-1D (Cigar-Shaped condensate)

Consideraremos que aplicamos um campo externo forte na direção radial ($\lambda < 1$ na Eq. (5.4)), assim conseguimos um condensado unidimensional. Sob esta condição a função de onda do condensado pode ser escrita como

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\rho, n_1(z, t)) \phi(z, t), \quad (5.5)$$

onde a densidade linear esta definida como

$$n_1(z, t) \equiv N |\phi(z, t)|^2 = N \int d^2 \rho |\psi(\vec{r}, t)|^2, \quad (5.6)$$

e as condições de normalização para as funções $\varphi(\rho, n_1(z, t))$ e $\phi(z, t)$ são

$$\int d^2 \rho |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \int dz |\phi(z, t)|^2 = 1. \quad (5.7)$$

A substituição da (5.5) na equação (5.4) da como resultado

$$\varphi(\rho, n_1) \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \lambda^2 z^2 \right] \phi(z, t) = \phi(z, t) \left[-\frac{1}{4} \nabla_\rho^2 + \rho^2 + 2\chi n_1^{2/3} |\phi(z, t)|^{4/3} \right] \varphi(\rho, n_1). \quad (5.8)$$

Multiplicando Eq (5.8) por $\varphi^*(\rho, n_1)$ e integrando em ρ reescrevemos a Eq. (5.8) nas equações

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \lambda^2 z^2 - \mu_\rho(n_1) \right] \phi(z, t) = 0. \quad (5.9)$$

$$\mu_\rho(n_1) = \int d^2 \rho \varphi^*(\rho, n_1) \left[-\frac{1}{4} \nabla_\rho^2 + \rho^2 + 2\chi n_1^{2/3} |\varphi(\rho, n_1)|^{4/3} \right] \varphi(\rho, n_1), \quad (5.10)$$

onde $\mu_\rho(n_1)$ é o potencial químico emergindo da equação bidimensional

$$\left[-\frac{1}{4} \nabla_\rho^2 + \rho^2 + 2\chi n_1^{2/3} |\varphi(\rho, n_1)|^{4/3} \right] \varphi(\rho, n_1) = \mu_\rho(n_1) \varphi^*(\rho, n_1). \quad (5.11)$$

A solução da Eq. (5.11) da como resultado o potencial químico da Eq. (5.10) o qual será o termo não linear da Eq. (5.9). No limite de acoplamento fraco a Eq. (5.10) pode ser resolvida assumindo que a função de onda do condensado pode ser aproximada pela função Gaussiana

$$\varphi(\rho, n_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha^2}} \exp[-\rho^2/2\alpha^2], \quad (5.12)$$

a substituição da Eq. (5.12) na equação (5.10) tem como resultado o potencial químico

$$\mu_\rho(n_1) = \alpha^2 + \frac{1}{4\alpha^2} + \frac{6}{5} \chi \frac{n_1^{2/3}}{\pi^{2/3} \alpha^{4/3}}. \quad (5.13)$$

No limite de Thomas-Fermi fazendo o termo de energia cinética na Eq. (5.11) zero encontraremos

$$\left[\rho^2 + 2\chi n_1^{2/3} |\varphi(\rho, n_1)|^{4/3} \right] = \mu_\rho(n_1), \quad (5.14)$$

usando a condição de normalização para a função de onda $\varphi(\rho, n_1)$, integrando sob a coordenada ρ e lembrando que $|\varphi(\rho, n_1)|^2$ tem que ser sempre positiva, teremos o potencial químico no limite de Thomas-Fermi

$$\mu_\rho(n_1) = \left[\frac{5}{2\pi} n_1 (2\chi)^{3/2} \right]^{2/5} \approx 1.38336 n_1^{2/5} \chi^{3/5}. \quad (5.15)$$

Com o potencial químico no limite de acoplamento fraco e no limite de Thomas-Fermi podemos construir uma função de interpolação para reproduzir o comportamento do potencial químico não só nos limites, mas sim na passagem de um limite para ou outro. A função de interpolação esta dada por

$$\mu_\rho(n_1) = \frac{1}{4\alpha^2} - \frac{3}{2} \alpha^2 + \left[\left(\frac{5}{2} \alpha^2 \right)^{5/3} + 2\chi \left(\frac{5n_1}{2\pi} \right)^{2/3} \right]^{3/5}, \quad (5.16)$$

que se reduz ao potencial químico (5.13) para valores de $n_1 \rightarrow 0$ e ao potencial químico (5.15) para $n_1 \rightarrow \infty$. A figura (1) mostra que a função de interpolação reproduz corretamente os limites de acoplamento fraco e de Thomas-Fermi e

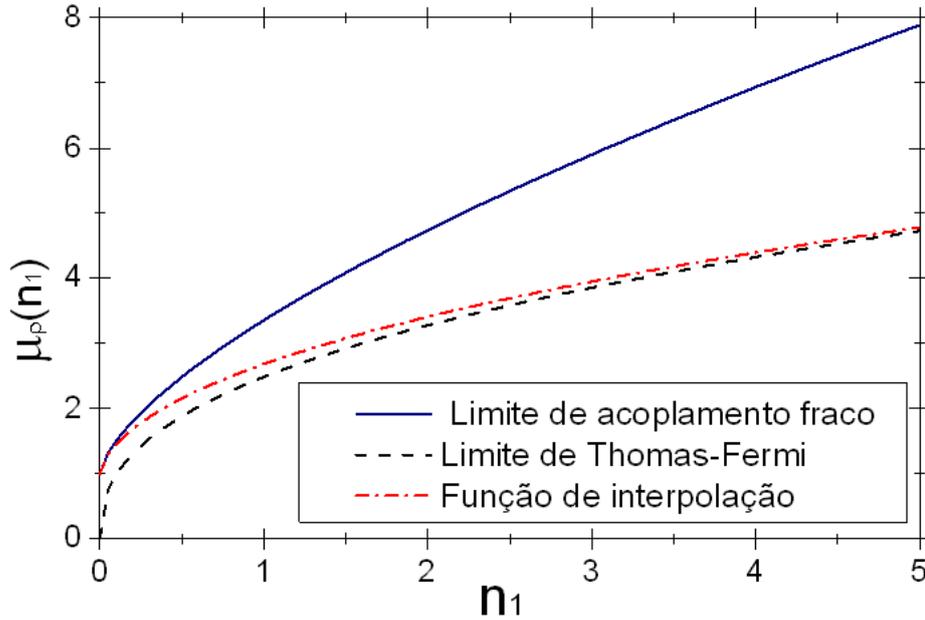


Figura 7: Potencial químico para os limites de acoplamento fraco, Thomas-Fermi e a função de interpolação. Todos como solução da Eq. (5.11) no condensado tipo cigarro.

tem um comportamento suave quando n_1 vai de zero a infinito. O valor do parâmetro α é assumido como $1/\sqrt{2}$ como sendo a melhor escolha para o correto comportamento da função de interpolações nestes limites.

5.1.2 Redução da equação DF de 3D-2D (Disk-Shaped condensate)

Podemos considerar que sob o nosso sistema aplicamos um campo externo forte na direção axial z . Deste modo, formaremos um condensado bidimensional e confinaremos a dinâmica do mesmo na direção radial. Sob estas condições a função de onda do condensado pode-se escrever da forma

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\rho, t)\phi(z, n_2(\rho, t)), \quad (5.17)$$

onde a densidade superficial $n_2(\rho, t)$ esta definida por

$$n_2(\rho, t) \equiv N |\varphi(\rho, t)|^2 = N \int dz |\psi(\vec{r}, t)|^2. \quad (5.18)$$

As condições de normalização das funções $\varphi(\rho, t)$ e $\psi(\vec{r}, t)$ estão dadas por

$$\int d^2\rho |\varphi(\rho, t)|^2 = \int dz |\phi(z, n_2)|^2 = 1. \quad (5.19)$$

A substituição da Eq. (5.17) na Eq. (5.4) tem como resultado

$$\phi(z, n_2) \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{4} \nabla_\rho^2 - \rho^2 \right] \varphi(\rho, t) = \varphi(\rho, t) \left[-\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \lambda^2 z^2 + 2\chi n_2^{2/3} |\phi(z, n_2)|^{4/3} \right] \phi(z, n_2). \quad (5.20)$$

Multiplicando Eq. (5.20) por $\phi^*(z, n_2)$ e integrando em z teremos o conjunto de equações

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{4} \nabla_\rho^2 - \rho^2 \right] \varphi(\rho, t) = \mu_z(n_2) \varphi(\rho, t), \quad (5.21)$$

$$\mu_z(n_2) = \int dz \phi^*(z, n_2) \left[-\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \lambda^2 z^2 + 2\chi n_2^{2/3} |\phi(z, n_2)|^{4/3} \right] \phi(z, n_2), \quad (5.22)$$

onde o termo $\mu_z(n_2)$ na Eq. (5.22) não é outra coisa que o potencial químico emergindo da equação unidimensional

$$\mu_z(n_2) \phi(z, n_2) = \left[\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \lambda^2 z^2 + 2\chi n_2^{2/3} |\phi(z, n_2)|^{4/3} \right] \phi(z, n_2). \quad (5.23)$$

A solução da Eq. (5.23) resulta no potencial químico da Eq. (5.22) o qual será o termo não linear da Eq. (5.21).

Podemos usar uma mudança de variáveis $\bar{z} = z/a_z$, $\bar{\phi} = \sqrt{a_z} \phi$, $\bar{\mu}_z = \mu_z a_z^2$, $a_z = 1/\sqrt{\lambda}$ para simplificar um pouco a Eq. (5.23)

$$\bar{\mu}_z(n_2) \bar{\phi}(z, n_2) = \left[-\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} + \bar{z}^2 + 2\chi a_z^{4/3} n_2^{2/3} |\bar{\phi}(z, n_2)|^{4/3} \right] \bar{\phi}(z, n_2). \quad (5.24)$$

Consistentes com a aproximação feita para a função de onda, temos desacoplado os graus de liberdade relevantes z dos não relevantes ρ .

Agora vamos solucionar a Eq. (5.24) no limite de acoplamento fraco. Neste limite a função de onda do condensado pode ser aproximada pela função Gaussiana

$$\bar{\phi}(z, n_2) = \frac{1}{(\eta^2 \pi)^{1/4}} \exp[-\bar{z}^2/2\eta^2], \quad (5.25)$$

onde η é a largura da função. Com esta função de onda o potencial químico $\bar{\mu}_z(n_2)$ toma a forma

$$\bar{\mu}_z(n_2) = \frac{\eta^2}{2} + \frac{1}{8\eta^2} + \frac{2\chi a_z^{4/3} n_2^{2/3}}{\eta^{2/3} \pi^{1/3}} \sqrt{\frac{3}{5}}. \quad (5.26)$$

No limite de Thomas-Fermi a Eq. (5.24) toma a forma

$$\bar{\mu}_z(n_2) = \left[\lambda^2 \bar{z}^2 + 2\chi n_2^{2/3} |\phi(\bar{z}, n_2)|^{4/3} \right], \quad (5.27)$$

que usando a condição de normalização para $\phi(z, n_2)$ tem como solução para o

potencial químico

$$\bar{\mu}_z(n_2) = \left[\frac{8\chi a_z^{4/3} n_2^{2/3}}{(3\pi)^{2/3}} \right]^{3/4} \approx 1.54947 a_z n_2^{1/2} \quad (5.28)$$

A função de interpolação é construída de forma que para valores de $a_z n_2 \rightarrow 0$ a função reproduza o potencial químico (5.26) e para valores $a_z n_2 \rightarrow \infty$ reproduza o potencial químico (5.28)

$$\bar{\mu}_z(n_2) = \frac{\eta^2}{2} + \frac{1}{8\eta^2} - \frac{15^{3/2}\eta^2}{9\pi} + \left[\left(\frac{15^{3/2}\eta^2}{9\pi} \right)^{4/3} + \frac{8\chi a_z^{4/3} n_2^{2/3}}{(3\pi)^{2/3}} \right]^{3/4} \quad (5.29)$$

Podemos representar os potenciais químicos Eq. (5.26), Eq. (5.28) e Eq. (5.29), mostrando que a função de interpolação reproduz os limites de acoplamento fraco e de Thomas-Fermi.

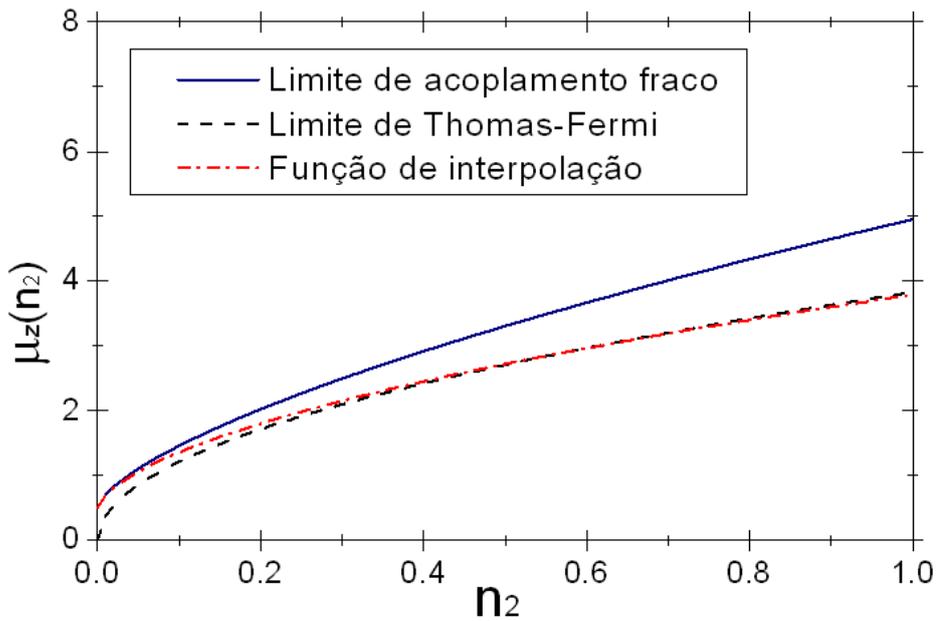


Figura 8: A reprodução dos limites de Thomas-Fermi e de acoplamento fraco é suave na medida que n_2 vai de zero ate o infinito. O valor de η é $1/\sqrt{2}$ como a escolha mais aproximada para o correto comportamento da função de interpolação nos limites de Thomas-Fermi e de acoplamento fraco.

5.2 Solução das equações reduzidas usando a aproximação variacional

Com o objetivo de mostrar a equivalência entre a aproximação feita neste trabalho e a aproximação variacional, solucionaremos as equações reduzidas para condensados fermiônicos em uma e duas dimensões. Resolveremos primeiro a Eq. (5.11).

5.2.1 Condensado tipo cigarro

A equação (5.11) pode ser derivada usando a densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L} = -\mu_\rho |\varphi|^2 + \frac{1}{4} \varphi_\rho^* \varphi_\rho + \rho^2 |\varphi|^2 + \frac{3}{5} g |\varphi|^{10/3}, \quad (5.30)$$

(onde $g = 2\chi n_1^{2/3}$), usando a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_\rho^*} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^*}, \quad (5.31)$$

onde temos simplificado a notação $\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho}$. A idéia da aproximação variacional é usar o fato que o condensado dentro da armadilha esta no estado de mais baixa energia; por ser uma armadilha harmônica esperamos que a solução seja uma função Gaussiana da forma

$$\varphi(\rho, n_1) = \frac{\sqrt{A}}{(\pi\alpha^2)^{1/2}} \exp \left[-\frac{\rho^2}{2\alpha^2} \right]. \quad (5.32)$$

A aproximação variacional consiste em usar esta função de teste na densidade Lagrangiana (5.30) e com ela calcular a Lagrangiana efetiva dada por

$$L_{eff} = \mu_\rho + C_D \int_0^\infty \mathcal{L}(\varphi) \rho^{D-1} d\rho, \quad (5.33)$$

onde temos introduzido o potencial químico μ_ρ para manter a correta normalização na função (5.32). O parâmetro $C_D = 2\pi$ ou 4π nos casos $2D$ ou $3D$. seguindo o procedimento padrão, a Lagrangiana efetiva (5.33) com o uso da função (5.32) será da forma

$$L_{eff} = \mu_\rho(1 - A) + \frac{1}{4} \frac{A}{\alpha^2} + \frac{9}{25} \frac{gA^{5/3}}{\alpha^{4/3}\pi^{2/3}} + \alpha^2 A. \quad (5.34)$$

Usando as equações de Euler-Lagrange $\frac{\partial L_{eff}}{\partial \mu} = 0$, $\frac{\partial L_{eff}}{\partial A} = 0$, $\frac{\partial L_{eff}}{\partial \alpha} = 0$ encontramos $N = 1$ que mantém a correta normalização da função (5.32). O potencial químico $\mu_\rho = \alpha^2 + \frac{1}{4\alpha^2} + \frac{6}{5}\chi \frac{n_1^{2/3}}{\alpha^{4/3}\pi^{2/3}}$ que é o mesmo potencial químico dado pela Eq. (5.13). O resultado mais importante da aproximação variacional é a seguinte

equação

$$\alpha = \frac{1}{4\alpha^3} + \frac{12}{25} \frac{\chi n_1^{2/3}}{\pi^{2/3} \alpha^{7/3}}, \quad (5.35)$$

porque com ela poderemos calcular como varia o potencial químico μ_ρ em termos da densidade linear e para diferentes valores de α para valores diferentes de n_1 e o parâmetro $\xi = 0.44$. Assim para os valores $\alpha = 0.70711, 0.760544, 0.83063, 0.912482, 1.11101, 1.29985$ teremos

n_1	Numérico	AS	Presente $\alpha = 1/\sqrt{2}$	Variacional
0	1	1	1	1
0.1	1.374014	1.37619	1.36783	1.37619
0.4	1.86102	1.87129	1.83897	1.87129
1	2.438935	2.46380	2.39749	2.4638
4	3.943426	4.01637	3.86401	4.01637
10	5.563762	5.69170	5.45885	5.69171

onde os dados da coluna AS foram tirados de [3], os dados da coluna Numérico e Presente foram tirados de [6]. A aproximação variacional mostrou concordância com os valores do trabalho anterior [3] o qual da para o presente trabalho uma maior importância já que poderemos ter valores mais exatos a partir da solução de equações analiticamente mais simples. Tendo solucionado a equação auxiliar para μ_ρ teremos que solucionar a Eq. (5.9). Com tal fim usaremos mais uma vez a aproximação variacional; a qual com o uso da função de onda teste

$$\phi(z) = \frac{A}{(\pi\eta^2)^{1/4}} \exp[-z^2/2\eta^2] \quad (5.36)$$

danos os resultados $A = 1$,

$$\mu_z = \frac{1}{8\eta^2} + \frac{\lambda^2\eta^2}{2} + \mu_\rho, \quad (5.37)$$

e

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}, \quad (5.38)$$

onde podemos ver que $\eta = \sqrt{2}$ com o uso de $\lambda = 1/4$. É claro com este resultado que o uso da aproximação variacional trais com sigo a facilidade da solução das equações (5.9) e (5.10), mais com esta aproximação, como podemos ver na equação (5.38), temos perdido informação no parâmetro η , e não poderemos variar este com respeito ao número de partículas.

5.2.2 Condensado tipo disco

Podemos fazer as mesmas contas da seção anterior, desta vez para a Eq. (5.24) para o condensado tipo disco, com a densidade Lagrangiana dada por

$$\mathcal{L}(\varphi) = -\bar{\mu}_z |\bar{\phi}|^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{z}} \right)^2 + \bar{z}^2 |\bar{\phi}|^2 + \frac{3}{5} k |\bar{\phi}|^{10/3}, \quad (5.39)$$

onde $k = 2\chi(a_z^2 n_2)^{2/3}$. Mais uma vez usando a aproximação variacional calcularemos a Lagrangiana efetiva

$$L_{eff} = \bar{\mu}_z + \int_0^\infty \mathcal{L}(\varphi) \rho^{D-1} d\rho, \quad (5.40)$$

usando as equações de Euler-Lagrange (5.31). Note que o fator dois no potencial químico esta para manter a correta normalização na função Gaussiana

$$\bar{\phi}(z, n_2) = \frac{\sqrt{B}}{(\eta^2 \pi)^{1/4}} \exp[-\bar{z}^2 / 2\eta^2]. \quad (5.41)$$

Com esta função de onda do condensado na Eq. (5.39) a Lagrangiana efetiva toma a forma

$$L_{eff} = \bar{\mu}_z (1 - N) + \frac{N}{8\eta^2} + \frac{1}{2} N \eta^2 + \frac{3}{10} \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{k N^{5/3}}{\eta^{2/3} \pi^{2/3}}. \quad (5.42)$$

O uso das equações de Euler-Lagrange $\frac{\partial L_{eff}}{\partial \mu} = 0$, $\frac{\partial L_{eff}}{\partial B} = 0$ e $\frac{\partial L_{eff}}{\partial \alpha} = 0$ na Lagrangiana efetiva (5.42) damos como resultados $N = 1$ $\bar{\mu}_z = \frac{\eta^2}{2} + \frac{1}{8\eta^2} + \frac{2\chi a_z^{4/3} n_2^{2/3}}{\eta^{2/3} \pi^{1/3}} \sqrt{\frac{3}{5}}$ que é o mesmo potencial químico (5.26). Finalmente a equação para o parâmetro η da função de onda tem a forma

$$\eta = \frac{1}{4\eta^3} + \frac{4}{5} \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{\chi a_z^{4/3} n_2^{2/3}}{\eta^{5/3} \pi^{1/3}}, \quad (5.43)$$

com esta equação podemos calcular os valores do potencial químico para diferentes valores da densidade superficial n_2 e usando o parâmetro $\xi = 0.44$ e os valores $\eta = 0.707107, 0.790385, 0.906096, 1.04566, 1.38992, 1.72142$ teremos os valores

$a_z n_2$	Numérico	AS	Presente $\alpha = 1/\sqrt{2}$	Variacional
0	0.5	0.5	0.5	0.5
0.1	1.071781	1.07375	1.05892	1.07375
0.4	2.035143	2.04762	1.98472	1.85402
1	2.798613	2.82290	2.72154	2.82291
4	6.101262	6.18240	5.95041	5.5368
10	8.597820	8.72108	8.4144	8.7211

Os dados Numérico e Presente foram tirados de [6], os dados AS foram tirados de [3]. Os dados calculados a partir da aproximação variacional mostram concordância com dados calculados a partir das equações reduzidas efetivas no trabalho de Adhikari e Salasnichh[1]. A variação do parâmetro α pode levar a valores mais exatos do potencial químico. Tendo solucionado a equação auxiliar para μ_z teremos que solucionar a Eq. (5.21). Com tal fim usaremos mais uma vez a aproximação variacional; a qual com o uso da função de onda teste

$$\phi(\rho) = \frac{B}{(\pi\alpha^2)^{1/2}} \exp[-\rho^2/2\alpha^2] \quad (5.44)$$

danos os resultados $B = 1$, $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\mu_\rho = \frac{1}{4\alpha^2} + \alpha^2 + \mu_z, \quad (5.45)$$

É claro com este resultado que o uso da aproximação variacional trais com sigo a facilidade da solução das equações (5.21) e (5.22), mais com esta aproximação temos perdido informação no parâmetro α , já que não poderemos variar este com respeito ao número de partículas.

5.3 Solução variacional para a equação DF tridimensional

Nesta ultima seção vamos aplicar a aproximação variacional na Eq.(5.4). Escreveremos a DF para estados estacionários e usando as equações de Euler-Lagrange na Lagrangiana efetiva (a ser resolvida usando a função de onda teste), vamos encontrar os parâmetros como o potencial químico, e as larguras de cada função de onda nas direções radial e axial, para com esta informação representar a variação da função de onda em termos do número de partículas. Os gráficos das densidades linear ϕ^2 e radial φ^2 serão feitos em termos do parâmetro $\lambda = 1/4, 4$ respectivamente.

A Eq. (5.4) para estados estacionários $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0(\vec{r}) \exp[-i2\mu_0 t]$ tem a forma

$$2\mu_0\psi_0(\vec{r}) = \left[-\frac{1}{4}\nabla_r^2 + (\rho^2 + \lambda^2 z^2) + 2\chi N^{2/3} |\psi_0|^{4/3} \right] \psi_0(\vec{r}), \quad (5.46)$$

que tem como condição de normalização $\int d\vec{r}\psi_0(\vec{r}) = 1$ e onde $r^2 = \rho^2 + z^2$. A Eq. (5.46) pode ser derivada usando a densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}(\varphi) = -2\mu_0 |\psi_0|^2 - \frac{1}{4}\psi_0^* (\nabla_r^2 \psi_0) + \rho^2 |\psi_0|^2 + \lambda^2 z^2 |\psi_0|^2 + \frac{3}{5}2\chi N^{2/3} |\psi_0|^{10/3}, \quad (5.47)$$

com o uso da equação de Euler-Lagrange $\frac{\partial \mathcal{L}(\varphi)}{\partial \psi^*} = 0$.

$$L_{eff} = \mu_0 + 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(\varphi) \rho d\rho dz \quad (5.48)$$

esta integral em ρ deve ser resolvida de zero a infinito e devemos usar o operador Laplaciano $\nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Usando a função de onda de prova

$$\psi_0(\vec{r}) = \frac{\sqrt{A}}{\alpha \pi^{3/4} \eta^{1/2}} \exp\left[-\frac{\rho^2}{2\alpha^2} - \frac{z^2}{2\eta^2}\right] \quad (5.49)$$

a Lagrangiana efetiva (5.47) será

$$L_{eff} = \mu_0 - \mu_0 A + \frac{A}{4\alpha^2} + A^2 \alpha + \frac{A}{8\eta^2} + \frac{1}{2} \lambda^2 A \eta^2 + \frac{18\chi N^{2/3}}{25\pi} \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{A^{5/3}}{\sigma^{4/3} \eta^{2/3}} \quad (5.50)$$

o uso das equações de Euler-Lagrange $\partial L_{eff} / \partial \alpha = 0$, onde $\alpha = \{\mu_0, \alpha, \eta, N_0\}$, encontramos o resultado $A = 1$ e as expressões analíticas para α , η e μ_0

$$\begin{aligned} \alpha^4 &= \frac{1}{4} + \frac{12\chi N^{2/3}}{25} \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{\alpha^{2/3}}{\eta^{2/3} \pi} \\ \lambda^2 \eta^4 &= \frac{1}{4} + \frac{12}{25} \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{\chi N^{2/3}}{\alpha^{4/3}} \frac{\eta^{4/3}}{\pi} \\ \mu_0 &= \frac{1}{4\alpha^2} + \alpha^2 + \frac{1}{8\eta^2} + \frac{1}{2} \lambda^2 \eta^2 + \frac{6\chi N^{2/3}}{5\pi} \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{1}{\alpha^{4/3} \eta^{2/3}}, \end{aligned}$$

Se o número de partículas é zero $\alpha = 1/\sqrt{2}$, $\eta = 1/(\lambda^{1/4} \sqrt{2})$ e $\mu_0 = 1 + \frac{\lambda^{1/2}}{2}$.

Com a solução das equações acopladas (5.51) para η e α com a variação do número de partículas N podemos representar a densidade linear ϕ^2 , com o uso da constante $\lambda = 1/4$ para o condensado tipo cigarro

$$\phi^2 = \frac{2\pi}{(\alpha \pi^{3/4} \eta^{1/2})^2} \int d\rho \rho \left| \exp\left[-\frac{\rho^2}{2\alpha^2} - \frac{z^2}{2\eta^2}\right] \right|^2 = \frac{1}{\pi^{1/2} \eta} \exp\left[-\frac{z^2}{\eta^2}\right] \quad (5.51)$$

calculando os valores de η e σ para diferentes números de partículas construímos a tabela seguinte

N	η	α	Function
0	$\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$0.398942 \exp[-0.5z^2]$
2	2.33287	0.817492	$0.241844 \exp[-0.183746z^2]$
10	3.13736	0.935617	$0.17983 \exp[-0.101592z^2]$
100	4.76228	1.25143	$0.11847 \exp[-0.044093z^2]$

No caso da densidade radial φ^2 , com a solução das equações acopladas (5.51) para η e α com a variação do número de partículas N , podemos representar a

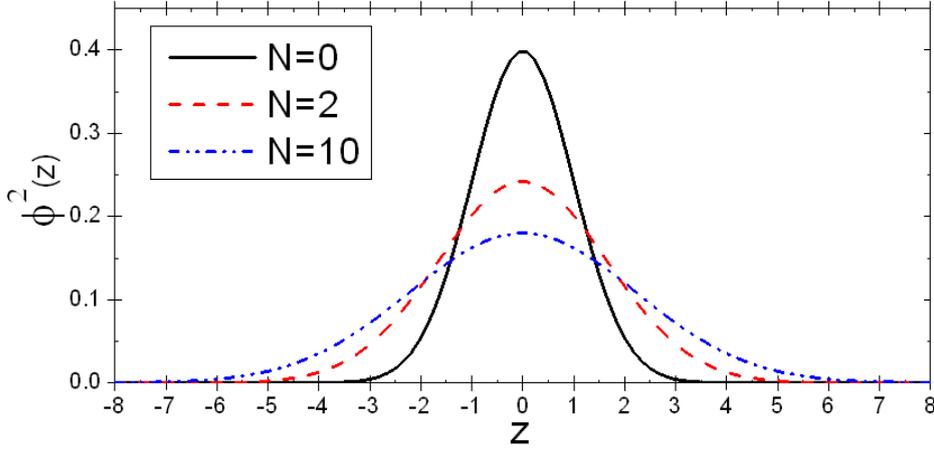


Figura 9: Densidade linear para a solução da DF em 3D usando a aproximação variacional

densidade radial φ^2 , com o uso da constante $\lambda = 4$ para o condensado tipo disco

$$\varphi^2 = \left(\frac{1}{\alpha \pi^{3/4} \eta^{1/2}} \right)^2 \int dz \left| \exp\left[-\frac{\rho^2}{2\alpha^2} - \frac{z^2}{2\eta^2}\right] \right|^2 = \frac{1}{\pi \alpha^2} \exp\left[-\frac{\rho^2}{\alpha^2}\right] \quad (5.52)$$

calculando os valores de η e σ para diferentes números de partículas

N	η	α	Function
0	0.353553	0.707107	$0.63662 \exp[-2\rho^2]$
2	0.387879	0.99821	$0.319452 \exp[-1.00359\rho^2]$
10	0.423667	1.2776	$0.195012 \exp[-0.612649\rho^2]$
100	0.52571	1.89395	$0.0887388 \exp[-0.278781\rho^2]$

podemos representar as densidades radiais em termos de N

As soluções das densidades radial e linear tem grande concordância com os valores calculados em [6] o que mostra primeiro o útil que pode ser a aproximação variacional e segundo a exatidão da separação de variáveis da função de onda usada para a redução da equação de DF. O estudo das propriedades do superfluido fermiônico no regime unitário está ainda em desenvolvimento o que torna interessante o uso da DF com tal objetivo.

5.4 Conclusões

Concluimos varias coisas importantes do estudo apresentado nesta dissertação:

1) A redução adimensional da equação de GP para uma e duas dimensões

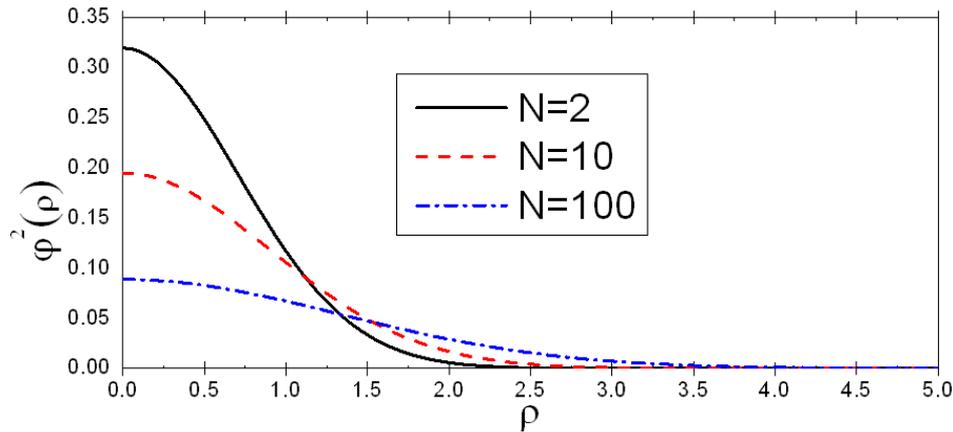


Figura 10: Densidade radial com $N = 2, 10, 100$ para a solução da DF em 3D usando a aproximação variacional

permite o estudo de condensados e das suas propriedades na presença de um potencial harmônico confinante que tem um valor forte em uma das direções radial o axial dependendo se o condensado a ser estudado for tipo cigarro ou tipo disco.

2)A forma analítica simples das equações para o condensado bosônico tipo cigarro, que consistem em uma equação unidimensional e uma equação auxiliar para o termo não linear que será o potencial químico de uma equação tipo GP em duas dimensões, apresenta vantagens na solução variacional das mesmas.

3)A forma analítica para as equações do condensado bosônico tipo disco, que consistem em uma equação principal em duas dimensões e uma equação auxiliar para o termo não linear que será o potencial químico de uma equação unidimensional tipo GP, será de fácil solução usando a aproximação variacional.

4) Os resultados dos potenciais químicos μ_z e μ_ρ (como os termos não lineares das equações auxiliares) usando a aproximação variacional comparados com os resultados já existentes para a redução dimensional da GP estão em grande concordância o que sugere que os resultados numéricos serão mais exatos ainda que os já existentes, o que foi mostrado no capítulo 4.

5)As equações reduzidas para o condensado bosônico não são equivalentes em nenhum momento a equação de GP. Estas equações reduzidas perdem informação do sistema no momento de fazer a separação da função de onda no caso do BEC tipo cigarro e disco. Mais mesmo com o uso desta aproximação foram encontrados bons resultados usando a aproximação variacional em comparação aos

dados numéricos.

6)O estudo do superfluido fermiônico com o fim de apresentar a equação DF esta respaldado pela equivalência desta com as equações da hidrodinâmica com a inclusão do termo de pressão quântica. A exatidão da DF na reprodução do superfluido de fermiônico não foi apresentada neste trabalho mais foi respaldada pelos trabalhos de Adhikari e Salasnich [1].

7)As equações reduzidas para uma e duas dimensões para o superfluido de Fermi mostram uma forma analítica simples comparadas com as reduções já existentes para superfluidos de fermi[3].

8)A solução variacional das equações reduzidas 1D e 2D para o superfluido de Fermi mostra os mesmos resultados que as reduções já existentes[3] o que sugere uma maior exactitude na solução numérica.

9)A equação DF introduzida neste trabalho é de grande importância para o estudo do superfluido de Fermi e gera grandes expectativas para o estudo do superfluido de Fermi tanto nos limites BCS e unitário como no crossover de um limite para outro, um tema ainda por pesquisar.

10)A similitude matemática das equações de GP e DF sugere um formalismo amplo para o estudo dos dois sistemas usando uma equação geral que descreva os dois sistemas, mudando claro esta o termo de interação dependendo das partículas a ser estudadas e o limite de interação no qual estas se encontrem.

Referências

- [1] S. K. Adhikari, L. Salasnich. Phys. Rev. A 78, 043616 (2008).
- [2] L. Salasnich, Laser Phys. 12, 198 (2002).
- [3] S. K. Adhikari, L. Salasnich. New J. Phys. 11, 023011 (2009).
- [4] Markus G, C. A. Regal and D. S. Jin. 2003, Nature 426 (2003).
- [5] F. K. Abdullaev, J. G. Caputo, R. A. Kraenkel, and B. A. Malomed. Phys. Rev. A 67, 013605 (2003).
- [6] C. A. G. Buitrago and S. K. Adhikari. To be published.
- [7] D. M. Eagles, Phys. Rev. 186, 456 (1969).
- [8] Sadhan K. Adhikari, M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. Fortes, M. A. Solís, M. de Llano, Ariel A. Valladares, and O. Rojo, Phys. Rev. B 62, 8671 (2000).
- [9] S. Giorgini, L. Pitaevskii and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. 80, 1215 (2008).
- [10] S. K. Adhikari, Phys. Rev. A 79, 023611 (2009).

APÊNDICE A - Off-diagonal long ranged order

A matriz densidade de uma partícula esta definida como

$$\rho_1(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}') \rangle, \quad (\text{A.1})$$

que usando as transformações de the Fourier

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^+(\vec{r}) &= \frac{1}{v^{1/2}} \sum_k \exp[-ik \cdot r] a_k^+, \\ \hat{\psi}(\vec{r}) &= \frac{1}{v^{1/2}} \sum_k \exp[ik \cdot r] a_k, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

toma a forma

$$\begin{aligned} \rho_1(\vec{r} - \vec{r}') &= \left\langle \frac{1}{v^{1/2}} \sum_k \exp[-ik \cdot r] a_k^+ \frac{1}{v^{1/2}} \sum_{k'} \exp[ik' \cdot r'] a_{k'} \right\rangle \\ &= \frac{1}{v} \sum_k \exp[-ik \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] \langle a_k^+ a_k \rangle \\ &= \frac{1}{v} \sum_k \exp[-ik \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] \rho(k - k'), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

a qual é a transformação de Fourier da distribuição no espaço de momentos $\rho(k - k')$. No espaço das coordenadas a matriz densidade é zero para $(\vec{r} - \vec{r}') \rightarrow \infty$. Porem, no espaço dos momentos

$$\rho(k - k') = N_0 \delta(k - k') + \tilde{\rho}(k - k'), \quad (\text{A.4})$$

é diferente de zero para a mesma condição. Aqui temos definido no limite termodinâmico o termo de macro-ocupação do estado de partícula única $N_0 \delta(k - k')$ que coincide com o momento zero $p = 0$, e a contribuição dos outros estados $\tilde{\rho}(k - k')$. Esta macro-ocupação do estado de partícula única serve como definição geral da condensação de Bose-Einstein BEC. Tomando (4) e substituindo em (3)

teremos

$$\begin{aligned}\rho_1(\vec{r}-\vec{r}') &= \frac{1}{v} \sum_k \exp[-ik \cdot (\vec{r}-\vec{r}')] [N_0\delta(k-k') + \tilde{\rho}(k-k')] \\ &= \frac{N_0}{v} + \frac{1}{v} \sum_k \exp[-ik \cdot (\vec{r}-\vec{r}')] \tilde{\rho}(k-k'),\end{aligned}\quad (\text{A.5})$$

e a matriz densidade para $r-r' \rightarrow \infty$ tera o comportamento

$$\rho_1(\vec{r}-\vec{r}')_{r-r' \rightarrow \infty} \rightarrow N_0/v \quad (\text{A.6})$$

que pode ser escrita como

$$\langle \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}') \rangle_{r-r' \rightarrow \infty} \rightarrow n_0, \quad (\text{A.7})$$

onde $n_0 = N_0/v$. Este comportamento da matriz densidade para $r-r' \rightarrow \infty$ e comumente chamado "off-diagonal long range order". Sempre que Eq. (7) for valida poderemos identificar o operador de campo como

$$\hat{\psi}(\vec{r}) \rightarrow \sqrt{n_0}, \quad (\text{A.8})$$

e como sabemos $\langle a_k^+ a_k \rangle = N$ o que tem como resultado $\hat{\psi}_0(\vec{r}) \rightarrow \sqrt{\langle a_0^+ a_0 \rangle} = \sqrt{n_0} \gg 1$ devido a macro-ocupação do condensado. Desta forma poderemos escrever

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\vec{r}) &= \sum_i \varphi_i \hat{a}_i = \varphi_0 \hat{a}_0 + \delta \\ &= \psi_0 + \delta,\end{aligned}\quad (\text{A.9})$$

onde como já foi falado o primeiro termo e devido ao estado macro-ocupado e o segundo aos outros estados que não são macro-ocupados na hora da condensação. Finalmente consideraremos a aproximação de Bogoulivov para escrever

$$\hat{a}_0 \rightarrow \sqrt{n_0}, \quad (\text{A.10})$$

com o que o operador de campo pode ser escrito em termos do parâmetro de ordem

$$\langle \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle = \psi_0 = \varphi_0 \sqrt{n_0} \quad (\text{A.11})$$

APÊNDICE B - Interações Efetivas

Na aproximação de Born o comprimento de espalhamento é dado pela relação

$$a_{Born} = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int dr V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{m}{4\pi\hbar^2} V(0), \quad (\text{B.1})$$

onde temos escrito $V(\vec{r} - \vec{r}') = V(0)\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ o potencial de contato, correspondendo a $|r - r'| = 0$. Nesta mesma aproximação a matriz de transição T pode ser escrita como

$$T(0) = \langle \phi | V(\vec{r}) | \phi \rangle = V(0) \quad (\text{B.2})$$

aqui temos escrito $T(0)$ para caracterizar a matriz a energia zero. Podemos relacionar o valor da constante $V(0)$ com a matriz $T(0)$ na aproximação de Born

$$T(0) = V(0) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_{Born} \quad (\text{B.3})$$

desta forma a termo não linear na equação de GP será escrito como

$$E_{int} \simeq T(0) |\Psi|^2 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_{Born} |\Psi|^2. \quad (\text{B.4})$$

Como foi usado no capítulo 1 e 3 a constante $V(0)$ e a mesma constante g .

APÊNDICE C - Dedução da equação de GP

C.1 Equação de Heisenberg

O uso das equações (1.2) e (1.9) dentro da equação de Heisenberg (1.8) tem como resultado os comutadores

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{2m} \int [\hat{\Psi}, \nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla \hat{\Psi}'] d\vec{r}' + \frac{1}{2} \int [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger V(r - r') \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'] d\vec{r}' d\vec{r}, \quad (\text{C.1})$$

aqui a função $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ não depende das variáveis de integração e pode ser colocada dentro das integrais sem problema. As relações de comutação para os campos

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(r')] = \delta(\vec{r} - r'), \quad (\text{C.2})$$

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}(r')] = 0. \quad (\text{C.3})$$

O primeiro comutador na equação (C.1) será

$$[\hat{\Psi}, \nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla \hat{\Psi}'] = [\hat{\Psi}, \nabla \hat{\Psi}^\dagger] \nabla \hat{\Psi}' + \nabla \hat{\Psi}^\dagger [\hat{\Psi}, \nabla \hat{\Psi}'],$$

onde o operador Laplaciano atua só sob a coordenada r' pelo que podemos escrever

$$\nabla [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^\dagger] \nabla \hat{\Psi}' + \nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}'] = \left(\nabla \delta(\vec{r} - r') \right) \nabla \hat{\Psi}' + \nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}'] = \left[\nabla \delta(\vec{r} - r') \right] \nabla \hat{\Psi}',$$

Integrando por partes esta ultima relação ($\int \nabla \delta(\vec{r} - r') \Theta = - \int \delta(\vec{r} - r') \nabla \Theta$) podemos escrever a primeira relação de comutação para a equação (C.1)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int [\hat{\Psi}, \nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla \hat{\Psi}'] d\vec{r}' = - \frac{\hbar^2}{2m} \int \delta(\vec{r} - r') \nabla^2 \hat{\Psi}' d\vec{r}' = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}(\vec{r}, t). \quad (\text{C.4})$$

O segundo comutador na Eq. (C.1) é

$$\frac{1}{2} \int [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger V(r' - r') \hat{\Psi}' \hat{\Psi}''] d\vec{r}' d\vec{r},$$

que pode ser calculado usando de novo as relações de comutação (1.2) e o fato de que o potencial deve comutar com o operador de campo

$$\frac{1}{2} \int [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^{\dagger\prime\prime}] \hat{\Psi}^{\dagger\prime\prime\prime} V(r'' - r'') \hat{\Psi}'' \hat{\Psi}'' dr'' dr^{\vec{j}} + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^{\dagger\prime} [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^{\dagger\prime\prime}] V(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'' dr'' dr^{\vec{j}}, \quad (\text{C.5})$$

usando (C.2) e (C.3) teremos

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}^{\dagger\prime} V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'' dr'' dr^{\vec{j}} + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^{\dagger\prime} \delta(r - r'') V(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'' dr'' dr^{\vec{j}} \\ &= \frac{1}{2} \left[\int \hat{\Psi}^{\dagger\prime} V(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}'' dr'' \right] \hat{\Psi} + \frac{1}{2} \left[\int \hat{\Psi}^{\dagger\prime} V(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}' dr^{\vec{j}} \right] \hat{\Psi}, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

onde temos tomada vantagem da função delta $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ e $\delta(r - r'')$ para resolver a integral. Estas duas quantidades podem ser somadas para finalmente ter

$$\frac{1}{2} \int [\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^{\dagger\prime} \hat{\Psi}^{\dagger\prime\prime\prime} V(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}' \hat{\Psi}''] dr'' dr^{\vec{j}} = \left[\int \hat{\Psi}^{\dagger\prime} V(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}' dr^{\vec{j}} \right] \hat{\Psi}. \quad (\text{C.7})$$

A soma dos resultados (C.4) e (C.7) a equação de Heisenberg será

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) dr + \left[\int \hat{\Psi}^{\dagger\prime} V(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}' dr^{\vec{j}} \right] \hat{\Psi}. \quad (\text{C.8})$$

O segundo termo desta equação tem que ser resolvido usando as condições físicas do gás diluído, as quais já foram discutidas no primeiro capítulo

$$V(\vec{r}'' - \vec{r}') = V_{\text{eff}} = g\delta(\vec{r}'' - \vec{r}'), \quad (\text{C.9})$$

com o uso deste potencial de interação e o aproximação de Bogoliubov para o campo $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ finalmente teremos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi_0(\vec{r}, t), \quad (\text{C.10})$$

que é a conhecida equação de Gross-Pitaevskii.

C.2 Aproximação de Hartree

O jeito mais simples em que podemos aproximar a função de onda de muitos corpos Ψ_N é usando a aproximação de Hartree, quer dizer, assumimos que todos os bosons ocupam o mesmo estado

$$\Psi_N(r_1 r_2 \dots r_N; t) = \prod_{i=1}^N \chi_0(r_i, t), \quad (\text{C.11})$$

onde $\chi_0(r_i, t)$ é alguma função de onda normalizada de partícula única. Chamaremos $\chi_0(r_i, t)$ a função de onda do condensado. O Hamiltoniano efetivo será

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) \right] + V(0) \sum_i \delta(r_i - r_j) \quad (\text{C.12})$$

o uso de H na equação de Hartree para uma partícula tera como resultado

$$\left[\frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) + \int dr V(r - r') \sum_i |\chi_i(\vec{r})|^2 \right] \chi_i(\vec{r}) = E \chi_i(\vec{r}), \quad (\text{C.13})$$

da onde vamos tirar o termo de interação para montar a equação para estados não estacionários que como já vimos no capítulo 1 não esta dado pela equação anterior porque o valor proprio da função $\chi_0(\vec{r})$ é o potencial químico e não a energia. Para estados não estacionários, assumindo que Ψ_N tem realmente a forma (C.11) é claro que a equação que cumpre $\chi_0(r_i, t)$ é a equação de Schrodinger para partícula única

$$i\hbar \frac{\partial \chi_0(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \chi_0(\vec{r}, t) + V_{\text{ext}}(\vec{r}, t) \chi_0(\vec{r}, t). \quad (\text{C.14})$$

Somando o potencial de interação

$$V_{\text{eff}} = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \sum_{j \neq i} |\chi_j(r_i, t)|^2 \cong \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} N |\chi_0(\vec{r}, t)|^2, \quad (\text{C.15})$$

onde temos aproximado $N - 1 \approx N$ para um número de partículas grande. Na equação (C.14) teremos finalmente

$$i\hbar \frac{\partial \chi_0(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \chi_0(\vec{r}, t) + V_{\text{ext}}(\vec{r}, t) \chi_0(\vec{r}, t) + \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} N |\chi_0(\vec{r}, t)|^2 \chi_0(\vec{r}, t). \quad (\text{C.16})$$

com a normalização dada pela expressão $\int dr |\chi_0(\vec{r}, t)|^2 = 1$. A Eq. (C.16) em termos do parâmetro de ordem $\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{N} \chi_0(\vec{r}, t)$ será

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V_{\text{ext}}(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) + \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t). \quad (\text{C.17})$$

com a normalização neste caso dada por $\int dr |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = N$.

APÊNDICE D - Invariância de Galileo da função de onda do condensado

D.1 Equação GP

Mostraremos como o parâmetro de ordem que descreve o fenômeno da condensação muda dependendo do sistema coordenado no qual observamos o sistema. Isso significa que o parâmetro de ordem não é invariante sob transformações de Galileo. A mudança na fase do parâmetro de ordem esta ligada com o fenômeno da superfluidez uma vez que essa fase do parâmetro de ordem é a fase que define a velocidade do superfluido. O parâmetro de ordem tem que se escrever da forma

$$\Psi'(\vec{r}, t) = \Psi(r - vt, t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(mv \cdot r - \frac{1}{2}mv^2t)\right], \quad (\text{D.1})$$

para manter a equação de GP invariante. Aqui v é a velocidade do superfluido. No equilíbrio o parâmetro de ordem tem a forma conhecida $\Psi_0 = n_0^{1/2} \exp[-i\mu t/\hbar]$ enquanto no marco de referência onde o superfluido se movimenta com velocidade v o parâmetro de ordem toma a forma $\Psi_0 = n_0^{1/2} \exp[iS]$, onde a fase esta definida por

$$S = \frac{1}{\hbar}(mv \cdot r - (\frac{1}{2}mv^2 + \mu)t) \quad (\text{D.2})$$

que define a velocidade do superfluido $v_s = \frac{\hbar}{m}\nabla S$. A substituição da Eq. (D.1) dentro da equação de GP com o uso das transformações de Galileo

$$\begin{aligned} r' &= r - vt, \\ t &= t', \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

e os operadores transformados

$$\begin{aligned} \nabla'^2 &= \nabla^2, \\ \frac{\partial}{\partial t'} &= \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}, \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

será (neste caso só para a direção x , a generalização a 3 dimensões é imediata)

$$\begin{aligned} & i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \exp \left[\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi \exp \left[\frac{i}{\hbar} (mv \cdot r - \frac{1}{2}mv^2t) \right], \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

calculando o lado esquerdo da equação (D5)

$$\begin{aligned} & i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] \\ &= i\hbar \left[\dot{\Psi} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] + \frac{i}{\hbar} \Psi \frac{1}{2}mv^2 \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] \right] \\ & \quad + i\hbar v \left[\Psi_x \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] - \Psi \frac{i}{\hbar} mv \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] \right], \end{aligned}$$

onde $\dot{\Psi} = \partial\Psi/\partial t$ e $\Psi_x = \partial\Psi/\partial x$ e o operador ∇ atua neste caso por facilidade só sob a coordenada x . Calculando o lado direito (D5)

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left(\Psi \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Psi_{xx} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] - \Psi_x \frac{i}{\hbar} mv \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] \right) \\ & \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\Psi_x \frac{i}{\hbar} mv \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] + \Psi \left[-\frac{i}{\hbar} mv \right]^2 \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (mvx - \frac{1}{2}mv^2t) \right] \right), \end{aligned}$$

encontramos depois de somar os dois termos

$$\begin{aligned} & i\hbar \dot{\Psi} - \frac{1}{2}mv^2\Psi + i\hbar v \Psi_x + mv^2\Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_{xx} + i\frac{\hbar}{2}v \Psi_x + i\frac{\hbar}{2}v \Psi_x + \frac{1}{2}mv^2\Psi + \left[V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi, \end{aligned}$$

que finalmente será

$$i\hbar \dot{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_{xx} + \left[V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi$$

que é a equação de GP. O termo completo da energia cinética é recuperado quando usamos o operador ∇ atuando nas direções x, y e z

D.2 Equação DF

Na equação DF o parâmetro de ordem muda pela fato que a equação tem um termo de energia cinética diferente

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \exp \left[-\frac{i}{\hbar}(2mvx - mv^2t) \right] \\ = \left[-\frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g \left| \Psi'_0(\vec{r}, t) \right|^{4/3} \right] \Psi \exp \left[-\frac{i}{\hbar}(2mvx - mv^2t) \right], \quad (\text{D.6})$$

o calculo do primeiro termo da como resultado

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \exp \left[-\frac{i}{\hbar}(2mvx - mv^2t) \right] = i\hbar \dot{\Psi} + i\hbar v \Psi_x + mv^2 \Psi \quad (\text{D.7})$$

o segundo termo tem como resultado

$$-\frac{\hbar^2}{4m} \Psi_{xx} + i\hbar v \Psi_x + mv^2 \Psi + \left[V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g \left| \Psi'_0(\vec{r}, t) \right|^{4/3} \right] \Psi \quad (\text{D.8})$$

a soma dos dois termos resulta

$$i\hbar \dot{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{4m} \Psi_{xx} + \left[V_{\text{ext}}(\vec{r}) + g \left| \Psi'_0(\vec{r}, t) \right|^{4/3} \right] \Psi \quad (\text{D.9})$$

que é a equação DF. Onde de novo por facilidade as contas estão feitas só na direção x mais sao facilmente generalizadas.

APÊNDICE E - Superfluidez

E.1 Teoria Hidrodinâmica de superfluidos (Bosons): Temperatura zero

A teoria macroscópica que descreve os superfluidos a temperatura zero é conhecida como Hidrodinâmica; as equações da Hidrodinâmica coincidem com a descrição feita pela equação de Gross-Pitaevskii sem o termo de energia cinética e constituem a ligação mais importante entre a condensação de Bose-Einstein e o fenômeno da superfluidez. A descrição do estado macroscópico do superfluido pode ser feita em termos de duas variáveis, a densidade e a velocidade do superfluido. A equação que descreve a densidade esta dada pela equação da continuidade

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (j) = 0, \quad (\text{E.1})$$

que expressa a conservação da massa. A segunda equação descreve a conservação do momento linear

$$m \frac{\partial v_s}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} m v_s^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \mu_0 \right) = 0, \quad (\text{E.2})$$

onde o potencial químico μ_0 é avaliado localmente tomando o valor do fluido uniforme a densidade n . Nesta equação temos tido em conta a presença de um potencial externo. O termo de pressão quântica para bosons esta dado por

$$T_{QP} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \quad (\text{E.3})$$

e a velocidade do superfluido esta definida pela fase do parâmetro de ordem

$$v_s = \frac{\hbar}{m} \nabla S \quad (\text{E.4})$$

Como foi mostrado as equações da Hidrodinâmica (E1) e (E2) podem ser derivadas a partir da equação de Gross-Pitaevskii (desprezando o termo de energia cinética), porém as equações da Hidrodinâmica são mais gerais e podem-se aplicar a sistemas que interagem fortemente. O termo de pressão quântica dentro da equação de Gross-Pitaevskii terá como resultado as equações da Hidrodinâmica

mostradas no capítulo 1.

E.2 Teoria Hidrodinâmica de superfluidos (Férmions): Temperatura zero

Nas temperaturas suficientemente baixas um gás de Fermi interagindo com forças atrativas sofrem uma transição de fase ao estado superfluido (Transição BCS). O comportamento macroscópico dos superfluidos fermionicos neutros esta descrita pelas equações da Hidrodinâmica. Na temperatura zero as equações descreverão a densidade n e velocidade do superfluido. As equações tomam a forma

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \nabla \cdot (nv_s), \quad (\text{E.5})$$

Para a densidade, que é a equação da continuidade e

$$m \frac{\partial}{\partial t}v_s + \nabla \left[\frac{1}{2}mv^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \mu[n] \right], \quad (\text{E.6})$$

para a velocidade do superfluido. Aqui μ é o potencial químico por partícula, fixado pela equação de estado do gás ideal. O termo de pressão quântica entra nas equações da superfluidez da forma

$$T_{QP} = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}}. \quad (\text{E.7})$$

A fase do parâmetro de ordem define a velocidade do superfluido fermiônico como

$$v_s = \frac{\hbar}{2m} \nabla \theta, \quad (\text{E.8})$$

que constitui a principal diferença entre as equações da Hidrodinâmica para Bósons e Férmions. Nesta equação m é a massa da partícula e esta relacionada com a massa do par pela relação $2m = m_p$. Na descrição Hidrodinâmica dos superfluidos fermionicos temos levado em conta que os dois componentes de spin ($n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = \frac{N}{2}$) são iguais e movem em fase (densidade e velocidade).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)