

Instituto de Física Teórica Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.003/10

### Superfluido de Fermi Aprisionado com Variação de Interação Atômica

Luis Ever Young Silva

Orientador

Prof. Dr. Sadhan Kumar Adhikari

Fevereiro de 2010

# Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

"A mi familia."

"Escribir un libro no puede dar sentido a tu vida... Escribir un libro sólo es un objetivo. El sentido de una vida está más allá de los objetivos."

"Futurum aedificamus per tempus..."

#### Agradecimentos

Agradeço à minha família pela sua infinita fê em mim, a fortaleza da minha mãe, o apoio incondicional dos meus irmãos, os sonhos de Niko e os sorrisos de meus sobrinhos sempre me acompanharam cada dia no Brasil.

Aos colegas do IFT que geraram um laço de amizade fundamentado no respeito e bons momentos.

Aos meus amigos na Colômbia, que sempre ficaram nos meus pensamentos da mesma forma que eu estive-nos de eles.

Agradeço aos professores e funcionários do IFT.

Agradeço ao meu orientador, Sadhan Kumar Adhikari, pela liberdade e compreensão com as que me permitiu trabalhar, pelas oportunidades que me ofereceu e pela forma sincera como fui orientado.

À Capes, pelo apoio financeiro.

#### Resumo

Neste trabalho consideramos um gás diluído de átomos de Fermi a baixas temperaturas, com igual numero de átomos de espin para acima  $(\uparrow)$  e espin para abaixo  $(\downarrow)$ formando um conjunto de N pares de átomos fermiônicos prisioneiros pela ação de uma armadilha com diferentes simetrias, nos distintos limites: de interação fraca, no limite da unitariedade, e no chamado crossover BEC-unitariedade, empregando uma equação de funcional densidade cujas soluções descrevem adequadamente as características principais do superfluido, como são: a densidade de partículas, o tamanho médio, o potencial químico e a energia do sistema.

**Palavras Chaves**: Superfluido de Fermi; equação não linear; interação atômica; solução numérica; crossover BEC-unitariedade.

**Áreas do conhecimento**: Ciências Exatas e da Terra; Física; Física Teórica; Matéria Condensada.

#### Abstract

In this work we considered a Fermi gas diluted at low temperatures, to equal number of atoms with spin up  $(\uparrow)$  and spin down  $(\downarrow)$  into a system of N fermion pairs prisoners for the action of a trap with different symmetries, in different limits: weak-coupling, unitarity limit, and the call crossover BEC-unitarity, using a density-functional equation whose solutions describe some characteristics of the superfluid appropriately, for example: density profiles of particles, radius, chemical potential and the energy of the system.

**Key words**: Superfluid Fermi gas; nonlinear equation; numeric solution; atomic interaction; crossover BEC-unitarity.

# Sumário

1	Introdução					
2	Equ	Equação de Funcional de Densidade 8				
	2.1	Equação DF Anisotrópica Dependente do Tempo	8			
	2.2	Estado de Superfluidez	9			
		2.2.1 Equações da Hidrodinâmica	10			
		2.2.2 Quantização do Vórtice	12			
	2.3	Forma Adimensional	13			
	2.4	4 Equação DF Estacionária				
	2.5	Equação em Simetria Axial	15			
	2.6	Redução a Uma Dimensão	16			
	2.7	Redução a Duas Dimensões	L7			
	2.8	Equação em Simetria Circular	19			
3	Potencial Químico de Volume 20					
	3.1	Limite BCS	20			
	3.2	Limite BEC	21			
	3.3	Limite da Unitariedade	22			
	3.4	Região de Interação Atrativa				
	3.5	Região de Interação Repulsiva				
	3.6	Continuidade na primeira derivada do $\mu$	24			
4	Equação DF em Diversos Casos 29					
	4.1	Equação Para o Limite BCS	29			
		4.1.1 Equação BCS Numa Dimensão	30			
	4.2	Equação Para o Limite BEC	31			
		4.2.1 Equação BEC em Duas Dimensões	32			
	4.3	Equação no Limite da Unitariedade	34			
		4.3.1 Equação na Unitariedade 2D	34			
		4.3.2 Redução 2D na Aproximação de Thomas-Fermi	35			

	4.4	Equaç	ao DF na Região Molecular			
		4.4.1	Região Molecular para Simetria Axial			
		4.4.2	Região Molecular para 2D G			
		4.4.3	Região Molecular para 2D TG			
		4.4.4	Região Molecular Simetria Circular			
5	Solução da Equação DF 42					
	5.1	Descr	ição Geral do Método de Solução			
		5.1.1	Solução Numérica			
		5.1.2	Aproximação Variacional			
		5.1.3	Aproximação de Thomas Fermi			
	5.2	Soluçã	ăo Numérica da Equação DF em Simetria Axial			
		5.2.1	Resultados em Simetria Axial			
	5.3	Soluçã	ăo Numérica em estado de Vórtice			
		5.3.1	Resultados em Estado de Vórtice			
	5.4	Soluçã	ăo Numérica em 2D			
A	Solução da Equação DF 1D no Limite BCS 58					
	A.1	Soluçã	ăo Numérica			
		A.1.1	Potencial Químico 1D			
		A.1.2	Resultados Numéricos 1D			
	A.2	Aprox	imação Variacional			
		A.2.1	Forma da Lagrangeana			
		A.2.2	Equações Variacionais			
		A.2.3	Resultados Variacionais 1D			
	A.3	Aprox	imação de Thomas-Fermi			
		A.3.1	Resultados Thomas-Fermi 1D			
в	Sol	ução d	a Equação DF 2D para BEC 66			
	B.1	Soluçã	ăo Numérica			
		B.1.1	Potencial Químico 2D			
		B.1.2	Resultados Numéricos 2D			
	B.2	Aprox	imação Variacional			
		B.2.1	Forma da Lagrangeana			
		B.2.2	Equações Variacionais			
		B.2.3	Resultados Variacionais 2D			
	B.3	Aprox	imação de Thomas Fermi			
		B.3.1	Resultados Thomas Fermi			

# **Capítulo 1**

# Introdução

Na natureza todos os átomos são classificados como bósons ou férmions dependendo de seu valor de espin sejá inteiro ou semi inteiro e seus comportamentos são notavelmente diferentes quando a temperatura dos sistemas está muito perto do zero absoluto [1].

Para um gás de átomos aprisionado num potencial harmônico a temperatura zero no caso dos bósons eles vão ocupar um mesmo estado de mínima energia disponível (fig. 1.1 A) num fenômeno que conhecemos como o condensado de Bose-Einstein (BEC), mas os férmions ocuparão os estados de mínima energia disponíveis satisfazendo o princípio de exclusão de Pauli, do jeito que dois férmions com números quânticos iguais não podem ocupar um mesmo estado, e como resultado final os estados permitidos são ocupados por pares de férmions com espin oposto num arranjo conhecido como o mar de Fermi (fig. 1.1 B).



Figura 1.1: Gás de átomos num potencial harmônico a temperatura zero. (A) Bósons criam o estado BEC e (B) férmions formam o mar de Fermi.

Desta forma a condensação não está permitida para os átomos fermiônicos, mas

na ação de uma interação atrativa os férmions podem alcançar um novo estado levando o sistema ao chamado superfluido de Fermi (SF) que precisa de uma descrição mais complexa.

A baixas temperaturas num gás de átomos diluídos as interações são descritas por um único parâmetro chamado o comprimento de espalhamento *a*. O sinal do comprimento de espalhamento permite ter uma idéia da interação efetiva que existe entre os componentes do sistema já que para valores negativos (positivos) do *a* associamos uma interação atrativa (repulsiva).



Figura 1.2: Comprimento de espalhamento em função do potencial de interação para a região atrativa entre fermions e a região de interação repulsiva para os pares de átomos fermiônicos.

Os primeiros estudos quânticos do SF permitiram a Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS) estabelecer a teoria microscópica da supercondutividade, a conhecida teoria BCS, válida no limite de interação fraca (quando o comprimento de espalhamento de férmion-férmion é muito pequeno  $a \rightarrow -0$ ).

A teoria BCS está fundamentada na idéia que pela ação de uma interação atrativa (a < 0) dois férmions, com espines iguais e opostos  $(\uparrow\downarrow)$ , criam o chamado par de Cooper gerando um estado de menor energia através do qual o sistema SF evidência um comportamento universal que foi aplicado adequadamente no estudo das propriedades dos supercondutores convencionais [2].

Fora do limite de interação fraca, o comprimento de espalhamento pode-se tornar infinito (fig. 1.2), assim quando incrementamos a intensidade da interação atrativa entre os dois férmions do par de Cooper a teoria BCS não pode ser empregada para estudar o SF, e a descrição do sistema se torna ainda mais complexa quando no chamado limite da unitariedade  $(a \rightarrow \pm \infty)$  os pares de átomos fermiônicos formam moléculas diatômicas (dímeros) que são bósons e o sistema passa para uma região de interação repulsiva (a > 0) entre os dímeros que então podem alcançar o estado BEC.

Um fato experimental muito importante é a possibilidade de transitar entre as

regiões de interação atrativa e repulsiva mudando o sinal do comprimento de espalhamento atravéz de variações dos campos magnéticos da armadilha (figura 1.3) e permitir assim a extensão dos estudos desde o limite BCS até o fenômeno BEC num SF [6], [7], [8].



Figura 1.3: A mudança no comprimento de espalhamento com variações do campo magnético [7] permite experimentalmente transitar entre a região de interação atrativa e repulsiva.

Desta forma existe para o SF com variação da interação atômica um cruzamento das regões de interação atrativa e repulsiva chamado o crossover BCS-BEC (figura 1.4).

Existem muitos trabalhos teóricos e experimentais desenvolvidos com o interesse de estudar este sistema de átomos em baixas temperaturas, de maneira que temos ferramentas para estudar o sistema de fermions no limite BCS ou o estado BEC dos dímeros dentro do limite de acoplamento fraco, da mesma forma entorno do limite da unitariedade conhecemos que o SF é dominado pela repulsão de Pauli e exibe um comportamento universal ([4], [5]), permitindo uma descrição simplificada independente do comprimento de espalhamento neste limite de interação forte, mais até hoje nem uma descrição teórica é completa e adequada no crossover BCS-BEC para qualquer valor do comprimento de espalhamento.

Inicialmente é necessário lembrar que uma solução do problema de muitos corpos, que descreveria N átomos (ou dímeros) interatuando pode ser um cálculo muito complexo e impraticável para sistemas com numero de partículas muito grande. De forma que atualmente a maior parte dos resultados que podemos encontrar na literatura (no estudo do estado BEC) são realizados através da aproximação de campo-meio ou dentro da solução *ab initio* usando o método de simulação Monte Carlo [3].

Através da teoria de campo-meio podemos obter a equação não linear de Gross-Pitaevskii (GP) [9] que realiza uma descrição adequada para um gás diluído de bósons no limite BEC, ou considerando termos de ordem superior na expressão não linear podemos encontrar a equação GP modificada (MGP) [10], de forma que estas duas equações permite estudar o sistema no limite de fraca interação repulsiva  $(a \rightarrow +0)$ .

O problema com as equaçães GP e MGP é que o termo não linear em cada uma de elas não pode ser bem definido no limite de interação forte , para  $a \rightarrow \infty$ , e torna inapropriadas as descrições do sistema com não linearidade muito grande (nós mostraremos isto em diferentes oportunidades ao longo deste trabalho).

Assim temos que o método de simulação Monte Carlo está limitado para um numero pequeno de partículas e a descrição feita pela aproximação de campo meio não é apropriada fora do limite de interação fraca. Então nasce uma das perguntas que da origem a nosso trabalho: É possível realizar uma descrição diferente ao longo do crossover BEC-unitariedade válida para qualquer número de partículas ou valor de comprimento de espalhamento?



Figura 1.4: Crossover BCS-BEC para o superfluido de Fermi com variação de interação atômica. No limite BCS temos fraca interação atrativa entre os átomos de Fermi, no limite BEC fraca interação repulsiva entre os dímeros e a unitariedade é o limite de interação forte.

Para construir uma resposta desta pergunta neste trabalho consideramos um gás diluído de átomos de Fermi, com igual número de átomos de espin para acima  $(\uparrow)$  e espin para abaixo  $(\downarrow)$  formando um conjunto de N pares prisioneiros pela ação de uma armadilha, nos diferentes limites de interação fraca, no limite da unitariedade, e no chamado crossover BEC-unitariedade empregando uma equação não linear de funcional densidade (DF) cujas soluções descrevem em boa forma as características principais do SF, como a densidade de partículas, o tamanho e o potencial químico do sistema, ao longo da região molecular.

Nós estudamos a forma da equação DF e a sua correspondência com as equações da hidrodinâmica muito empregadas na descrição dos sistemas superfluidos. Mostramos a forma em que podemos estudar a geração do estado de vórtice através da equação DF em conformidade com as evidencias experimentais [13] que exibem a existência dos vórtices ao longo de tudo o crossover BCS-BEC realçãndo a geração do

estado de superfluidez no sistema (fig. 1.5).



Figura 1.5: A geração de vórtices num gás díluido para átomos de <sup>6</sup>Li [13] mostra a superfluidez do sistema ao longo de tudo o crossover BCS-BEC.

Apresentamos uma forma especial de construir a correspondente expressão para o termo não linear nos diferentes limites de interesse: os limites de acoplamento fraco (BCS e BEC) o limite de interação forte (a unitariedade) e no crossover BCS-BEC de forma que a nossa equação não linear pode ser aplicada para qualquer valor do comprimento de espalhamento e sua solução numérica pode ser achada para qualquer número de partículas. Desta forma aplicamos a equação DF no estudo dos diversos limites e construímos uma descrição valida na região molécular para um sistema confinado numa armadilha de simetria axial.

Outro importante assunto que estudamos é a redução do sistema superfluido para uma e duas dimensões, com a idéia de simplificar a descrição do SF consideramos que a dinâmica pode ficar limitada a um plano só ou ao longo de um eixo particular. Para isto uma equação efetiva bidimensional ou unidimensional pode ser estabelecida baseados na equação DF tridimensional.

Experimentalmente no caso de uma armadilha de simetria axial com forte confinamento transversal, temos o sistema com forma de cigarro e então podemos construir uma equação efetiva 1D; assim mesmo para uma armadilha anisotrópica em duas dimensões com forte confinamento axial temos um sistema tipo disco e consideramos assim uma redução bidimensional. Apresentamos duas abordagens diferente para esta redução bidimensional que permite estender a conclusão do nosso trabalho ao longo da região molécular fora do limite de acoplamento fraco.

Para a redução dimensional tomamos a dinâmica do sistema restrita num plano (ou num eixo só) e consideramos uma forma para o estado estacionário na direção axial (ou longo de um eixo particular) que permite integrar uma (ou duas) das variáveis, levando a uma descrição efetiva em duas (ou uma) dimensões.

As soluções desta equação efetiva em duas dimensões tem um menor custo de programação e as suas descrições do sistema SF são comparadas com a solução radial do problema de simetria axial nos limites de acoplamento fraco e forte interação.

## **Capítulo 2**

# Equação de Funcional de Densidade

Nós estudamos as propriedades de um gás de átomos de Fermi superfluido, composto de igual número de férmions com espin up  $(\uparrow)$  e espin down  $(\downarrow)$ , completamente emparelhados formando um conjunto de N pares.

Empregamos uma equação de funcional de Densidade (DF) [11], [12] completamente equivalente com a descrição feita através das equações da hidrodinâmica \*, que tem a forma da equação de Schrödinger mas contem um termo não linear:

$$i\frac{\partial}{\partial\tau}\Psi(\mathbf{r},\tau)\propto\left[-\overrightarrow{\nabla}^{2}+U(\mathbf{r})+\mu_{0}\left(n,a\right)\right]\Psi(\mathbf{r},\tau)$$
(2.1)

Onde o termo não linear  $\mu_0$  corresponde com o potencial químico de volume, função da densidade de partículas (n) e o comprimento de espalhamento (a), dado por:

$$\mu_0(n,a) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{E}{N}\right) n \tag{2.2}$$

Onde  $\varepsilon$  é a densidade de energia  $\varepsilon = E/V = (E/N) n$ . E importante realçar que o potencial químico de volume terá diferentes formas e interpretações para as diversas regiões onde podemos estudar o sistema superfluido.

#### 2.1 Equação DF Anisotrópica Dependente do Tempo

Assim como aconteceu no caso da supercondutividade conhecemos que as manifestações dos sistemas supefluidos são melhor estudadas empregando o conceito de pares, desta

<sup>\*</sup>A correspondência da equação DF com a hidrodinâmica vai-se estudar através da geração do estado de vórtice na página 10.

forma escrevemos todas as proximas ecuações para um sistema SF através de quantidades de pares (ou dímeros) de átomos fermiônicos.

A temperatura zero, a função de onda do superfluido de Fermi dependente do tempo (na posição r num tempo  $\tau$ ), pode-se descrever pela seguinte equação de funcional densidade (equação DF):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\Psi\left(\overline{x},\overline{y},\overline{z};\tau\right) = \left[-\frac{\hbar^{2}}{2m}\overrightarrow{\nabla}^{2} + U(\overline{x},\overline{y},\overline{z}) + \overline{\mu}_{0}\left(n,\overline{a}\right)\right]\Psi\left(\overline{x},\overline{y},\overline{z};\tau\right)$$
(2.3)

Onde as quantidades  $m, n, \overline{\mu}_0$  são a massa a densidade e o potencial químico de volume para os dímeros ou pares de átomos fermiônicos e  $U(\mathbf{r})$  é o potencial da armadilha que mantém prisioneiros os átomos do sistema.

A equação DF está normalizada da forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\overline{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\overline{y} \int_{-\infty}^{\infty} d\overline{z} \, |\Psi(\overline{x}, \overline{y}, \overline{z}; \tau)|^2 = 1,$$
(2.4)

Do jeito que a densidade de partículas está relacionada com o parâmetro de ordem (a função de onda do sistema) através de:

$$n = N |\Psi(\overline{x}, \overline{y}, \overline{z}; \tau)|^2$$
(2.5)

Onde N é o número total de dímeros ou pares.

Agora para um potencial externo (tipo oscilador harmônico) de freqüência  $\omega$ , generalizamos a descrição do superfluido de pares de Fermi numa armadilha anisotrópica em três dimensões, com um potencial dado por:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m_f \left( \omega_x^2 \overline{x}^2 + \omega_y^2 \overline{y}^2 + \omega_z^2 \overline{z}^2 \right)$$
$$U(\overline{x}, \overline{y}, \overline{z}) = \frac{1}{2} m_f \omega^2 \left( \nu^2 \overline{x}^2 + \kappa^2 \overline{y}^2 + \lambda^2 \overline{z}^2 \right)$$
(2.6)

Onde  $\omega_x^2, \omega_y^2$  e  $\omega_z^2$  são as freqüências angulares em cada direção.

Desta forma a expressão 2.3, corresponde com a equação de funcional densidade para um superfluido de Fermi em três dimensões baixo a ação de uma armadilha anisotrópica. Em ela o potencial químico de volume ( $\overline{\mu}_0(\overline{n},\overline{a})$ ) vai ter diferentes formas para a região de interação atrativa ou repulsiva, assim a equação pode ser empregada para descrever pares ou dímeros formados pelos átomos Fermiônicos.

#### 2.2 Estado de Superfluidez

Um dos mais importantes resultados da superfluidez é a resposta na presença de uma rotação, onde o sistema mostra um movimento com restrições conhecido como a geração de vórtices quantizados que desde o ano 2005 tem sido observados experimentalmente em gases diluídos de átomos de Fermi ao longo de tudo o crossover BCS-BEC [13].

#### 2.2.1 Equações da Hidrodinâmica

No seguinte vamos mostrar que a equação DF é equivalente das equações de Landau da hidrodinâmica irrotacional (que descrevem a dinâmica do comportamento macroscópico num superfluido neutral) e aproveitamos alguns resultados importantes para o estudo dos vórtices [14].

Consideramos nesta seção o SF que descreve a equação DF (eq. 2.3) em forma general:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla}^2 + U(\mathbf{r}) + \mu_0(n,a)\right]\Psi(\mathbf{r},t)$$
(2.7)

Multiplicando esta equação por  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ , temos<sup>†</sup>:

$$i\hbar\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\overrightarrow{\nabla}^2\Psi + U(\mathbf{r})|\Psi|^2 + \mu_0(n,a)|\Psi|^2$$

Empregando o fato que tanto o potencial devido à armadilha  $U(\mathbf{r})$  como o potencial químico de volume  $\mu_0(n, a)$  são quantidades reais, tomamos o complexo conjugado desta expressão e fazemos a subtração com as duas equações, para achar:

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi+\Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\overrightarrow{\nabla}^2\Psi-\Psi\overrightarrow{\nabla}^2\Psi^*\right)$$
(2.8)

O qual pode se escrever como:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 + \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\hbar}{2im} \left( \Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right) \right] = 0$$
(2.9)

Esta expressão corresponde com a equação de continuidade para a densidade de partículas  $n = |\Psi|^2$ , na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \vec{\nabla} \cdot (n \mathbf{v}) = 0 \tag{2.10}$$

Onde a velocidade do SF está definida por:

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{2im} \left( \frac{\Psi^* \overrightarrow{\nabla} \Psi - \Psi \overrightarrow{\nabla} \Psi^*}{|\Psi|^2} \right)$$
(2.11)

Agora podemos introduzir uma forma explicita para a função de onda do sistema da forma:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = f(\mathbf{r},t) \exp\left[i S(\mathbf{r},t)\right]$$
(2.12)

Onde  $S(\mathbf{r},t)$  representa a fase da função de onda e  $f(\mathbf{r},t)$  está relacionada com a densidade do sistema por:

$$n = |\Psi|^2 = f^2 \tag{2.13}$$

<sup>&</sup>lt;sup>†</sup>Por simplicidade obviamos os índices r e t da dependência espacial e temporal da função de onda.

Então empregamos a equação 2.12 na expressão 2.11 para a velocidade do sistema temos que:

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{2imf^2} \left( f \,\overrightarrow{\nabla} f + if^2 \,\overrightarrow{\nabla} S - f \,\overrightarrow{\nabla} f + if^2 \,\overrightarrow{\nabla} S \right)$$

Assim encontramos finalmente que a velocidade do SF é o gradiente de um escalar:

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \,\overrightarrow{\nabla}S \tag{2.14}$$

Agora as expressões da hidrodinâmica podem se derivar das equações de movimento para  $f(\mathbf{r},t) \in S(\mathbf{r},t)$ . Com a substituição da função de onda (eq. 2.12) na equação 2.7, obtemos:

$$\hbar \exp(i S) \left[ i \frac{\partial}{\partial t} f - f \frac{\partial}{\partial t} S \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \overrightarrow{\nabla}^2 \left[ f \exp(i S) \right] + \left[ U(\mathbf{r}) + \mu_0(n, a) \right] f \exp(i S)$$

Onde para o primeiro dos termos do lado direito, temos que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla}^2\left[f\,\exp\left(i\,S\right)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\exp\left(i\,S\right)\left[\overrightarrow{\nabla}^2 f\,+2i\overrightarrow{\nabla}f\cdot\overrightarrow{\nabla}S+if\,\overrightarrow{\nabla}^2 S-f\,\left(\overrightarrow{\nabla}S\right)^2\right]$$

Assim, encontramos:

$$\hbar \left[ f \frac{\partial}{\partial t} S - i \frac{\partial}{\partial t} f \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \begin{array}{c} \overrightarrow{\nabla}^2 f - f \left( \overrightarrow{\nabla} S \right)^2 \\ +2i \overrightarrow{\nabla} f \cdot \overrightarrow{\nabla} S + if \overrightarrow{\nabla}^2 S \end{array} \right] - \left[ U(\mathbf{r}) + \mu_0(n,a) \right] f \quad (2.15)$$

Agora igualamos a parte imaginaria dos dois lados da expressão anterior para obter:

$$\frac{\partial}{\partial t}f = -\frac{\hbar}{2m} \left[ 2\overrightarrow{\nabla}f \cdot \overrightarrow{\nabla}S + f \ \overrightarrow{\nabla}^2S \right] \to 2f\frac{\partial}{\partial t}f = -\frac{\hbar}{m} \left[ 2f \ \overrightarrow{\nabla}f \cdot \overrightarrow{\nabla}S + f \ ^2\overrightarrow{\nabla}^2S \right]$$

Que pode se escrever como:

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{2} = -\frac{\hbar}{m}\overrightarrow{\nabla}\cdot\left(f^{2}\overrightarrow{\nabla}S\right)$$
(2.16)

Com as equações 2.13 e 2.14 escrevemos esta expressão em função da densidade e a velocidade do sistema, para obter:

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \overrightarrow{\nabla} \cdot (n \mathbf{v}) = 0 \tag{2.17}$$

Esta expressão corresponde com a primeira equação da hidrodinâmica quântica (a equação da continuidade).

Agora igualando a parte real dos dois lados da equação 2.15 obtemos que:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} S = \frac{\hbar^2}{2mf} \left[ \vec{\nabla}^2 f - f \left( \vec{\nabla} S \right)^2 \right] - \left[ U \left( \mathbf{r} \right) + \mu_0 \left( n, a \right) \right]$$

Tomamos o gradiente desta equação:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \overrightarrow{\nabla} S = -\overrightarrow{\nabla} \left[ U(\mathbf{r}) + \mu_0(n,a) - \frac{\hbar^2}{2mf} \overrightarrow{\nabla}^2 f + \frac{m}{2} \left( \frac{\hbar}{m} \overrightarrow{\nabla} S \right)^2 \right]$$
(2.18)

Empregando as expressões 2.13 e 2.14 escrevemos esta equação em função da densidade e a velocidade do sistema:

$$m\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{v} = -\overrightarrow{\nabla}\left[\frac{1}{2}m\mathbf{v}^{2} + U(\mathbf{r}) + \mu_{0}(n,a) - \frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{\overrightarrow{\nabla}^{2}\sqrt{n}}{\sqrt{n}}\right]$$
(2.19)

A expressão anterior corresponde com a segunda equação da hidrodinâmica quântica (equação de Euler's) onde o potencial químico de volume  $\mu_0(n, a)$  contém a informação estadística do sistema e o último termo do lado direito corresponde com o termo de pressão quântica, ausente nas equações da hidrodinâmica clássica.

Em resumo encontramos duas equações acopladas para a densidade e a velocidade do sistema SF (equações da hidrodinâmica quântica) equivalentes com a equação DF, e no mesmo tempo temos um importante fato que empregaremos para estabelecer a geração do estado de vórtice: a velocidade do SF é o gradiente de um escalar (equação 2.14).

#### 2.2.2 Quantização do Vórtice

Existe evidencia experimental da geração do estado de vórtice ao longo de tudo o crossover BCS-BEC [13] realçãndo a geração do estado de superfluidez no sistema. Agora estudamos a geração do estado de vórtice através da equação DF empregando o fato que a velocidade do SF é o gradiente de um escalar (equação 2.14), assim encontramos que:

$$\overrightarrow{\nabla} \times \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} S = 0$$
 (2.20)

Isto implica que o movimento do SF é irrotacional, e que a variação da fase da função de onda  $\Delta S$  é um múltiplo de  $2\pi$ :

$$\Delta S = \oint \vec{\nabla} S \cdot d\mathbf{r} = 2\pi l \tag{2.21}$$

Onde *l* é um inteiro (chamado número quântico do momento angular). Assim a circulação está quantizada:

$$\oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi l \frac{\hbar}{m} \tag{2.22}$$

Então o sistema mostra um movimento com restrições que gera os chamados vórtices quantizados.

Para estudar o estado de vórtice consideramos um sistema numa armadilha de simetria axial de forma que todos os átomos estão girando entorno do eixo z com velocidade tangencial:

$$v_{\phi} = \frac{\hbar}{m\rho} l \tag{2.23}$$

Onde  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  é a distância ao eixo z e  $\phi$  é o ângulo azimutal. De este jeito com  $l \neq 0$  a função de onda do SF tem que ser nula no eixo de simetria do vórtice (em  $\rho = 0$ ) para que a energia cinética do movimento azimutal não seja infinita.

Aproveitamos a simetria axial do problema para escrever a função de onda do SF em coordenadas cilíndricas da forma:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \varphi(\rho,z) \exp\left[i\left(l\phi - \frac{\mu}{\hbar}t\right)\right]$$
(2.24)

Onde  $\mu$  é o potencial químico do sistema na armadilha. Com esta função de onda na equação DF (eq.2.7) temos que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla}^2\left[\varphi\left(\rho,z\right)\exp\left(il\phi\right)\right] + \left[U\left(\rho,z\right) + \mu_0\left(n,a\right) - \mu\right]\varphi\left(\rho,z\right)\exp\left(il\phi\right) = 0$$
(2.25)

Onde para o primeiro termo encontramos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla}^2\left[\varphi\left(\rho,z\right)\exp\left(il\phi\right)\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\exp\left(il\phi\right) \left[\begin{array}{c} \overrightarrow{\nabla}^2\varphi\left(\rho,z\right) - l^2\varphi\left(\rho,z\right)\left(\overrightarrow{\nabla}\phi\right)^2\\ +2il\overrightarrow{\nabla}\varphi\left(\rho,z\right)\overrightarrow{\nabla}\phi\end{array}\right]$$
(2.26)

Assim obtemos que para a parte real da equação 2.25:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\overrightarrow{\nabla}^2 - l^2\left(\overrightarrow{\nabla}\phi\right)^2\right] + U\left(\rho, z\right) + \mu_0\left(n, a\right) - \mu\right\}\varphi\left(\rho, z\right) = 0$$

Com a forma do gradiente e o laplaciano em coordenadas cilíndricas, finalmente encontramos a seguinte equação DF para o estudo dos vórtices no SF:

$$\left\{ \begin{array}{c} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{l^2}{\rho^2} \right] \\ +U\left(\rho, z\right) + \mu_0\left(n, a\right) - \mu \end{array} \right\} \varphi\left(\rho, z\right) = 0$$

$$(2.27)$$

E importante destacar que agora para todo estado com  $l \neq 0$  existe uma contribução adicional ao potencial correspondente com o chamado termo de barreira centrífuga, que tem a forma  $l^2/\rho^2$ .

### 2.3 Forma Adimensional

Agora levamos a equação de funcional densidade para uma forma mais conveniente empregando uma transformação de variáveis a quantidades adimensionais, através do comprimento característico de oscilador l da forma:

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}, \overline{a} = la, \ t = \omega \tau, \overline{x} = lx, \overline{y} = ly, \overline{z} = lz$$

$$\overline{\mu}_{0}(n,\overline{a}) = \mu_{0}(n,a) \,\hbar^{2} / \left(ml^{2}\right), \Psi\left(\overline{x},\overline{y},\overline{z};\tau\right) = \varphi\left(x,y,z;t\right) / \sqrt{l^{3}}$$

$$(2.28)$$

Assim a equação DF (eq. 2.3) em quantidades adimensionais para uma armadilha anisotrópica é:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x,y,z;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + \mu_{0}\left(n,a\right) \\ +\frac{1}{2}\left(\nu^{2}x^{2} + \kappa^{2}y^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) \end{bmatrix}\varphi\left(x,y,z;t\right)$$
(2.29)

Onde  $\mu_0(n, a)$  corresponde com o termo não linear da nossa equação DF, é importante destacar que é função da densidade de partículas n e o comprimento de espalhamento a.Assim mesmo temos que a condição de normalização em quantidades sem dimensões fica da forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \ |\varphi(x, y, z; t)|^2 = 1$$
(2.30)

Onde a densidade n está relacionada com o parâmetro de ordem através do número total de partículas no sistema N:

$$n = N |\varphi(x, y, z; t)|^2$$
 (2.31)

#### 2.4 Equação DF Estacionária

Agora procuramos uma forma independente do tempo para a equação DF que tem validade em qualquer simetria e região de interesse. Para isto vamos supor que a função de onda do estado estacionário tem uma dependência trivial com o tempo da forma:

$$\varphi(x, y, z; t) = \widehat{\varphi}(x, y, z) \exp(-i\mu t)$$
(2.32)

Onde  $\mu$  representa o potencial químico do sistema de dímeros na armadilha. Assim a equação 2.29, fica da forma:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\left[\widehat{\varphi}\left(x,y,z\right)\exp\left(-i\mu t\right)\right] = \left[-\frac{1}{2}\overrightarrow{\nabla}^{2} + \mathbf{U}(x,y,z) + \mu_{0}\left(n,a\right)\right]\widehat{\varphi}\left(x,y,z\right)\exp\left(-i\mu t\right)$$
(2.33)

Derivamos e eliminamos a exponencial para obter com  $\hat{\varphi} = \varphi$ :

$$\mu \varphi(x, y, z) = \left[ -\frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}^2 + \mathbf{U}(x, y, z) + \mu_0(n, a) \right] \varphi(x, y, z)$$
(2.34)

Esta expressão corresponde com a equação DF independente do tempo, que descreve os estados estacionários do superfluido de Fermi. Agora a normalização e a densidade do sistema têm a forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \ |\varphi(x, y, z)|^2 = 1, \ n = N \ |\varphi(x, y, z)|^2$$
(2.35)

### 2.5 Equação em Simetria Axial

Para estudar o SF tridimensional no caso de uma armadilha com simetria axial  $(\nu = \kappa)$ , empregamos a equação DF anisotrópica (eq. 2.29) com a forma:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x,y,z;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) \\ +\frac{1}{2}\left(\kappa^{2}\left(x^{2} + y^{2}\right) + \lambda^{2}z^{2}\right) + \mu_{0}\left(n,a\right) \end{bmatrix}\varphi\left(x,y,z;t\right)$$
(2.36)

Neste caso, a simetria permite reduzir o problema com três coordenadas espaciais (x, y, z) num problema de duas variáveis:  $\rho$  a coordenada radial e z a coordenada axial:

$$\mathbf{r} = (x, y, z) = (\rho, z)$$
 (2.37)

Onde  $\rho^2 = x^2 + y^2$ . De este jeito para  $\kappa = 1$  e empregando a forma do laplaciano em coordenadas cilíndricas, a equação DF em quantidades sem dimensões que descreve o superfluido de Fermi numa armadilha de simetria axial é:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(\rho,z;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial\rho^{2}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(\rho^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) + \mu_{0}\left(n,a\right)\right]\varphi\left(\rho,z;t\right) \quad (2.38)$$

Para a normalização o elemento de volume muda da forma  $d\mathbf{r} = \rho \ d\rho \ d\phi \ dz$ , assim da equação 2.30 obtemos que agora a normalização é:

$$2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \, |\varphi(\rho, z; t)|^2 = 1$$
(2.39)

Onde a densidade do sistema n está relacionada com o parâmetro de ordem através do número total de partículas N:

$$n = N |\varphi(\rho, z; t)|^2$$
(2.40)

Para a equação independente do tempo empregamos a função de onda do estado estacionário com uma dependência trivial no tempo numa forma similar ao realizado na equação 2.32, e deste jeito encontramos:

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}\left(\rho^2 + \lambda^2 z^2\right) + \mu_0\left(n,a\right) - \mu\right]\varphi\left(\rho,z\right) = 0$$
(2.41)

Onde  $\mu$  representa o potencial químico do sistema e a normalização junto da densidade do sistema têm a forma:

$$2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \, |\varphi(\rho, z)|^2 = 1, \ n = N \, |\varphi(\rho, z)|^2$$
(2.42)

### 2.6 Redução a Uma Dimensão

No caso de uma armadilha com forma de cigarro, isto é uma armadilha de simetria axial com forte confinamento transversal, a equação de funcional densidade anisotrópica em três dimensões, pode-se levar a uma forma quasi-unidimensional [15].

Considerando que o sistema permanece confinado no estado base na direção transversal, a função de onda pode ser tomada da forma:

$$\varphi(x, y, z; t) = \widetilde{\varphi}(x; t) \phi_0(y) \phi_0(z) \exp\left[-i\left(\lambda + \kappa\right) t/2\right]$$
(2.43)

Onde vamos supor um estado estacionário com as funçoes de onda do estado fundamental tipo gaussiana nas direçoes y e z determinado por:

$$\phi_0(y) = \left(\frac{\kappa}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\kappa y^2/2\right], \ \phi_0(z) = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\lambda z^2/2\right]$$
(2.44)

Empregando isto na equação de funcional densidade anisotrópica de três dimensões, com quantidades adimensionais (eq. 2.29), temos que:

$$\phi_{0}(y)\phi_{0}(z)\left\{i\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\varphi}(x;t)+\frac{1}{2}(\kappa+\lambda)\widetilde{\varphi}(x;t)\right\} = \\ = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\phi_{0}(y)\phi_{0}(z)\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}+\frac{1}{\phi_{0}(y)}\frac{d^{2}\phi_{0}(y)}{dy^{2}}+\frac{1}{\phi_{0}(z)}\frac{d^{2}\phi_{0}(z)}{dz^{2}}\right)\\ +\frac{1}{2}\phi_{0}(y)\phi_{0}(z)\left(\nu^{2}x^{2}+\kappa^{2}y^{2}+\lambda^{2}z^{2}\right)\\ +\mu_{0}(n,a)\phi_{0}(y)\phi_{0}(z)\end{bmatrix} \widetilde{\varphi}(x;t)$$
(2.45)

Agora, com as funçoes de onda do estado fundamental (eq. 2.44) as derivadas em  $y \in z$  são:

$$\frac{1}{\phi_0(y)}\frac{d^2}{dy^2}\phi_0(y) + \frac{1}{\phi_0(z)}\frac{d^2}{dz^2}\phi_0(z) = -(\kappa + \lambda) + \kappa^2 y^2 + \lambda^2 z^2$$
(2.46)

Assim eliminamos os termos comunes e a equação DF fica:

$$\phi_{0}(y)\phi_{0}(z)\left[i\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\varphi}(x;t)\right] = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left[\phi_{0}(y)\phi_{0}(z)\right]\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}-\nu^{2}x^{2}\right)\\ +\mu_{0}(n,a)\phi_{0}(y)\phi_{0}(z)\end{bmatrix}\widetilde{\varphi}(x;t)$$
(2.47)

Agora vamos multiplicar por  $\phi_0(y) \phi_0(z)$ , e integramos em y e z:

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\varphi}\left(x;t\right)\right]\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{0}^{2}\left(y\right)dy\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{0}^{2}\left(z\right)dz =$$

$$=\left[\begin{array}{c}-\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}-\left(\nu^{2}x^{2}\right)\right]\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{0}^{2}\left(y\right)dy\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{0}^{2}\left(z\right)dz \\ +\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz\ \mu_{0}\left(n,a\right)\ \left[\phi_{0}\left(y\right)\right]^{2}\left[\phi_{0}\left(z\right)\right]^{2}\end{array}\right]\widetilde{\varphi}\left(x;t\right)$$
(2.48)

Com a equação 2.44 temos que o valor da integral é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^2(y) \, dy \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^2(z) \, dz = \left(\frac{\kappa}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = 1 \tag{2.49}$$

Assim com  $\nu = 1$  e  $\tilde{\varphi} = \varphi$ , encontramos para a equação de funcional densidade a seguinte forma:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} - x^{2}\right) \\ +\int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \ \mu_{0}\left(n,a\right) \left[\phi_{0}\left(y\right)\right]^{2} \left[\phi_{0}\left(z\right)\right]^{2} \end{bmatrix} \varphi\left(x;t\right)$$
(2.50)

Onde só o termo não linear vai depender da forma do potencial químico de volume em cada região.

Da mesma forma com a transformação 2.43 para a normalização (eq. 2.30) e a densidade de partículas no sistema neste caso obtemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x;t)|^2 \, dx = 1 \,, \ n = N \, |\varphi(x;t)|^2 \tag{2.51}$$

Onde N é o número de partículas no sistema.

#### 2.7 Redução a Duas Dimensões

Para o caso de uma armadilha anisotrópica em duas dimensões com forte confinamento axial, temos um sistema em forma de disco. Mostraremos como a equação DF anisotrópica em três dimensões, pode ser levada numa equação efetiva em duas dimensões.

Considerando que o sistema permanece confinado no estado base na direção axial, a função de onda pode ter a forma:

$$\varphi(x, y, z; t) = \widetilde{\varphi}(x, y; t) \phi_0(z) \exp\left[-i\lambda t/2\right]$$
(2.52)

Com a função de onda do estado fundamental na direção z determinada por:

$$\phi_0(z) = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\lambda z^2/2\right]$$
(2.53)

Empregamos isto na equação de funcional densidade anisotrópica de três dimensões com quantidades adimensionais equação 2.29 (por simplicidade  $\tilde{\varphi}(x, y; t) = \tilde{\varphi}$ ) temos que:

$$i\phi_{0}(z)\left[\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\varphi}-(i\lambda/2)\widetilde{\varphi}\right] = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\phi_{0}(z)\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}+\frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}+\frac{1}{\phi_{0}(z)}\frac{d^{2}}{dz^{2}}\phi_{0}(z)\right)\\ +\frac{1}{2}\left(\nu^{2}x^{2}+\kappa^{2}y^{2}+\lambda^{2}z^{2}\right)\phi_{0}(z)\\ +\mu_{0}(n,a)\phi_{0}(z)\end{bmatrix}\widetilde{\varphi}$$
(2.54)

Empregando a forma da função de onda do estado fundamental na direção z, temos que:

$$\frac{1}{\phi_0(z)} \frac{d^2}{dz^2} \phi_0(z) = -\lambda + \lambda^2 z^2$$
(2.55)

Assim a equação DF tem a forma:

$$i\phi_{0}(z)\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\varphi} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\phi_{0}(z)\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}\right) + \frac{1}{2}\phi_{0}(z)\left(\nu^{2}x^{2} + \kappa^{2}y^{2}\right) \\ +\mu_{0}(n,a)\phi_{0}(z) \end{bmatrix}\widetilde{\varphi}$$
(2.56)

Agora multiplicamos por  $\phi_0(z)$ , e integramos em z, para obter:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^2(z) \, dz \, i \frac{\partial}{\partial t} \widetilde{\varphi} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^2(z) \, dz \, \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \nu^2 x^2 - \kappa^2 y^2 \right) \\ + \int_{-\infty}^{\infty} dz \, \mu_0(n,a) \, \phi_0^2(z) \end{bmatrix} \widetilde{\varphi}$$
(2.57)

Empregando o valor da integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^2(z) \, dz = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\lambda z^2\right) \, dz = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = 1 \tag{2.58}$$

Temos que finalmente com  $\nu = 1$  e  $\tilde{\varphi} = \varphi$ , encontramos:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x,y;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(x^{2} + \kappa^{2}y^{2}\right) + \mu_{0}'\left(n,a\right)\right]\varphi\left(x,y;t\right)$$
(2.59)

Este último resultado corresponde com a equação DF em quantidades sem dimensões, que descreve o superfluido de Fermi em duas dimensões, onde nós definimos o termo não linear 2D da forma:

$$\mu_{0}'(n,a) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \ \mu_{0}(n,a) \ \phi_{0}^{2}(z)$$
(2.60)

Do mesmo modo o termo não linear em duas dimensões vai depender da forma do potencial químico de volume em cada região.

Da equação 2.30 obtemos que a normalização e a densidade de partículas na superfície para este caso é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \ |\varphi(x,y;t)|^2 = 1 \ , \ n = N \ |\varphi(x,y;t)|^2$$
(2.61)

Onde N é o número total de partículas no sistema.

### 2.8 Equação em Simetria Circular

Para o caso especial de uma armadilha com simetria circular temos que  $\kappa = \nu$  permite escrever a equação DF bidimensional numa forma unidimensional através de uma nova coordenada radial  $\mathbf{r} \equiv (x, y)$ , de forma que a função de onda muda para:

$$\varphi(x, y; t) \to \varphi(r; t)$$
 (2.62)

Empregamos a forma do laplaciano em coordenadas cilíndricas a equação 2.59 muda para:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(r;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{r^{2}}{2} + \mu_{0}'\left(n,a\right)\right]\varphi\left(r;t\right)$$
(2.63)

Onde  $\mu'_0(n, a)$  corresponde com o potencial químico de volume da redução bidimensional (eq. 2.60). Agora o elemento de área muda da forma:

$$dx \ dy \to r dr \ d\phi \tag{2.64}$$

Assim temos que a condição de normalização agora é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, |\varphi(x,y;t)|^2 \to \int_{0}^{\infty} r \, dr \int_{0}^{2\pi} d\phi \, |\varphi(r;t)|^2 \tag{2.65}$$

Finalmente a equação em simetria circular tem a normalização:

$$2\pi \int_0^\infty r \, dr \, |\varphi(r;t)|^2 = 1$$
 (2.66)

## **Capítulo 3**

## Potencial Químico de Volume

É muito importante estabelecer a forma do termo não linear, o potencial químico de volume  $\mu_0(n, a)$ , para uma adequada descripção do superfluido de Fermi nas diferentes regiões. Nós consideramos o potencial químico de volume como uma função do comprimento de espalhamento e da densidade de partículas:

$$\mu_0 \to \mu_0(n, a) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{E}{N}\right) n$$
(3.1)

Onde  $\varepsilon$  é a densidade de energia  $\varepsilon = E/V = (E/N) n$ .

Mais nos importantes limites da unitariedade  $(a \to \pm \infty)$  e da BCS  $(a \to -0)$  o comprimento de espalhamento não é mais uma variável, e o potencial químico depende de uma variável só: A densidade de partículas n.

Agora estudaremos a forma que o termo não linear tem para as diferentes regiões de interesse, com uma adequada interpretação em cada caso.

#### 3.1 Limite BCS

Para o superfluido de Fermi no limite BCS o potencial químico de volume tem seu origem na energia cinética dos átomos de Fermi que satisfazem o princípio de exclusão de Pauli.

Temos que na baixa densidade e para a região de interação fraca  $(k_f |a| << 1)$  a energia por partícula do gás de Fermi calculada por Baker [16], Huang e Yang [17], [18] é :

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} E_f \left[ 1 + \frac{10}{9\pi} k_f a_f + .. \right]$$
(3.2)

Onde a energia de fermi é:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_f} \left(3\pi^2\right)^{2/3} n_f^{2/3}$$
(3.3)

Assim derivando a energia por partícula do gás obtemos para o potencial químico de volume no limite BCS, a seguinte forma ([17], [18]):

$$\mu_0(n_f, a_f) = \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{E}{N}\right) n = \frac{\hbar^2}{2m_f} \left(3\pi^2\right)^{2/3} n_f^{2/3} + \frac{2\pi\hbar^2}{m_f} a_f n_f$$
(3.4)

Esta última equação permite considerar valores negativos do comprimento de espalhamento, associada então com a descripção de uma região de interação atrativa [19].

Além, no limite de acoplamento fraco  $(a_f \rightarrow -0)$  podemos ver que a escala de energia relevante é a energia do gás de Fermi<sup>\*</sup> sem interação.

Agora, é conveniente escrever o potencial químico de volume em função das quantidades de pares, lembrando que:

$$m = 2m_f, \ n = n_f/2, \ \mu_0 = 2\mu_{0f}$$
 (3.5)

Onde  $m, n, \mu_0$  são a massa, a densidade e o potencial químico de volume para os pares, finalmente temos que:

$$\frac{\mu_0\left(a_f,n\right)}{2E_F} = 1 + \chi_1 \ a_f \ n^{1/3} \tag{3.6}$$

Onde  $\chi_1 = 4\pi 2^{1/3} / (3\pi^2)^{2/3}$ . Esta equação representa o potencial químico de volume dos pares de átomos de Fermi no limite BCS [20], lembramos:  $a_f$  representa o comprimento de espalhamento férmion-férmion.

#### **3.2 Limite BEC**

Nesta região de comprimento de espalhamento positivo, os dímeros (moléculas formadas por dois átomos de Fermi) constituem um gás de Bosons fracamente repulsivos, que satisfazem as relações:  $m = 2m_f = m$ ,  $n_d = n_f/2$ ,  $\mu_d = 2\mu_f$ , onde  $m, n_d$ e  $\mu_d$  são a massa, a densidade, e o potencial químico dos dímeros, e  $m_f, n_f, \mu_f$  são as quantidades para os átomos Fermiônicos.

Nesta região a energia por partícula calculada por Lee, Huang e Yang [21], [22] é:

$$\frac{E}{N} + \frac{\varepsilon_B}{2} = \frac{3}{5} E_f \left[ \frac{5 \left(k_f \ a_d\right)}{18\pi} + \frac{64}{27\sqrt{6\pi^5}} \left(k_f a_d\right)^{5/2} + \ldots \right]$$
(3.7)

Onde  $\varepsilon_B$  é a energia (positiva) de ligação do dímero e de novo a energia de Fermi pode se escrever como:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_f} \left(3\pi^2\right)^{2/3} n_f^{2/3} = \frac{\hbar^2}{m} \left(6\pi^2\right)^{2/3} n_d^{2/3}$$
(3.8)

<sup>\*</sup>Lembrese que para o gás de Fermi sem interação temos:  $E/N = 3/5E_f$ .

Desta forma o potencial químico de volume no limite BEC é:

$$\mu_d = \frac{\partial}{\partial n_d} \left(\frac{E}{N}\right) n_d = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_d n_d + 128\sqrt{\pi} \frac{\hbar^2}{3m} a_d^{5/2} n_d^{3/2} - \frac{3\hbar^2 \left(6\pi^2\right)^{2/3}}{10m} \varepsilon_B$$
(3.9)

No limite de interação fraca  $(a_d \rightarrow +0)$  podemos menosprezar a energia de ligação do dímero e então, para o potencial químico, no limite BEC [20], vamos tomar a forma:

$$\mu_0(n_d, a_d) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_d n_d \left[ 1 + \alpha \left( a_d \ n_d^{1/3} \right)^{3/2} \right]$$
(3.10)

Onde  $\alpha = 32/(3\sqrt{\pi})$ . Esta última equação, válida na região de formação de moléculas, só permite considerar valores positivos do comprimento de espalhamento, e seu origem pode-se interpretar desde a energia de interação repulsiva que existe entre os dímeros.

E importante ver que no limite de acoplamento fraco  $(a \rightarrow +0)$  o potencial químico de volume corresponde exatamente com o termo não linear da equação Gross-Pitaevskii (GP), muito empregada na descripção dos sistemas condensados de Bose-Einstein [9], [3] e a consideração do segundo termo permite a construção da denominada equação GP modificada (MGP) proposta por Fabrocini e Polls [23].

#### 3.3 Limite da Unitariedade

Neste limite o sistema é muito especial: o gás tem uma interação forte (no sentido que o comprimento de espalhamento é maior que a distância entre partículas) e no mesmo tempo conforma um sistema diluído (no sentido que o potencial entre os átomos é menor que a distância entre as partículas) [24].

Para o limite da unitariedade, com  $|a| \to \infty$ , o comprimento de espalhamento não é mais uma variável do problema e  $\mu_0$  é função unicamente da densidade de partículas. Então a única escala de comprimento que vamos ter no limite da unitariedae é  $n^{-1/3}$ , e assim a energia de Fermi se torna uma quantidade muito relevante para o potencial químico neste limite.

De esta forma podemos empregar argumentos dimensionais e dar para o potencial químico de volume a seguinte forma universal:

$$\mu_0 \to \mu_0 (n) \sim \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3}$$
 (3.11)

Assim para um superfluido de Fermi o potencial químico de volume no limite da unitariedade tem a forma:

$$\mu_0(n) = 2\xi \frac{\hbar^2}{2m_f} \left(3\pi^2\right)^{2/3} n_f^{2/3}$$
(3.12)

Em função das quantidades para os pares temos que:

$$\mu_0(n) = 2\xi \frac{\hbar^2}{m} \left(6\pi^2\right)^{2/3} n^{2/3} = 2\xi \ E_F \tag{3.13}$$

Onde *m* e *n* representam a massa e a densidade dos pares, ou dos dímeros, já que no limite da unitariedade um par de férmions pode permanecer como par ou como um dímero.  $\xi$  é um coeficiente universal, com um valor aceitado de  $\xi = 0.44^{\dagger}$ .

#### 3.4 Região de Interação Atrativa

Agora vamos apresentar uma forma para o potencial químico que sejá válida para toda a região de interação atrativa, desde o limite BCS até a unitariedade.

Para maior simplicidade, definimos o nosso potencial químico como função de uma quantidade sem dimensões da forma:

$$x = a_f \ n^{1/3} \tag{3.14}$$

Lembrando que no limite BCS  $(a_f \rightarrow -0)$  encontramos (equação 3.6):

$$\frac{\mu_0(x)}{2E_F} = 1 + \chi_1 x \tag{3.15}$$

Onde  $\chi_1 = \frac{4\pi 2^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}}$ , e para o limite da unitariedade  $(a_f \to -\infty)$ :

$$\frac{\mu_0\left(n\right)}{2E_F} = \xi \tag{3.16}$$

Onde  $\xi = 0.44$ . O potencial químico que nós sugerimos para cobrir os dois limites, válido em toda a região de interação atrativa é:

$$\frac{\mu_0\left(a_f,n\right)}{2E_F} = 1 + \frac{\chi_1 x - \chi_2 x^2}{1 - \beta_1 x + \beta_2 x^2}, \ x < 0 \tag{3.17}$$

Onde nós escolhemos as constantes de jeito que os resultados da nossa equação DF concordam com tecnicas Monte Carlo ([11], [30], [31]) e satisfazem os limites conhecidos, elas são:

$$\chi_1 = \frac{4\pi 2^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}}, \ \beta_1 = 2^{1/3} 40, \ \beta_2 = \chi_2/(1-\xi) \ \mathbf{e} \ \chi_2 = 2^{2/3} 300$$
 (3.18)

Não é difícil mostrar que a expressão 3.17 satisfaz os dois limites de interesse e descreve o potencial químico de volume na região de interação atrativa, desde o límite BCS até a unitariedade.

<sup>&</sup>lt;sup>†</sup>Existem muitas pesquisas teóricas e experimentais realizadas com o propósito de encontrar o valor de este parâmetro adimensional. Os experimentos realizados em <sup>40</sup>K [25] e <sup>6</sup>Li [26], junto com resultados teóricos de técnicas Monte Carlo [27], [28], [29] mostram um consenso em torno do valor que nós empregamos no desenvolvimento deste trabalho,  $\xi = 0.44$ .

#### 3.5 Região de Interação Repulsiva

Agora procuramos uma forma para o potencial químico de volume válida na região molecular, no crossover BEC-unitariedade, interpolando a forma dos termos não lineares que encontramos válidos para os limites BEC e da unitariedade.

Por simplicidade mudamos o potencial químico em função de uma nova variável adimensional  $(y = n_d^{1/3}a_d)$ , para isto dividimos na energia de Fermi, de forma que no limite BEC temos (equação 3.10):

$$\frac{\mu_d \left( n_d, a_d \right)}{2E_F} = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \left( \frac{m}{2\hbar^2 \left( 6\pi^2 \right)^{2/3} n_d^{2/3}} \right) a_d n_d \left[ 1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}} \left( a_d n_d^{1/3} \right)^{3/2} \right]$$
(3.19)

$$\frac{\mu_d \left( n_d, a_d \right)}{2E_F} = \frac{2\pi}{\left(6\pi^2\right)^{2/3}} y \left( 1 + \alpha \ y^{3/2} \right)$$
(3.20)

Onde  $\alpha = 32/(3\sqrt{\pi})$ . E lembrando que para o limite da unitariedade a equação 3.13 é:

$$\frac{\mu_0\left(n_d\right)}{2E_F} = \xi \tag{3.21}$$

Definimos o nosso potencial químico como uma quantidade sem dimensões para cobrir a região de interação repulsiva assim:

$$\frac{\mu_0\left(n_d, a_d\right)}{2E_F} = \frac{2\pi}{\left(6\pi^2\right)^{2/3}} \frac{y + \alpha\left(1 + \nu\right)y^{5/2}}{1 + \alpha\nu y^{3/2} + \beta\left(1 + \nu\right)y^{5/2}}, \ y > 0 \tag{3.22}$$

Onde as constantes são:

$$\alpha = \frac{32}{3\sqrt{\pi}}, \ \beta = \alpha \frac{2\pi}{\xi \ (6\pi^2)^{2/3}}$$
(3.23)

O parâmetro  $\nu$  pode ser ajustado para que a função  $\mu_0(n_d, a_d) / (2E_F)$  tenha uma primeira derivada continua na unitariedade, com relação do parâmetro inverso de y. Não é difícil verificar que a equação 3.22 satisfaz os dois limites e descreve o potencial químico de volume na região de interação repulsiva, desde o límite BEC até a unitariedade.

#### 3.6 Continuidade na primeira derivada do $\mu$

Até agora temos uma forma pra  $\mu_0(a, n)$  na região de interação atrativa e outra na região de interação repulsiva, agora desejamos generalizar o potencial químico de volume, para que seja contínuo, com a sua primeira derivada contínua com relação do parâmetro 1/y na unitariedade.

Para encontrar o valor certo do parâmetro  $\nu$ , primeiro escrevemos as expressões do termo não linear em função de novas variáveis  $\epsilon = \frac{1}{x}$  e  $\delta = \frac{1}{y}$ .

Começamos com o potencial químico de pares no crossover BCS-unitariedade (eq. 3.4):

$$\frac{\mu_p(a_f, n)}{2E_F} = 1 + \frac{\chi_1 x - \chi_2 x^2}{1 - \beta_1 x + \beta_2 x^2}$$
(3.24)

Onde as constantes estão determinadas pela equação 3.18. Escrevemos esta expressão empregando uma nova variável  $\epsilon = \frac{1}{x}$ , assim:

$$\frac{\mu_p(x)}{2E_F} = 1 + \frac{\chi_1/x - \chi_2}{1/x^2 - \beta_1/x + \beta_2}$$
  

$$\rightarrow \frac{\mu_p(\epsilon)}{2E_F} = 1 + \frac{\chi_1\epsilon - \chi_2}{\epsilon^2 - \beta_1\epsilon + \beta_2}$$
(3.25)

Agora tomamos o limite da unitariedade ( $\epsilon \rightarrow 0$ ), e encontramos:

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\mu_p(\epsilon)}{2E_F} = 1 + \frac{\chi_1 \epsilon - \chi_2}{\beta_2} \left( \frac{1}{1 - \beta_1 \epsilon / \beta_2} \right) = 1 + \frac{\chi_1 \epsilon - \chi_2}{\beta_2} \left( 1 + \frac{\beta_1}{\beta_2} \epsilon \right)$$
$$= 1 + \frac{\chi_1 \epsilon - \chi_2}{\beta_2} + \frac{\beta_1 \left(\chi_1 \epsilon - \chi_2\right) \epsilon}{\beta_2^2} = 1 - \frac{\chi_2}{\beta_2} + \left( \frac{\chi_1 \beta_2 - \beta_1 \chi_2}{\beta_2^2} \right) \epsilon$$
(3.26)

Esta última expressão é o potencial químico de volume sem dimensões válido na unitariedade que encontramos desde a região de interação atrativa.

Agora escrevemos a forma do potencial químico de volume para os dímeros no crossover BEC-unitariedade (eq. 3.10) em função de uma nova variável  $\delta = \frac{1}{u}$ , assim:

$$\frac{\mu_d(\delta)}{2E_F} = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \left[ \frac{\delta^{3/2} + \alpha (1+\nu)}{\delta^{5/2} + \alpha \nu \delta + \beta (1+\nu)} \right]$$
(3.27)

Onde as constantes estão dadas na equação 3.23. No limite da unitariedade  $\delta \to 0$ , na expansão em serie de Taylor todas as quantidades dependentes de  $\delta^{\sigma}$ , com  $\sigma > 1$  são nulas, assim:

$$\lim_{\delta \to 0} \frac{\mu_d(\delta)}{2E_F} = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \left[ \frac{\alpha (1+\nu)}{\alpha \nu \delta + \beta (1+\nu)} \right] = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \frac{\alpha}{\beta} \left[ \frac{1}{1+\alpha \nu \delta / \beta (1+\nu)} \right]$$
$$\frac{\mu_d(\delta)}{2E_F} = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \left[ \frac{\alpha}{\beta} - \frac{\nu}{(1+\nu)} \left( \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 \delta \right]$$
(3.28)

Esta última expressão é o potencial químico de volume sem dimensões válido na unitariedade que encontramos desde a região de interação repulsiva.

Pra a continuidade empregamos o fato de que no limite da unitariedade:

$$\mu_{p}\left(\epsilon\right) = \mu_{d}\left(\delta\right) \tag{3.29}$$

Para fazer uma apropiada descrição do sistema BEC de dímeros, empregamos para o comprimento de espalhamento de dímero-dímero  $(a_d)$  a relação em termos do

comprimento de espalhamento de férmion-férmion  $(a_f)$ , obtenida por Petrov [32] e. Brodsky *et al.* [33], que é:

$$\frac{a_d}{a_f} = 0.6\tag{3.30}$$

Assim temos que:

$$\epsilon = \frac{1}{x} = \frac{1}{a_f \ n^{1/3}} = \frac{a_d}{a_f} \frac{1}{a_d \ (n_d)^{1/3}} = (0.6) \ \frac{1}{y} = (0.6) \ \delta$$
(3.31)

Então escrevemos o potencial químico de volume para os dímeros em função da nossa variável  $\epsilon$ , de forma que:

$$\frac{\mu_d\left(\epsilon\right)}{2E_F} = \frac{2\pi}{\left(6\pi^2\right)^{2/3}} \left[\frac{\alpha}{\beta} - \frac{\nu}{\left(1+\nu\right)} \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^2 \frac{\epsilon}{\left(0.6\right)}\right]$$
(3.32)

Assim na unitariedade (equação 3.26 e 3.28), para a continuidade na primeira derivada do potencial químico encontramos que:

$$\frac{d}{d\epsilon} \frac{\mu_p(\epsilon)}{2E_F} = \frac{d}{d\epsilon} \frac{\mu_d(\epsilon)}{2E_F}$$

$$\frac{\beta_1 \chi_2 - \chi_1 \beta_2}{\beta_2^2} = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \frac{\nu}{(1+\nu)} \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^2 \frac{1}{(0.6)}$$
(3.33)

Empregando o valor das constantes encontramos que:

$$\nu = 0.04171368 \tag{3.34}$$

Vai ser o valor certo para obter a continuidade do potencial químico de volume, e a sua primeira derivada, desde a região BCS até o BEC.

Agora vamos comprovar a válidade do nosso resultado, desenhando a função estabelecida para o potencial químico de volume no crossover BCS-BEC. Para isto empregamos uma nova variável  $\varepsilon = 1/(k_F a_f)$ , onde  $k_F$  é o momento de Fermi:

$$k_F = \left(6\pi^2\right)^{1/3} n_{d,\,p}^{1/3} \tag{3.35}$$

Lembrando que na região de interação atrativa tinhamos a expressão (equação 3.25):

$$\frac{\mu_p(\epsilon)}{2E_F} = 1 + \frac{\chi_1 \epsilon - \chi_2}{\epsilon^2 - \beta_1 \epsilon + \beta_2}$$

Mudamos para a variável  $\varepsilon$  da seguinte forma:

$$\epsilon = \frac{1}{a_f \ n_p^{1/3}} = \frac{\left(6\pi^2\right)^{1/3}}{a_f \ k_F} = \left(6\pi^2\right)^{1/3} \varepsilon \tag{3.36}$$

Então desde o limite BCS até a unitariedade podemos desenhar a seguinte função:

$$\frac{\mu_p(\varepsilon)}{2E_F} = 1 + \frac{\chi_1 (6\pi^2)^{1/3} \varepsilon - \chi_2}{(6\pi^2)^{2/3} \varepsilon^2 - \beta_1 (6\pi^2)^{1/3} \varepsilon + \beta_2}$$
(3.37)

1 /9

A figura 3.1 representa a forma da função  $\mu/\left(2E_F\right)$ na região de interação atrativa.



Figura 3.1: Potencial Químico de volume na região de interação atrativa (BCSunitariedade).

Agora lembramos a forma que tinhamos na região de interação repulsiva (equação 3.27) e o fato de  $\epsilon/(0.6) = \delta$  (equação 3.31), para escrever:

$$\frac{\mu_d(\epsilon)}{2E_F} = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \left[ \frac{(\epsilon/0.6)^{3/2} + \alpha (1+\nu)}{(\epsilon/0.6)^{5/2} + \alpha \nu \epsilon/(0.6) + \beta (1+\nu)} \right]$$
(3.38)

Que em função da nossa nova variável  $\varepsilon$  é:

$$\frac{\mu_d(\varepsilon)}{2E_F} = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \left[ \frac{\left( (6\pi^2)^{1/3} \varepsilon / 0.6 \right)^{3/2} + \alpha \left( 1 + \nu \right)}{\left( (6\pi^2)^{1/3} \varepsilon / 0.6 \right)^{5/2} + \alpha \nu \left( 6\pi^2 \right)^{1/3} \varepsilon / \left( 0.6 \right) + \beta \left( 1 + \nu \right)} \right]$$
(3.39)

A figura 3.2 representa a forma do potencial químico de volume na região de interação repulsiva (BEC-unitariedade).



Figura 3.2: Potencial Químico de volume na região de interação repulsiva (BECunitariedade)



Figura 3.3: Função  $\mu/(2E_F)$  no crossover BCS-BEC.

Assim no crossover BCS-BEC, temos o comportamento que mostra a figura 3.3. Perto da unitariedade podemos ver a relação de continuidade na primeira derivada para a função  $\mu/(2E_F)$  com relação a diferentes valores do parâmetro  $\nu$  de forma que conferimos o valor certo de 0.042 (fig. 3.4).



Figura 3.4: Continuidade da função  $\mu/\left(2E_F\right)$ e a sua primeira derivada na unitariedade<br/>é valida para  $\mu=0.042.$ 

## **Capítulo 4**

# Equação DF em Diversos Casos

Na procura da forma do termo não linear correspondente com a nossa equação DF escrevemos o correspondiente potencial químico de volume numa forma mais conveniente através da transformação de variaveis a quantidades adimensionais definida na equação 2.28 em cada um dos casos de interesse. Desta forma temos a possibilidade de escrever a equação DF efetiva numa e duas dimensões para regões e limites específicos. Estudamos neste capítulo para diversas simetrias o sistema unidimensional no limite BCS, e a forma bidimensional nos limites BEC e da unitariedade.

#### 4.1 Equação Para o Limite BCS

Para o superfluido de Fermi no limite BCS, temos que a forma do potencial químico de volume (eq. 3.6) modificado pela transformação 2.28 muda da forma:

$$\mu_0(a_f, n) = \left(ml^2/\hbar^2\right) \overline{\mu}_0(\overline{a}_f, \overline{n}) = \left(ml^2/\hbar^2\right) 2 \frac{\hbar^2}{ml^2} \left(6\pi^2\right)^{2/3} n^{2/3} \left(1 + \chi_1 a_f n^{1/3}\right)$$

$$\mu_0(a_f, n) = 2 \left(6\pi^2\right)^{2/3} n^{2/3} \left(1 + \chi_1 a_f n^{1/3}\right)$$
(4.1)

Assim a equação DF sem dimensões para descrever os pares no superfluido de Fermi na ação de uma armadilha anisotrópica (eq. 2.29) é:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}\left(\nu^2 x^2 + \kappa^2 y^2 + \lambda^2 z^2\right) \\ + 2\left(6\pi^2\right)^{2/3}n^{2/3}\left(1 + \chi_1 a_f n^{1/3}\right) \end{bmatrix}\varphi$$
(4.2)

Com normalização e densidade de pares dadas por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \ |\varphi(x, y, z; t)|^2 = 1 , \ n = N \ |\varphi(x, y, z; t)|^2$$
(4.3)

Da mesma forma para simetria axial (eq. 2.38) obtemos que no limite BCS a equação DF tem a forma:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(\rho,z;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial\rho^{2}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(\rho^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) \\ + 2\left(6\pi^{2}\right)^{2/3}n^{2/3}\left(1 + \chi_{1} a_{f} n^{1/3}\right) \end{bmatrix}\varphi\left(\rho,z;t\right)$$
(4.4)

#### 4.1.1 Equação BCS Numa Dimensão

No caso de uma armadilha com forma de cigarro e no limite em que o comprimento de espalhamento é descartável com relação da energia de Fermi, a equação DF anisotrópica em três dimensões, pode ser levada a uma forma quasi-unidimensional (página 16). Onde para o limite BCS o termo não linear muda da forma (eq. 2.50):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \, \int_{-\infty}^{\infty} dz \, \mu_0(n,a) \, \left[\phi_0(y)\right]^2 \left[\phi_0(z)\right]^2 = 2 \left(6\pi^2\right)^{2/3} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \int_{-\infty}^{\infty} dz \, n^{2/3} \, \left[\phi_0(y)\right]^2 \left[\phi_0(z)\right]^2$$

$$= 2 \left(6\pi^2 N\right)^{2/3} |\varphi(x;t)|^{4/3} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \ [\phi_0(y)]^{10/3} [\phi_0(z)]^{10/3}$$
(4.5)

Considerando que o sistema permanece confinado no estado base na direção transversal, empregando uma forma conhecida (eq. 2.44) para a função de onda nas direções  $y \in z$  podemos obter:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(y)|^{10/3} \, dy \int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(z)|^{10/3} \, dz = \left(\frac{\kappa}{\pi}\right)^{5/6} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{5/6} \sqrt{\frac{3\pi}{5\kappa}} \sqrt{\frac{3\pi}{5\lambda}} = \frac{3}{5} \left(\frac{\kappa\lambda}{\pi^2}\right)^{1/3} (4.6)$$

Assim o termo não linear fica:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \, \int_{-\infty}^{\infty} dz \, \mu_0(n,a) \, \left[\phi_0(y)\right]^2 \left[\phi_0(z)\right]^2 = 2 \left(6\pi^2 N\right)^{2/3} |\varphi(x;t)|^{4/3} \frac{3}{5} \left(\frac{\kappa\lambda}{\pi^2}\right)^{1/3}$$
(4.7)

Finalmente temos para a equação de funcional densidade numa dimensão a seguinte forma:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{1}{2}x^{2} + \frac{6}{5}\left(6\pi\sqrt{\kappa\lambda}N\right)^{2/3}|\varphi\left(x;t\right)|^{4/3}\right]\varphi\left(x;t\right)$$
(4.8)

Este último resultado corresponde com a equação de funcional densidade em quantidades sem dimensões, que descreve o sistema de pares no superfluido de Fermi, numa dimensão para o limite BCS de acoplamento fraco.

De igual jeito neste caso temos que o sistema tem normalização e densidade de pares determinadas por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x;t)|^2 \, dx = 1 \,, \ n = N \ |\varphi(x;t)|^2$$
(4.9)
Agora procuramos uma forma independente do tempo para a equação de funcional densidade, numa dimensão. Vamos supor que a função de onda do estado estacionário tem numa dependência trivial com o tempo da forma:

$$\varphi(x;t) = \widehat{\varphi}(x) \exp\left(-i\mu t\right) \tag{4.10}$$

Onde  $\mu$  representa o potencial químico do sistema de pares de átomos de Fermi, na armadilha. Assim a equação adimensional numa dimensão (eq. 4.8) fica:

$$i\widehat{\varphi}\left(x\right)\frac{d}{dt}\exp\left(-i\mu t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\frac{d^{2}}{dx^{2}} + \frac{1}{2}x^{2} \\ +\mathcal{N}\left|\widehat{\varphi}\left(x\right)\exp\left(-i\mu t\right)\right|^{4/3} \end{bmatrix} \widehat{\varphi}\left(x\right)\exp\left(-i\mu t\right)$$
(4.11)

Onde  $\mathcal{N} = \frac{6}{5} \left( 6\pi N \sqrt{\kappa \lambda} \right)^{2/3}$ . Derivando no tempo, finalmente encontramos a equação de funcional densidade independente do tempo numa dimensão:

$$\mu \varphi(x) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \frac{6}{5} \left( 6\pi N \sqrt{\kappa \lambda} \right)^{2/3} |\varphi(x)|^{4/3} \right] \varphi(x)$$
(4.12)

Lembramos  $\mu$  representa o potencial químico para o sistema de pares na armadilha. Para a normalização neste caso temos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$$
(4.13)

Estas expressões correspondem com a equação efetiva DF normalizada independente do tempo que descreve o superfluido de pares de átomos de Fermi numa dimensão.

## 4.2 Equação Para o Limite BEC

Para o superfluido de Fermi na região de interação repulsiva entre os dímeros que corresponde com o limite BEC  $(a_d \rightarrow +0)$  (ver pag.22), lembramos que a forma do potencial químico de volume é:

$$\overline{\mu}_0\left(\overline{n}_d, \overline{a}_d\right) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \overline{a}_d \,\overline{n}_d \left[1 + \alpha \left(\overline{a}_d \,\overline{n}_d^{1/3}\right)^{3/2}\right]$$

Onde  $\alpha = 32/(3\sqrt{\pi})$ . Neste caso o potencial químico de volume modificado pela transformação 2.28 muda da forma:

$$\mu_{0}(a_{f},n) = (ml^{2}/\hbar^{2}) \overline{\mu}_{0}(\overline{a}_{f},\overline{n}) = (ml^{2}/\hbar^{2}) \frac{4\pi\hbar^{2}}{ml^{2}} a_{d} n_{d} \left[1 + \alpha \left(a_{d} n_{d}^{1/3}\right)^{3/2}\right]$$

$$\mu_{0}(a_{f},n) = 4\pi a_{d} n_{d} \left[1 + \alpha \left(a_{d} n_{d}^{1/3}\right)^{3/2}\right]$$
(4.14)

Onde agora  $a_d$  e  $n_d$  não têm dimensões.

Assim a equação DF em quantidades sem dimensões que descrever os dímeros no superfluido de Fermi prisioneiros pela ação de uma armadilha anisotrópica (eq. 2.29), modificada no limite BEC tem a forma:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x,y,z;t\right) = \left\{ \begin{array}{c} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(\nu^{2}x^{2} + \kappa^{2}y^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) \\ +4\pi a_{d} n_{d}\left[1 + \alpha\left(a_{d} n_{d}^{1/3}\right)^{3/2}\right] \end{array} \right\}\varphi\left(x,y,z;t\right)$$

$$(4.15)$$

Com normalização e densidade de pares determinadas por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \ |\varphi(x, y, z; t)|^{2} = 1 , \ n_{d} = N \ |\varphi(x, y, z; t)|^{2}$$
(4.16)

Do mesmo jeito da equação 2.38 temos que para simetria axial no limite BEC:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(\rho,z;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial\rho^{2}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(\rho^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) \\ +4\pi a_{d} n_{d}\left[1 + \alpha\left(a_{d} n_{d}^{1/3}\right)^{3/2}\right] \end{bmatrix}\varphi\left(\rho,z;t\right)$$
(4.17)

Onde a normalização e densidade de pares são:

$$2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \, |\varphi(\rho, z; t)|^2 = 1 \, , \ n = N \, |\varphi(\rho, z; t)|^2$$
(4.18)

#### 4.2.1 Equação BEC em Duas Dimensões

Para o caso de uma armadilha anisotrópica em duas dimensões com forte confinamento axial no limite BEC o termo não linear (eq. 2.60) tem a forma:

$$\mu_{0}'(n_{d}, a_{d}) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \ \mu_{0}(n_{d}, a_{d}) \ \phi_{0}^{2}(z) = 4\pi a_{d} \int_{-\infty}^{\infty} dz \ n_{d} \left[ 1 + \alpha \left( a_{d} \ n_{d}^{1/3} \right)^{3/2} \right] \ \phi_{0}^{2}(z)$$
(4.19)

Considerando que o sistema permanece confinado no estado base na direção axial (eq. 2.52) obtemos:

$$\mu_0'(n_d, a_d) = 4\pi a_d N |\varphi(x, y; t)|^2 \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dz |\phi_0(z)|^4 + \alpha a_d^{3/2} N^{1/2} \varphi(x, y; t) \int_{-\infty}^{\infty} dz |\phi_0(z)|^5 \right]$$

Com a forma conhecida para a função de onda do estado fundamental na direção z (eq. 2.53) temos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(z)|^4 dz = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-2\lambda z^2\right] dz = \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(z)|^5 dz = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{5/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-5\lambda z^2/2\right] dz = \sqrt{\frac{2}{5}} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{3/4}$$

Assim o termo não linear é:

$$\mu_{0}'(n_{d}, a_{d}) = 4\pi a_{d} N |\varphi(x, y; t)|^{2} \left[ \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}} + \alpha \ a_{d}^{3/2} \ N^{1/2} \varphi(x, y; t) \sqrt{\frac{2}{5}} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{3/4} \right]$$
(4.20)

Desta forma podemos definir o potencial químico de volume para o limite BEC no caso da redução bidimensional como:

$$\mu_0'(a_d, n_d) = 2a_d \ (2\pi\lambda)^{1/2} n_d \left[ 1 + \frac{2\alpha \left(\lambda/\pi\right)^{1/4}}{\sqrt{5}} \left(n_d^{1/3} a_d\right)^{3/2} \right]$$
(4.21)

Onde  $\alpha = 32/(3\sqrt{\pi})$ . Assim escrevemos a equação DF em quantidades sem dimensões (eq. 2.59) que descreve o sistema de dímeros para o superfluido de Fermi no limite BEC em duas dimensões:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x,y;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(x^{2} + \kappa^{2}y^{2}\right) + \mu_{0}'\left(a_{d},n_{d}\right)\right]\varphi\left(x,y;t\right) = 0 \quad (4.22)$$

Do mesmo jeito para simetria circular no limite BEC temos (eq. 2.63):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(r;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{r^{2}}{2} \\ +2a_{d}\left(2\pi\lambda\right)^{1/2}n_{d}\left[1 + \frac{2\alpha(\lambda/\pi)^{1/4}}{\sqrt{5}}\left(n_{d}^{1/3}a_{d}\right)^{3/2}\right] \end{bmatrix}\varphi\left(r;t\right)$$
(4.23)

Agora procuramos uma forma independente do tempo para a equação DF em duas dimensões no limite BEC. Vamos supor que a função de onda do estado estacionário tem uma dependência trivial com o tempo numa forma similar ao realizado na equação 2.32, de tal jeito que:

$$\varphi(x, y; t) = \widehat{\varphi}(x, y) \exp(-i\mu t)$$
(4.24)

Onde  $\mu$  representa o potencial químico do sistema de dímeros na armadilha. Assim a equação em duas dimensões fica:

$$i\widehat{\varphi}\left(x,y\right)\frac{\partial}{\partial t}\exp\left(-i\mu t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}\right) \\ +\frac{1}{2}\left(x^{2} + \kappa^{2}y^{2}\right) + \mu_{0}'\left(n_{d}, a_{d}\right) \end{bmatrix}\widehat{\varphi}\left(x,y\right)\exp\left(-i\mu t\right)$$

Derivando no tempo e eliminando a exponencial, encontramos para  $\hat{\varphi} = \varphi$  que a equação adimensional em duas dimensões é:

$$\mu\varphi\left(x,y\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}\left(x^2 + \kappa^2 y^2\right) + \mu_0'\left(n_d, a_d\right)\right]\varphi\left(x,y\right)$$
(4.25)

Onde o termo não linear corresponde com a equação 4.21, a normalização e densidade de partículas estão determinadas pela relação 2.61.

## 4.3 Equação no Limite da Unitariedade

Para o superfluido de Fermi no limite da unitariedade  $(a \rightarrow \pm \infty)$  (ver pag.23), temos que a forma do potencial químico de volume é:

$$\mu_0(\overline{n}) = 2\xi \frac{\hbar^2}{m} \left(6\pi^2\right)^{2/3} \overline{n}^{2/3}$$
(4.26)

Onde  $\xi = 0.44$ . Neste caso o potencial químico de volume modificado pela transformação 2.28 muda da forma:

$$\mu_0(a_f, n) = (ml^2/\hbar^2) \overline{\mu}_0(\overline{a}_f, \overline{n}) = (ml^2/\hbar^2) 2\xi \frac{\hbar^2}{ml^2} (6\pi^2)^{2/3} n^{2/3}$$

$$\mu_0(a_f, n) = 2\xi (6\pi^2)^{2/3} n^{2/3}$$
(4.27)

Assim a equação DF em quantidades sem dimensões que descrever o superfluido de Fermi numa armadilha anisotrópica (eq. 2.29), modificada no limite da unitariedade é:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x,y,z,t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + 2\xi\left(6\pi^{2}\right)^{2/3}n^{2/3} \\ +\frac{1}{2}\left(\nu^{2}x^{2} + \kappa^{2}y^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) \end{bmatrix}\varphi\left(x,y,z,t\right)$$
(4.28)

Com normalização e densidade de partículas n dadas por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \ |\varphi(x, y, z; t)|^2 = 1, \ n = N \ |\varphi(x, y, z; t)|^2$$
(4.29)

De este jeito para o limite da unitariedade em simetria axial temos a seguinte equação:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(\rho,z;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial\rho^{2}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) \\ +\frac{1}{2}\left(\rho^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) + 2\xi\left(6\pi^{2}\right)^{2/3}n^{2/3} \end{bmatrix}\varphi\left(\rho,z;t\right)$$
(4.30)

Com normalização e densidade de partículas n dadas por:

$$2\pi \int_{0}^{\infty} \rho \, d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \, |\varphi(\rho, z; t)|^{2} = 1, \ n = N \, |\varphi(\rho, z; t)|^{2}$$
(4.31)

### 4.3.1 Equação na Unitariedade 2D

No caso de uma armadilha com forma de disco no limite da unitariedade o termo não linear tem a forma (eq. 2.60):

$$\mu_0'(n) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \ \mu_0(n) \ \phi_0^2(z) = 2\xi \left(6\pi^2\right)^{2/3} \int_{-\infty}^{\infty} dz \ n^{2/3} \ \phi_0^2(z) \tag{4.32}$$

Considerando que o sistema permanece confinado no estado base na direção axial (eq. 2.52) fazemos:

$$\mu_0'(n) = 2\xi \left(6\pi^2\right)^{2/3} N^{2/3} |\varphi(x,y;t)|^{4/3} \int_{-\infty}^{\infty} dz |\phi_0(z)|^{10/3}$$

Com a função de onda do estado fundamental na direção z (eq. 2.53) obtemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(z)|^{10/3} dz = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{3}{6}} \left(\sqrt{\frac{3\pi}{5\lambda}}\right) = \sqrt{\frac{3}{5}} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/3}$$
(4.33)

Assim o termo não linear é:

$$\mu_0'(n) = \left[2\left(6\pi^2\right)^{2/3}n^{2/3}\right]\sqrt{\frac{3}{5}}\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/3}\xi = (2E_F)\ \gamma\ \xi \tag{4.34}$$

Onde  $\gamma = \sqrt{\frac{3}{5}} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/3}$ . Deste jeito finalmente escrevemos a equação DF em quantidades sem dimensões (eq. 2.59) no limite de  $a_d \to \pm \infty$ , em duas dimensões como:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(x,y;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(x^{2} + \kappa^{2}y^{2}\right) + \mu_{0}'\left(n\right)\right]\varphi\left(x,y;t\right) = 0$$
(4.35)

A forma estacionária desta equação pode-se encontrar considerando que a função de onda do estado estacionário tem uma dependência trivial com o tempo da mesma forma realizada na equação 2.32, de tal jeito que encontramos:

$$\mu\varphi\left(x,y\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}\left(x^2 + \kappa^2 y^2\right) + \mu_0'\left(n\right)\right]\varphi\left(x,y\right)$$
(4.36)

Com normalização e densiadade de dímeros dadas por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, |\varphi(x,y)|^2 = 1 , \ n = N \, |\varphi(x;y)|^2$$

$$(4.37)$$

#### 4.3.2 Redução 2D na Aproximação de Thomas-Fermi

Agora apresentamos uma forma alternativa de redução a duas dimensões para a equação DF em quantidades sem dimensões que não implica a escolha de uma solução gaussiana no limite da unitariedade.

Começamos com a equação que descrever o SF numa armadilha de simetria axial (eq. 4.30) na unitariedade:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(\rho,z;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial\rho^{2}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) \\ +\frac{1}{2}\left(\rho^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) + 2\xi\left(6\pi^{2}\right)^{2/3}n^{2/3} \end{bmatrix}\varphi\left(\rho,z;t\right)$$
(4.38)

Com normalização e densidade de partículas n dadas por:

$$\int d^{3}\mathbf{r} \left|\varphi\left(\mathbf{r},t\right)\right|^{2} = 1, \ n = N \left|\varphi\left(\mathbf{r},t\right)\right|^{2}$$
(4.39)

Onde  $\mathbf{r} \equiv (\rho, z)$ . Agora vamos considerar que a dinâmica do sistema fica restrita na direção axial assim o sistema permanece confinado no estado base na direção axial e a função de onda pode ter a forma:

$$\varphi(\rho, z; t) = \varphi(\rho, t) \phi(z, n_2(\rho, t))$$
(4.40)

Assim a normalização muda para:

$$\int d^{3}\mathbf{r} |\varphi(\rho,t)\phi(z,n_{2}(\rho,t))|^{2} \to \int d^{2}\rho |\varphi(\rho,t)|^{2} \int dz |\phi(z,n_{2})|^{2}$$
(4.41)

$$\int d^{2}\rho \left|\varphi\left(\rho,t\right)\right|^{2} = \int dz \ \left|\phi\left(z,n_{2}\right)\right|^{2} = 1$$
(4.42)

onde definimos a densidade de superficie da forma:

$$n_2(\rho,t) = N \left|\varphi(\rho,t)\right|^2 = N \int dz \, \left|\varphi(\mathbf{r},t)\right|^2$$
(4.43)

Com isto a equação axial válida no limite da unitariedade (eq. 4.30) tem a forma:

$$\begin{bmatrix} -i\phi(z,n_2)\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\rho,t) \\ -\frac{1}{2}\phi(z,n_2)\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\right)\varphi(\rho,t) - \frac{1}{2}\varphi(\rho,t)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\phi(z,n_2) \\ +\frac{1}{2}\rho^2\varphi(\rho,t)\phi(z,n_2) + \frac{1}{2}\lambda^2 z^2\varphi(\rho,t)\phi(z,n_2) \\ +2\xi\left(6\pi^2\right)^{2/3}N^{2/3}|\varphi(\rho,t)|^{4/3}|\phi(z,n_2)|^{4/3}\varphi(\rho,t)\phi(z,n_2) \end{bmatrix} = 0$$
(4.44)

Separamos adequadamente:

$$\phi(z, n_2) \left[ i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{2} \rho^2 \right] \varphi(\rho, t) =$$
$$= \varphi(\rho, t) \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} \lambda^2 z^2 + 2\xi \left( 6\pi^2 \right)^{2/3} n_2^{2/3} |\phi(z, n_2)|^{4/3} \right] \phi(z, n_2)$$

Multiplicamos por  $\phi^{*}\left(z,n_{2}\right)$ e integramos en z para obter:

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{1}{2}\rho^2 - \mu_z(n_2)\right]\varphi(\rho, t) = 0$$
(4.45)

Onde

$$\mu_{z}(n_{2}) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \,\phi^{*}(z, n_{2}) \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} + \frac{1}{2}\lambda^{2}z^{2} \\ +2\xi \left(6\pi^{2}\right)^{2/3}n_{2}^{2/3}|\phi(z, n_{2})|^{4/3} \end{bmatrix} \phi(z, n_{2})$$
(4.46)

Assim o potencial químico de volume  $\mu_z(n_2)$  pode ser encontrado através da seguinte equação DF estacionária numa dimensão:

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}\lambda^2 z^2 + 2\xi \left(6\pi^2\right)^{2/3} n_2^{2/3} \left|\phi\left(z,n_2\right)\right|^{4/3} - \mu_z\left(n_2\right)\right] \phi\left(z,n_2\right) = 0$$
(4.47)

Agora mudamos para variáveis escaladas empregando  $a_z = (1/\lambda)^{1/2}$  de forma que:

$$\overline{z} = z/a_z, \ \overline{\phi} = \sqrt{a_z}\phi, \ \overline{\mu}_z = \mu_z \ a_z^2$$
(4.48)

Assim obtemos:

$$\left[-\frac{1}{2a_{z}^{2}}\frac{\partial^{2}}{\partial\overline{z}^{2}}+\frac{1}{2}\lambda^{2}a_{z}^{2}\,\overline{z}^{2}-\overline{\mu}_{z}\left(n_{2}\right)/a_{z}^{2}+2\xi\left(6\pi^{2}\right)^{2/3}n_{2}^{2/3}\left|\overline{\phi}\left(\overline{z},n_{2}\right)\right|^{4/3}/a_{z}^{2/3}\,\right]\overline{\phi}\left(\overline{z},n_{2}\right)=0$$
(4.49)

Multiplicando por  $a_z^2$ , encontramos:

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial\overline{z}^{2}}+\frac{1}{2}\lambda^{2}a_{z}^{4}\,\overline{z}^{2}-\overline{\mu}_{z}\left(n_{2}\right)+2\xi\left(6\pi^{2}\right)^{2/3}a_{z}^{4/3}n_{2}^{2/3}\left|\overline{\phi}\left(\overline{z},n_{2}\right)\right|^{4/3}\,\right]\overline{\phi}\left(\overline{z},n_{2}\right)=0\quad(4.50)$$

Com  $\lambda^2 a_z^4 = 1$ , finalmente temos que:

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial\overline{z}^{2}} + \frac{1}{2}\overline{z}^{2} + 2\xi\left(6\pi^{2}\right)^{2/3}a_{z}^{4/3}n_{2}^{2/3}\left|\overline{\phi}\left(\overline{z},n_{2}\right)\right|^{4/3} - \overline{\mu}_{z}\left(n_{2}\right)\right]\overline{\phi}\left(\overline{z},n_{2}\right) = 0$$
(4.51)

Neste caso a normalização muda para:

$$a_{z} \int d\overline{z} \left| \overline{\phi} / \sqrt{a_{z}} \right|^{2} = 1 \rightarrow \int d\overline{z} \left| \overline{\phi} \left( \overline{z}, n_{2} \right) \right|^{2} = 1$$
(4.52)

Agora vamos aproveitar o fato que para o limite da unitariedade é mais adequada uma descripção feita empregando a aproximação de Thomas-Fermi, então desprezando o termo da energia cinêtica na equação 4.51 encontramos que:

$$\frac{1}{2}\overline{z}^{2} + \Omega \left| \overline{\phi} \left( \overline{z}, n_{2} \right) \right|^{4/3} - \overline{\mu}_{z} \left( n_{2} \right) = 0$$
(4.53)

Onde  $\Omega = 2\xi \left(6\pi^2\right)^{2/3} a_z^{4/3} n_2^{2/3}$ . Assim podemos ter uma forma para a função de onda:

$$\overline{\phi}\left(\overline{z}, n_2\right) = \left[\frac{1}{\Omega}\left(\overline{\mu}_z\left(n_2\right) - \overline{z}^2/2\right)\right]^{3/4}$$
(4.54)

Mas para definir a densidade de partículas no sistema como uma quantidade real é necessário que:

$$\overline{z}^2 < 2\overline{\mu}_z\left(n_2\right) \to \overline{z} < \pm\sqrt{2\overline{\mu}_z\left(n_2\right)} \tag{4.55}$$

Empregando isto temos que a condição de normalização muda da forma:

$$\int d\overline{z} \left| \overline{\phi}(\overline{z}, n_2) \right|^2 = 1 \rightarrow \int_{-\sqrt{2\mu_z}}^{\sqrt{2\mu_z}} \left| \frac{1}{2\Omega} \left( 2\overline{\mu}_z \left( n_2 \right) - \overline{z}^2 \right) \right|^{3/2} d\overline{z} = 1$$
(4.56)

Assim com a solução desta integral podemos ter uma expresão para o potencial químico de volume  $\overline{\mu}_z(n_2)$ :

$$\frac{1}{(2\Omega)^{3/2}} \frac{(3\pi)}{2} \overline{\mu}_z^2(n_2) = 1$$
(4.57)

Onde o potencial químico de volume é:

$$\overline{\mu}_{z}(n_{2}) = \left(\frac{4\xi \left(12\pi^{2}\right)^{2/3}}{(3\pi)^{2/3}} a_{z}^{4/3} n_{2}^{2/3}\right)^{3/4}$$
(4.58)

Lembrando que:

$$a_z = 1/\sqrt{\lambda}, \to a_z^{4/3} = 1/\lambda^{2/3}$$
 (4.59)

$$\overline{\mu}_z = \mu_z \ a_z^2 \to \overline{\mu}_z = \mu_z \ /\lambda \tag{4.60}$$

Obtemos:

$$\mu_{z}(n_{2}) = \lambda \left( \frac{4\xi \left( 12\pi^{2} \right)^{2/3}}{\left( 3\pi \right)^{2/3} \lambda^{2/3}} n_{2}^{2/3} \right)^{3/4}$$
(4.61)

Finalmente a forma mais adequada para o termo não linear da redução bidimensional na unitariedade é:

$$\mu_z (n_2) = \gamma \ n_2^{1/2} \tag{4.62}$$

Onde

$$\gamma = 4\xi^{3/4} \left(2\pi\lambda\right)^{1/2} \tag{4.63}$$

Assim em resumo temos agora para resolver em simetria circular a equação 4.45 no limite da unitariedade:

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{1}{2}\rho^2 - \mu_z(n_2)\right]\varphi(\rho, t) = 0$$
(4.64)

Com normalização

$$\int d^2 \rho \, |\varphi(\rho,t)|^2 = 2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \, |\varphi(\rho,t)|^2 = 1$$
(4.65)

Onde a densidade superficial tem uma relação com o parametro de ordem através do número total de partículas no sistema:

$$n_2 = N |\varphi(\rho, t)|^2$$
 (4.66)

## 4.4 Equação DF na Região Molecular

Nesta seção consideramos a forma do potencial químico de volume conhecida para os limites de acoplamento fraco e no limite da unitariedade procurando uma expresão com validez no crossover BEC-unitariedade, para descrever o sistema SF na região molecular prisioneiro pela ação de uma armadilha de simetria axial, em forma de disco e com simetria circular.

#### 4.4.1 Região Molecular para Simetria Axial

Lembrando a equação DF em quantidades sem dimensões que descreve o superfluido de Fermi numa armadilha de simetria axial (eq. 2.38):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(\rho,z;t\right) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial\rho^{2}} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\right) + \frac{1}{2}\left(\rho^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) \\ +\mu_{0}\left(n,a_{d}\right) \end{bmatrix}\varphi\left(\rho,z;t\right)$$
(4.67)

Com normalização e densidade de partículas dadas por:

$$2\pi \int_{0}^{\infty} \rho \, d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \, |\varphi(\rho, z; t)|^{2} = 1, \ n = N \, |\varphi(\rho, z; t)|^{2}$$
(4.68)

Para a região molecular empregamos a forma do potencial químico de volume válido no crossover BEC-unitariedade que encontramos na página 24:

$$\frac{\mu_0(n,a_d)}{2E_F} = \frac{2\pi}{(6\pi^2)^{2/3}} \frac{a_d n^{1/3} + \alpha (1+\nu) a_d^{5/2} n^{5/6}}{1 + \alpha \nu a_d^{3/2} n^{1/2} + \beta (1+\nu) a_d^{5/2} n^{5/6}}$$
(4.69)

Onde as constantes são:

$$\alpha = \frac{32}{3\sqrt{\pi}}, \ \beta = \alpha \frac{2\pi}{\xi \left(6\pi^2\right)^{2/3}}, \ \xi = 0.44, \ \nu = 0.042$$
(4.70)

## 4.4.2 Região Molecular para 2D G

Agora procuramos uma forma para o potencial químico de volume 2D válida na região de interação repulsiva, no crossover BEC-unitariedade, interpolando a forma dos termos não lineares que encontramos corretos para os limites BEC e da unitariedade na redução efetiva bidimensional feita na aproximação gaussiana (G) da equação 2.52. Por isto chamamos esta a aproximação 2D G.

Por simplicidade mudamos o potencial químico em função de uma nova variável adimensional  $(y = n_d^{1/3} a_d)$ , assim, para duas dimensões no limite BEC temos (da equação 4.21):

$$\frac{\mu_d (n_d, a_d)}{2E_F} = \gamma_1 \ y \left( 1 + \alpha_1 \ y^{3/2} \right)$$
(4.71)

Onde

$$\gamma_1 = \frac{(2\pi\lambda)^{1/2}}{(6\pi^2)^{2/3}}, \ \alpha_1 = \frac{2\alpha (\lambda/\pi)^{1/4}}{\sqrt{5}} = \frac{2(\lambda/\pi)^{1/4}}{\sqrt{5}} \left(\frac{32}{3\sqrt{\pi}}\right)$$

E lembrando que para o limite da unitariedade a equação 4.34 é:

$$\frac{\mu_0\left(n_d\right)}{2E_F} = \gamma\xi \tag{4.72}$$

Onde  $\gamma = \sqrt{\frac{3}{5}} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/3}$  e  $\xi = 0.44$ . Definimos o nosso potencial químico como uma quantidade sem dimensões para cobrir a região de interação repulsiva, assim:

$$\frac{\mu_0(n_d, a_d)}{2E_F} = \gamma_1 \frac{y + \alpha_1 (1 + \nu) y^{5/2}}{1 + \alpha_1 \nu y^{3/2} + \beta_1 (1 + \nu) y^{5/2}}, \ y > 0$$
(4.73)

Onde a constante é:

$$\beta_1 = \alpha_1 \gamma_1 / (\gamma \xi) \tag{4.74}$$

O parâmetro  $\nu$  pode ser ajustado para que a função  $\mu_0(n_d, a_d) / (2E_F)$  tenha uma primeira derivada continua na unitariedade com relação do parâmetro inverso de y. Não é difícil verificar que esta forma satisfaz os dois limites para qualquer valor do parâmetro  $\nu$  e empregando o fato da continuidade do potencial químico de volume no limite da unitariedade \* estabelecer que o valor adequado no caso bidimensional é:

$$\nu = 0.32097 \tag{4.75}$$

#### 4.4.3 Região Molecular para 2D TG

Agora procuramos uma forma para o potencial químico de volume 2D que chamaremos na aproximação TG que seja válida na região molecular, interpolando a forma dos termos não lineares que encontramos para o limite BEC na aproximação Gaussiana (G) e para a unitariedade na aproximação de Thomas-Fermi (T).

No limite BEC temos (eq. 4.21):

$$\mu_0(n, a_d) = \gamma_1 a_d \ n \left[ 1 + \alpha_1 \left( n^{1/3} a_d \right)^{3/2} \right]$$

Onde

$$\gamma_1 = 2 (2\pi\lambda)^{1/2}, \ \alpha_1 = \frac{2\alpha (\lambda/\pi)^{1/4}}{\sqrt{5}} = \frac{2 (\lambda/\pi)^{1/4}}{\sqrt{5}} \left(\frac{32}{3\sqrt{\pi}}\right)$$

E lembrando que para o limite da unitariedade bidimensional fazendo a aproximação de Thomas-Fermi a equação 4.62 é:

$$\mu_z \left( n_2 \right) = \gamma \; n_2^{1/2} \tag{4.76}$$

Onde

$$\gamma = (4\xi)^{3/4} (4\pi\lambda)^{1/2}$$
(4.77)

Definimos o nosso potencial químico como uma quantidade sem dimensões para cobrir a região de interação repulsiva, na aproximação TG assim:

$$\mu_0(n, a_d) = \gamma_1 a_d \ n \frac{\left[1 + \alpha_1 \left(\nu + 1\right) \left(n^{1/3} a_d\right)^{3/2}\right]}{1 + \alpha_1 \nu \left(n^{1/3} a_d\right)^{3/2} + \beta \left(\nu + 1\right) a_d^{5/2} n}$$
(4.78)

Onde as constantes são:

$$\gamma_1 = 2 (2\pi\lambda)^{1/2}, \ \alpha_1 = \frac{2 (\lambda/\pi)^{1/4}}{\sqrt{5}} \left(\frac{32}{3\sqrt{\pi}}\right), \ \beta = \gamma_1 \alpha_1/\gamma$$

O parâmetro  $\nu$  pode ser ajustado para que a  $\mu_0(n, a_d)$  tenha uma primeira derivada continua na unitariedade. Não é difícil verificar que esta forma satisfaz os dois limites para qualquer valor do parâmetro  $\nu$ .

<sup>\*</sup>Da mesma forma realizada na seção "Continuidade na primeira derivada do  $\mu$ "da página 25.

## 4.4.4 Região Molecular Simetria Circular

Lembrando a equação DF em quantidades sem dimensões que descreve o superfluido de Fermi numa armadilha de simetria circular (eq. 2.63):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi(r;t) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{r^2}{2} + \mu'_0(n_d, a_d)\right]\varphi(r;t)$$
(4.79)

Com normalização e densidade de partículas dadas por:

$$2\pi \int_0^\infty r \, dr \, |\varphi(r;t)|^2 = 1, \ n = N \, |\varphi(r;t)|^2$$
(4.80)

Para a região molecular empregamos a forma do potencial químico de volume bidimensional válido no crossover BEC-unitariedade que encontramos através da aproximação G (eq. 4.73) ou aquele válido na região molecular dentro da aproximação TG que encontramos na página 40.

# **Capítulo 5**

# Solução da Equação DF

## 5.1 Descrição Geral do Método de Solução

Podemos considerar a solução da equação de funcional densidade que descreve o superfluido de Fermi para cada um dos casos anteriores em três formas diferentes:

- 1. No limite de acoplamento fraco, onde o comprimento de espalhamento é muito pequeno, e pode se menosprezar o termo de interação inter-atômica empregamos a chamada aproximação variacional.
- Quando o número de partículas ou a interação inter-atômica são muito grandes, nós podemos menosprezar o termo da energia cinética, e solucionar no chamado limite de Thomas Fermi.
- 3. Uma solução numérica pode ser encontrada ao dividir a equação DF no espaço e tempo através do método semi-implicito Crank-Nicolson, para posteriormente solucionar por propagação em tempo imaginário (empregando pequenos intervalos de espaço e tempo) a nossa equação discretizada.

## 5.1.1 Solução Numérica

Para resolver a nossa equação DF, que tem uma estrutura matemática similar com a equação de Schrödinger, o problema é resolver uma equação diferencia parcial com a inclusão de um termo não linear. Assim uma idéia da abordagem de solução, e a seguinte: Partimos inicialmente da equação diferencial sem termo não linear (cuja solução é conhecida) usando uma função de onda tipo oscilador harmônico, para discretizar em espaço e tempo com aproximação das derivadas por diferenças finitas. Esta solução é incluída de novo na equação DF agora com consideração do termo não linear e desta vez empregamos o chamado método de discretizaçao Crank-Nicolson [34] para encontrar a solução requerida por propagação em espaço e tempo (os apêndices contem uma descrição maior do método Crank-Nicolson nos casos de interesse).

Para cada uma das soluções numéricas procuramos uma forma adequada do potencial químico do sistema empregando a condição de normalização dentro da equação estacionária em cada um dos caso.

Em nosso estudo da região molecular empregamos o fato que os dímeros (que são bósons) cumprem com uma interessante relação entre a energia e o potencial químico do sistema [9], [36], de forma que as duas expressões só diferem num termo constante que acompanha o coeficiente não linear. Por exemplo, no caso geral da equação estacionária DF anisotrópica em quantidades adimensionais (eq. 2.34):

$$\mu \varphi (\mathbf{r}) = \left[ -\frac{1}{2} \overrightarrow{\nabla}^2 + U(\mathbf{r}) + \mu_0(n, a) \right] \varphi (\mathbf{r})$$
(5.1)

A forma para a solução numérica do potencial químico de volume vai ser\*:

$$\mu = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \overrightarrow{\nabla} \varphi \left( \mathbf{r} \right) \right]^2 + \left[ U \left( \mathbf{r} \right) + \mu_0 \left( n, a \right) \right] \left| \varphi \left( \mathbf{r} \right) \right|^2 \right\}$$
(5.2)

E a expressão para a energia que permite encontrar a equação de movimento através de processos variacionais [36] tem a forma:

$$E = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \overrightarrow{\nabla} \varphi \left( \mathbf{r} \right) \right]^2 + \left[ U \left( \mathbf{r} \right) + \frac{1}{2} \mu_0 \left( n, a \right) \right] \left| \varphi \left( \mathbf{r} \right) \right|^2 \right\}$$
(5.3)

Além disso, no momento de conhecer a função de onda que é solução da equação DF todas as outras quantidades são integradas numéricamente empregando a regra de Simpson, por exemplo o tamanho médio do sistema, representado por o valor do raio médio quadrático:

$$r_{rms}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} r^2 \varphi^2(r) \, d\mathbf{r} \tag{5.4}$$

#### 5.1.2 Aproximação Variacional

Para a implementação do método variacional, empregamos o fato que a equação DF e a sua normalização podem ser derivadas desde uma Lagrangeana efetiva (L). Por simplicidade estudamos agora o caso de uma dimensão no limite BCS, assim definimos:

$$L(\mu, u(x)) = \int \pounds(\mu, u(x)) \, dx - \mu$$
(5.5)

<sup>\*</sup>A forma específica do potencial químico será estudada em diferentes cassos, um exemplo para simetria axial é a equação 5.20.

Onde  $\pounds$  representa a densidade lagrangeana tal que:

$$L = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \mu \ u^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{du}{dx} \right)^2 - \frac{x^2}{2} u^2 - \frac{3}{5} \mathcal{N} \left( u \right)^{10/3} \right] \ dx - \mu \tag{5.6}$$

Agora mostramos que a normalização da equação DF pode-se encontrar através da primeira derivada parcial da Lagrangeana com relação de  $\mu$ , isto é:

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = \frac{\partial}{\partial \mu} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \mu \, u^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{du}{dx} \right)^2 - \frac{x^2}{2} u^2 - \frac{3}{5} \mathcal{N} \left( u \right)^{10/3} \right] \, dx - \mu \right\} = 0 \tag{5.7}$$

Que corresponde com a condição de normalização (eq. 4.13):

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2 \, dx = 1 \tag{5.8}$$

Para encontrar a equação de movimento empregamos a equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\delta L}{\delta u} = \frac{\partial \pounds}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_x u)} \right] = 0$$
(5.9)

Onde temos que

$$\frac{\partial \pounds}{\partial u} = \frac{\partial}{\partial u} \left[ \mu \ u^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{du}{dx} \right)^2 - \frac{x^2}{2} u^2 - \frac{3}{5} \mathcal{N} (u)^{10/3} \right] = 2\mu \ u - x^2 u - 2\mathcal{N} \ u^{7/3}$$
(5.10)

Além de

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (d_x u)} \right] = \frac{d}{dx} \left[ -\left(\frac{du}{dx}\right) \right] = -\frac{d^2 u}{dx^2}$$
(5.11)

Assim, encontramos que:

$$\frac{\partial \pounds}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_x u)} \right] = 0 \to 2\mu \ u - x^2 u - 2\mathcal{N} \ u^{7/3} + \frac{d^2 u}{dx^2} = 0$$

Finalmente obtemos a equação de funcional densidade dada por:

$$\mu u + \frac{1}{2}\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{1}{2}x^2u - \mathcal{N} u^{7/3} = 0$$
(5.12)

Esta equação é equivalente com a expressão 4.12 que descrevem o SF para uma dimensão no limite BCS.

No desenvolvimento da aproximação variacional vamos propor uma função de prova inicial u(x) como uma função de onda real estacionária adequadamente normalizada para satisfazer a condição de normalização requerida pela equação não linear, determinada por um comportamento Gaussiano em função de alguns parâmetros variacionais. Empregando esta função inicial na Lagrangeana efetiva e através da sua mínimização com relação dos parâmetros variacionais encontraremos uma relação determinada para as quantidades que descrevem o sistema (exemplos em uma e duas dimensões são desenvolvidos nos apêndices).

#### 5.1.3 Aproximação de Thomas Fermi

Para um número de partículas muito grande ou uma interação inter-atômica muito forte nós podemos obter uma expressão para o estado base do sistema considerando que o termo não linear torna-se maior que a energia cinética, e com isto menosprezar o termo da energia cinética dentro da equação DF. No caso de uma dimensão (eq. 4.12) a DF pode ser escrita para a chamada aproximação de Thomas Fermi da forma:

$$u - \frac{1}{2}x^2 - \mathcal{N}|u(x)|^{4/3} = 0$$
(5.13)

Depois de menosprezar o termo da energia cinética é possível obter uma expressão analítica para a função de onda do sistema.

Esta aproximação da algumas condições que permitem restringir os limites espaciais e encontrar através da condição de normalização uma expressão para o potencial químico e da mesma forma solucionar a integral do raio médio quadrático do sistema.

Neste ponto é importante destacar que a aproximação de Thomas-Fermi (ou variacional) tem validade restrita a certos intervalos de interação ou número de partículas mas a solução numérica pode cobrir diferentes rangos dentro do limite de acoplamento fraco até o limite de interação forte (Uma comparação mais extensa entre estas aproximações e a solução numérica é realizada nos apêndices).

## 5.2 Solução Numérica da Equação DF em Simetria Axial

Agora vamos resolver a equação de funcional densidade independente do tempo válida no crossover BEC-unitariedade para uma armadilha com simetria axial (equação 4.67), que lembramos tem a forma:

$$\mu \varphi(\rho, z) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2} \left( \kappa^2 \rho^2 + \lambda^2 z^2 \right) \\ + \mu_0 \left( n_d, a_d \right) \end{bmatrix} \varphi(\rho, z)$$
(5.14)

De novo  $\mu$  representa o potencial químico do sistema de pares na armadilha e temos que para a região molecular o termo não linear tem a forma:

$$\mu_0(n_d, a_d) = \frac{4\pi a_d \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right) + 4\pi \alpha \left( 1 + \nu \right) a_d^{5/2} \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right)^{3/2}}{1 + \alpha \nu a_d^{3/2} \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right)^{1/2} + \beta \left( 1 + \nu \right) a_d^{5/2} \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right)^{5/6}}$$
(5.15)

Onde as constantes são:

$$\alpha = \frac{32}{3\sqrt{\pi}}, \ \beta = \alpha \frac{2\pi}{\xi \left(6\pi^2\right)^{2/3}}, \ \xi = 0.44, \ \nu = 0.042$$
(5.16)

a /a

lembramos que N representa o número de dímeros e a normalização e a densidade de partículas são:

$$2\pi \int_{0}^{\infty} \rho \, d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \, |\varphi(\rho, z)|^{2} = 1 \, , \, n_{d} = N \, |\varphi(\rho, z)|^{2}$$
 (5.17)

Solucionamos esta equação empregando o método de discretização semi-implicito Crank-Nicolson com propagação em tempo imaginário na base de programação Fortran. Conhecendo a solução da equação DF solucionamos numéricamente outras quantidades, por exemplo, empregando a equação DF independente do tempo podemos encontrar uma forma para o potencial químico do sistema, empregando a condição de normalização (eq. 5.17), para isto multiplicamos a equação DF (eq. 5.14) por  $2\pi\rho \varphi^*(\rho, z)$  e integramos em  $\rho$  e z, para obter:

$$\mu = 2\pi \int_{0}^{\infty} \rho \, d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \left\{ \begin{array}{c} -\frac{1}{2}\varphi\left(\rho,z\right) \left[\frac{\partial^{2}}{\partial\rho^{2}}\varphi\left(\rho,z\right) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\varphi\left(\rho,z\right)\right] - \frac{1}{2}\varphi\left(\rho,z\right)\frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}\varphi\left(\rho,z\right) \\ + \left[\frac{1}{2}\left(\kappa^{2}\rho^{2} + \lambda^{2}z^{2}\right) + \mu_{0}\left(n_{d},a_{d}\right)\right] \left|\varphi\left(\rho,z\right)\right|^{2} \right\}$$
(5.18)

Separamos a primeira integral do lado direito:

$$I_1 = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[ \int_0^{\infty} \rho \,\varphi \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \rho^2} \,d\rho + \int_0^{\infty} \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} \,d\rho \right]$$
(5.19)

Integrando por partes a integral  $I_1$  temos que:

$$I_1 = \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} \right)^2 \right]$$

Da mesma forma, integrando por partes a segunda integral do lado direito encontramos:

$$I_2 = \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \, \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)^2$$

Finalmente temos uma expressão matemática para resolver numéricamente é conhecer o potencial químico do sistema:

$$\mu = 2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left\{ \begin{array}{c} \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial \rho} \varphi\left(\rho, z\right) \right]^2 + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial z} \varphi\left(\rho, z\right) \right]^2 \\ + \left[ \frac{1}{2} \left( \kappa^2 \rho^2 + \lambda^2 z^2 \right) + \mu_0 \left( n_d, a_d \right) \right] \left| \varphi\left(\rho, z\right) \right|^2 \end{array} \right\}$$
(5.20)

Além, encontramos o raio médio quadrático do sistema definido pela equação 5.4 de forma tal que:

$$r_{rms}^{2} = 2\pi \int_{0}^{\infty} \rho \, d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \, \left(\rho^{2} + z^{2}\right) \, \varphi^{2}\left(\rho, z\right)$$
(5.21)

Resolvemos esta expressão numéricamente conhecendo a função de onda solução da equação DF.

### 5.2.1 Resultados em Simetria Axial

Os seguintes são resultados para um sistema SF de 500 dímeros em diversos valores de interação atômica no caso de uma armadilha de simetria axial de deformação

	a = 0.01	a = 0.15	a = 0.3	a = 0.5	a=2
$\mu$	5.75097	14.78677	19.98494	23.77439	27.28011
E	4.49624	10.83988	14.47644	16.98907	18.92576
$r_{rms}$	1.78987	2.99798	3.47459	3.72861	3.80441

Tabela 5.1: Resultados numéricos para um SF numa armadilha de simetria axial ao longo do crossover BEC-unitariedade.

 $\lambda = \sqrt{8}$ , que encontramos através da solução numérica das equações 5.14, 5.15 e 5.17 válidas na região molecular. Na tabela 5.1 podemos ver que as soluções numéricas satisfazem a relação física para o tamanho do sistema SF na medida em que o raio médio quadrático é maior quando incrementa a interação repulsiva dos dímeros no sistema desde o limite BEC  $(a \to +0)$  até o limite da unitariedade  $(a \to \pm\infty)$ .

Estes resultados numéricos são derivados da solução encontrada para a equação DF que descreve o sistema particular, e por tanto sua validade pode ser mais bem entendida analisando o comportamento da densidade radial de partículas com relação da coordenada radial.

Assim comparamos as soluções correspondentes para a equação DF no crossover BEC-unitariedade com a solução numérica de outras equações não lineares empregadas na descrição dos sistemas SF como são: a equação Gross-Pitaevskii (GP), a GP modificada (MGP) e a equação DF válida no limite da unitariedade. Para ter maior claridade em como obter cada uma das soluções apresentadas lembramos neste ponto a forma correspondente para o termo não linear em cada caso:

1. Para Gross-Pitaevskii (GP) temos:

$$\mu_0(n_d, a_d) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_d \ n_d \tag{5.22}$$

2. No caso da Gross-Pitaevskii modificada (MGP) empregamos (eq. 3.10):

$$\mu_0(n_d, a_d) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_d \ n_d \left[ 1 + \alpha \left( a_d \ n_d^{1/3} \right)^{3/2} \right], \text{ onde } \alpha = \frac{32}{3\sqrt{\pi}}$$
(5.23)

3. Para a equação de funcional densidade (DF) no limite da unitariedade lembramos da página 23 que:

$$\mu_0(n) = 2\xi E_F$$
, onde  $\xi = 0.44$  (5.24)

4. No caso da equação DF para a região molecular o termo não linear corresponde com a equação 5.15.



Figura 5.1: Densidade radial em função da coordenada radial no limite de acoplamento fraco, a = 0.01. O comportamento para a solução da equação DF é análogo aquele da GP e MGP.

Desta forma na figura 5.1 apresentamos os resultados numéricos para uma descrição no limite de acoplamento fraco empregado um valor para o comprimento de espalhamento de *a* = 0.01.Aqui encontramos que para valores pequenos do comprimento de espalhamento a descrição realizada pela equação de funcional densidade (DF) é semelhante com aquela da equação Gross-Pitaevskii (GP) ou Gross-Pitaevskii modificada (MGP). Já que a GP é muito empregada na descrição do estado condensado de Bose-Einstein, temos que nossos resultados da equação DF são válidos no limite de acoplamento fraco.

Incrementamos o valor da interação atômica procurando as soluções para o mesmo sistema de 500 dímeros em simetria axial com um valor do comprimento de espalhamento a = 0.3 (na fig. 5.2).



Figura 5.2: Densidade radial em função da distância radial para a = 3. As soluções das equações começam a ser diferentes com o incremento da interação atômica.

Empregando um comprimento de espalhamento de a = 0.5 representamos na figura 5.3 os resultados que descrevem o SF fora do limite de acoplamento fraco.



Figura 5.3: Densidade radial em função da coordenada radial fora do limite de acoplamento fraco (a = 0.5). As diferenças para a descrição feita em cada caso são mais ressaltadas.

No momento de considerar um incremento no termo de interação o comportamento das soluções da GP, MGP e DF vão se-distinguir de forma mais apropriada (fig. 5.2), de forma tal que fora do limite de interação fraca a descrição realizada pela MGP é muito diferente dos resultados apresentados pelas equações GP e DF (fig. 5.3).

Para o caso de interação forte procuramos as soluções do sistema com a = 2 e no limite da unitariedade (equação 4.30) representadas na figura 5.4.



Figura 5.4: Densidade radial em função da distância radial no limite de acoplamento forte, a = 2. Unicamente a descrição feita pela DF coincide com o resultado da unitariedade.

Na figura 5.4 a linha vermelha corresponde com a solução do sistema SF para 500 dímeros no limite da unitariedade, lembramos que neste caso a descrição é independiente do valor do comprimento de espalhamento, e satisfaz a equação 5.14 com um termo não linear dado por (eq. 3.13):

$$\mu_0(n_d) = 2\xi \ E_F \tag{5.25}$$

Desta forma podemos comprovar que quando as soluções da DF, GP, e MGP são estendidas ao límite de interação forte (o limite da unitariedade) a equação DF realiza uma descrição mais adequada, diferente das equações GP e MGP.

Neste ponto é bom realçãr que os resultados da equação DF descrevem o SF no limite de acoplamento fraco (BEC) e o limite da unitariedade. Mas agora surge uma pergunta:

A solução da equação DF é boa para um valor intermédio na região molecular?

Para esta questão comparamos o perfil da densidade radial da equação DF com cálculos *ab initio* de Montecarlo variacional (VMC) feitos por Nielsen *et.al.* [35] para um sistema SF de 500 partículas com comprimento de espalhamento a = 0.15155.



Figura 5.5: Densidade radial em função da distância radial. A descrição feita pela equação DF ajusta-se com os resultados de cálculos *ab initio* de Montecarlo variacional (VMC) e a solução no limite da unitariedade.

Na figura 5.5 as soluções das linhas contínuas exibem um bom acordo entre a solução da equação DF e o cálculo *ab initio* de Montecarlo variacional (VMC).

Ao mesmo tempo incluímos os resultados no limite de interação forte (a = 2 linha de pontos) para evidenciar que a solução da equação DF é mais adequada ao longo do crossover BEC-unitariedade.

De fato, mostramos que a equação DF apresenta resultados mais convenientes para o SF na região molecular. Então vamos efetuar mais uma pergunta:

Porque a descrição da equação DF seria melhor do que as feitas por GP ou MGP?

A resposta está na forma estabelecida para o termo não linear em cada uma das correspondentes equações. Para ver isto a continuação estudamos o comportamento do potencial químico de volume (o termo não linear) com relação ao comprimento de espalhamento em cada um dos casos.

Lembrando que  $n_d = N |\varphi|^2$ , definimos uma não linearidade efetiva fazendo  $\varphi = 1$  nas equações 5.22, 5.23 e 5.15 e desta forma podemos obter para um N fixo uma forma do termo não linear em cada um dos casos de interesse. Isto é representado na figura 5.6.



Figura 5.6: Termo não linear em função do comprimento de espalhamento. Unicamente o termo não linear da equação DF satura com o aumento do comprimento de espalhamento

Um resultado muito importante é que para a equação GP a não linearidade incrementa linearmente para tudo comprimento de espalhamento, ao mesmo tempo em que para a MGP o termo não linear incrementa indefinidamente com uma dependência mais complicada sobre o *a*, sem embargo a não linearidade da equação DF satura para grandes valores do comprimento de espalhamento (fig. 5.6).

É esta forma do termo não linear na equação de funcional de densidade a que permite estudar as propriedades de um sistema SF com interação fortemente.

Os resultados também são adequados para as outras quantidades físicas. Na tabela 5.2 damos resultados da energia (*E*), o potencial químico ( $\mu$ ) e o tamanho medio do sistema ( $r_{rms}$ ), para diferentes comprimentos de espalhamento (a = 0.15 e a = 2)

num SF de N=500 dímeros, numa armadilha de simetria axial com deformação  $\lambda=\sqrt{8}.$ 

	a = 0.15			a = 2			
	GP	DF	MGP	VMC	GP	DF	UN
$\mu$	12.9*	14.8	$15.4^{*}$	-	35.6	27.2	27.2
E	9.5*	10.8	$11.1^{*}$	$11.2^{*}$	25.5	18.9	18.8
$r_{rms}$	2.77	2.99	3.09	-	4.63	3.80	3.79

Tabela 5.2: Resultados numéricos para o SF em (a = 0.15 e a = 2). UN representa a solução numérica no limite da unitariedade e os datos com asterisco são tomados de [35]: J. K. Nilsen, *et al. Phys. Rev. A* **71**, 053610 (2005).

Novamente temos que os resultados da equação GP, MGP e DF são semelhantes no limite de acoplamento fraco e a equação DF realiza uma descrição mais adequada no limite da unitariedade.

## 5.3 Solução Numérica em estado de Vórtice

Empregando a equação DF que descreve os estados estacionário de um dímero com rotação no SF (eq. 2.27):

$$\mu \varphi(\rho, z) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2} \left( \kappa^2 \rho^2 + \lambda^2 z^2 \right) \\ + \frac{1}{2} \frac{l^2}{\rho^2} + \mu_0 \left( n_d, a_d \right) \end{bmatrix} \varphi(\rho, z)$$
(5.26)

Onde o termo não linear na região molecular tem a forma:

$$\mu_0(n_d, a_d) = \frac{4\pi a_d \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right) + 4\pi \alpha \left( 1 + \nu \right) a_d^{5/2} \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right)^{3/2}}{1 + \alpha \nu a_d^{3/2} \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right)^{1/2} + \beta \left( 1 + \nu \right) a_d^{5/2} \left( N |\varphi(\rho, z)|^2 \right)^{5/6}}$$
(5.27)

Podemos encontrar uma forma para o potencial químico do sistema, empregando a condição de normalização:

$$2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \, \left|\varphi\left(\rho,z\right)\right|^2 = 1$$

Então multiplicamos a equação 5.26 por  $2\pi\rho \ \varphi(\rho, z)$  e integramos em  $\rho$  e z, para obter:

$$\mu = 2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \begin{cases} -\frac{1}{2}\varphi\left(\rho,z\right) \left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\varphi\left(\rho,z\right) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\varphi\left(\rho,z\right)\right] \\ -\frac{1}{2}\varphi\left(\rho,z\right)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi\left(\rho,z\right) \\ + \left[\frac{1}{2}\left(\kappa^2\rho^2 + \lambda^2z^2\right) \\ +\frac{1}{2}\frac{l^2}{\rho^2} + \mu_0\left(n_d,a_d\right)\right] \left|\varphi\left(\rho,z\right)\right|^2 \end{cases}$$

Integrando por partes as primeiras três integrais do lado direito, encontramos finalmente que (do mesmo jeito feito na página 46):

$$\mu = 2\pi \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left\{ \begin{array}{c} \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial \rho} \varphi\left(\rho, z\right) \right]^2 + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial z} \varphi\left(\rho, z\right) \right]^2 \\ + \left[ \frac{1}{2} \left( \kappa^2 \rho^2 + \lambda^2 z^2 \right) + \frac{l^2}{2\rho^2} + \mu \left(n_d, a_d\right) \right] |\varphi\left(\rho, z\right)|^2 \end{array} \right\}$$

Esta expressão permite conhecer resultados numéricos para o potencial químico do sistema. O raio médio quadrático tem a mesma expressão válida para o caso de momento angular zero (eq. 5.21).

#### 5.3.1 Resultados em Estado de Vórtice

Os seguintes são resultados para a densidade radial num SF com inclusão de momento angular l = 1, para 500 dímeros em diversos valores de interação atômica no caso de uma armadilha de simetria axial (eq. 5.26) de deformação  $\lambda = \sqrt{8}$ .

O resultado perto do limite de acoplamento fraco é apresentado na figura 5.7 empregando um comprimento de espalhamento a = 0.15.



Figura 5.7: Densidade radial em função da distância radial para o estado de vórtice perto do limite de acoplamento fraco. Com a inclusão do momento angular temos a geração do vórtice.

Nesta figura evidenciamos a geração do estado de vórtice no momento que a densidade do sistema anula-se no ponto de simetria rotacional  $\rho = 0$ .

O vórtice é realçãdo confrontando com a linha azul que representa a solução para simetria axial no caso de momento angular zero.

Agora no limite de interação forte estudamos (na figura 5.8) a equação DF com um comprimento de espalhamento a = 2, e o caso da unitariedade com a contribução adicional do termo de barreira centrífuga.



Figura 5.8: Densidade radial em função da distância radial para o estado de vórtice no limite de interação forte. A descrição da equação DF coincide com o limite da unitariedade.

Novamente encontramos que a equação DF realiza uma descrição mais adequada que a equação GP estendida no límite de interação forte. Desta forma temos que a equação DF é adequada para o estudo do estado de vórtice e por tanto da superfluidez no sistema no limite da unitariedade.

## 5.4 Solução Numérica em 2D

Nesta seção apresentamos resultados para a equação efetiva DF bidimensional, que lembramos no caso de simetria circular tem a forma (eq. 2.63):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(r;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{r^{2}}{2} + \mu_{0}\left(n,a\right)\right]\varphi\left(r;t\right)$$
(5.28)

Com normalização e densidade de partículas:

$$2\pi \int_0^\infty r \, dr \, |\varphi(r;t)|^2 = 1, \ n = N \, |\varphi(r;t)|^2$$
(5.29)

Para a descrição na região molecular empregamos as duas formas do termo não linear bidimensional: Chamaremos *DF CirG* aquela solução construída com a aproximação Gaussiana na equação 4.73 e *DF CirTG* aquela feita a través da aproximação Thomas-Fermi e Gaussiana na equação 4.78.

Tomaremos dois diferentes sistemas formados por N = 10 e N = 500 dímeros, em valores de comprimento de espalhamento que permitam descrever os limites de acoplamento fraco e interação forte. Para um sistema de N = 10 dímeros e comprimento de espalhamento a = 0.01, temos uma descrição certa para o limite de acoplamento fraco onde encontramos os resultados da figura 5.9.



Figura 5.9: Densidade radial em função da distância radial para simetria circular a = 0.01. No limite de acoplamento fraco as duas reduções 2D coincidem com o resultado em simetria axial 3D.

Nesta descrição muito próxima do limite BEC os resultados obtidos pelas duas reduções bidimensionais são justamente iguais de aqueles encontrados através da solução em simetria axial.

Incrementando o termo de interação procuramos a solução para um sistema com maior número de partículas (N = 500) no limite de interação forte (tomando a = 2), e os resultados são mostrados na figura 5.10.

Aqui encontramos que as duas reduções tem comportamentos diferentes, quando a não linearidade incrementa a aproximação gaussiana não é boa e por isto a descrição feita por *DF CirTG* não corresponde com o sistema no limite de interação forte. Assim a descrição mais adequada para o limite da unitariedade é feita pela redução bidimensional que toma a aproximação Thomas Fermi para grandes não linearidades.



Figura 5.10: Densidade radial em função da distância radial para simetria circular no limite de interação forte. A redução bidimensional *CirTG* é mais adequada no limite da unitariedade.

## Análise dos Resultados e Perspectivas

Desta forma mostramos neste trabalho a construção de uma equação de funcional densidade (DF) equivalente com as equações de Landau da hidrodinâmica que descreve algumas características principais de um sistema superfluido (SF) tal como a energia, o tamanho meío e o potencial químico do sistema para diferentes valores de interação atômica e faz uma adequada descrição do estado de vórtice no SF no limite de interação fraca y também no limite da unitariedade.

Nós encontramos que a equação DF realiza uma descrição semelhante com a equação Gross-Pitaevskii (GP) ou Gross-Pitaevskii modificada (MGP) para valores pequenos do comprimento de espalhamento, assim comprovamos que nossos resultados são válidos no limite de acoplamento fraco.

Para um sistema SF confinado numa armadilha de simetria axial estendimos as soluções da DF, GP, e MGP no limite de interação forte e encontramos que a equação DF realiza uma descrição mais adequada do sistema, de forma que a equação DF pode ser empregada para sistemas com comprimento de espalhamento fora do limite de interação fraca e além permite encontrar soluções validas no limite da unitariedade.

Com estes resultados comprovamos que a nossa formulação não está restringida pelos valores do comprimento de espalhamento nem pelo número de partículas e neste ponto é importante realçar que a solução numérica da nossa equação DF exige um custo computacional muito inferior de aquele necessário na simulação Monte Carlo já que consiste só na solução numérica de uma equação diferencial não linear.

Numéricamente a complexidade exigida pela nossa equação DF não é maior do que a solução numérica precisada pela conhecida equação Gross-Pitaevskii, com a diferença que a equação DF pode ser empregada para qualquer valor do comprimento de espalhamento assim que, de forma diferente a outras formulações da literatura, nossas soluções permitem descrever o SF ao longo do crossover BEC-unitariedade para qualquer número de partículas ou valor de interação.

Recentemente a equação DF tem sido aplicada para o estudo de fenômenos como o *efeito Josephson dc* em sistemas superfluido de átomos fermiônicos com interação de pares na região molecular [37], de conformidade com o que nós encontramos neste trabalho a forma do termo não linear na equação DF permite estudar as propriedades de um sistema SF com interação fortemente e isto poderia ter aplicações importantes por exemplo no estudo de sistemas supercondutores de alta temperatura crítica (H-Tc Supercondutivity).

# **Apêndice** A

# Solução da Equação DF 1D no Limite BCS

Para o caso de uma armadilha de simetria axial com forte confinamento transversal, temos o sistema com forma de cigarro e então podemos construir uma equação efetiva 1D; agora procuramos a solução da equação de funcional densidade estacionária no limite BCS numa dimensão (equação 4.12), que tem a forma:

$$\mu \varphi \left(x;t\right) = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}x^2 + \mathcal{N}\left|\varphi\left(x;t\right)\right|^{4/3}\right]\varphi\left(x;t\right)$$
(A.1)

Onde  $\mathcal{N} = \frac{6}{5} \left( 6\pi N \sqrt{\kappa \lambda} \right)^{2/3}$ , N é o número de pares de átomos, e  $\mu$  representa o potencial químico para o sistema de pares na armadilha. A normalização associada com nossa equação é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^2(x) \, dx = 1 \tag{A.2}$$

## A.1 Solução Numérica

O nosso interes é o estudo dos estados estacionários da equação DF em diferentes simetrias, para isto empregamos o procedimento de discretização semi-implicito Crank-Nicolson com propagação em tempo imaginário [34] que se pode obter substituindo a variável tempo por um tempo imaginário  $t \rightarrow -i\overline{t}$ . Isto implica que a equação DF só dependera de variáveis reais. Por simplicidade consideramos uma forma geral da equação unidimesional dependente do tempo (eq. 2.50 ou equação 4.8):

$$-\frac{\partial}{\partial \bar{t}}\varphi\left(x,\bar{t}\right) = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}x^2 + \mu_0\right]\varphi\left(x,\bar{t}\right) = \hat{H}\varphi\left(x,\bar{t}\right)$$
(A.3)

Onde  $\mu_0$ , é o termo não linear,  $\overline{t}$  é um parâmetro matematico e o Hamiltoniano completo  $\hat{H}$  contem todos os termos lineares e não lineares além das derivadas espaciais.

Primeiro a equação DF é discretizada em espaço e tempo para depois empregar uma solução inicial<sup>\*</sup> consistente com as condiçoes de fronteira conhecidas, e a través do método Crank-Nicolson obter um conjunto de equação algébraicas que permitem resolver a equação discretizada por iteração em pequenos intervalos de espaço e tempo.

No método de divisão em passos é conveniente separar o Hamiltoniano completo em dois partes: Uma parte que não contem derivadas formada pela contribução do potencial da armadilha e o termo não linear, e uma segunda parte que contem as derivadas espaciais referentes ao termo da energia cinêtica. Assim dividimos o  $\hat{H}$ em:

$$\hat{H} = H_1 + H_2$$
(A.4)
$$H_1 = \frac{1}{2}x^2 + \mu_0, \ H_2 = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

E a equação DF fica da forma:

$$-\frac{\partial}{\partial \bar{t}}\varphi\left(x,\bar{t}\right) = \left[\frac{1}{2}x^2 + \mu_0\right]\varphi\left(x,\bar{t}\right) = H_1\varphi\left(x,\bar{t}\right)$$
(A.5)

$$-\frac{\partial}{\partial \bar{t}}\varphi\left(x,\bar{t}\right) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi\left(x,\bar{t}\right) = H_2\varphi\left(x,\bar{t}\right)$$
(A.6)

Para o proceso de discretização comenzamos com um valor inicial  $\varphi(x, \bar{t}_0)$  (a  $\bar{t} = \bar{t}_0$ ), e resolvemos:

$$-\frac{\partial}{\partial \bar{t}}\varphi\left(x,\bar{t}_{0}\right) = \left[\frac{1}{2}x^{2} + \mu_{0}\right]\varphi\left(x,\bar{t}_{0}\right) = H_{1}\varphi\left(x,\bar{t}_{0}\right)$$
(A.7)

Com isto podemos obter uma solução intermédia a  $t = \overline{t}_0 + \Delta$ , onde  $\Delta$  é o intervalo do tempo, que empregamos depois como valor inicial para resolver a equação com a segunda parte do Hamiltoniano:

$$-\frac{\partial}{\partial \bar{t}}\varphi\left(x,\bar{t}_{0}+\Delta\right) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}\varphi\left(x,\bar{t}_{0}+\Delta\right) = H_{2}\varphi\left(x,\bar{t}_{0}+\Delta\right)$$
(A.8)

Este procedimento vai ser repetido n vezes para obter uma solução final num tempo dado  $\overline{t} = \overline{t}_0 + n\Delta$ .

<sup>\*</sup>Para o método de propagação em tempo imaginário a solução imposta não precisa ser solução analítica conhecida de um problema relacionado, mas nos empregamos uma solução gaussiana tipo oscilador harmônico.

Depois esta solução discretizada  $\varphi^n$  é propagada em tempo para cada uma das partes do Hamiltoniano, para o termo que não contem derivadas resolvemos a equação DF com  $\hat{H} = H_1$ :

$$-\frac{\partial}{\partial \bar{t}}\varphi\left(x,\bar{t}_{0}+n\Delta\right) = \left[\frac{1}{2}x^{2} + \mu\left(\varphi\left(x,\bar{t}_{0}+n\Delta\right)\right)\right]\varphi\left(x,\bar{t}_{0}+n\Delta\right)$$
(A.9)

Para encontrar uma solução intermédia  $\varphi^{n+1/2}$  desde  $\varphi^n$ . Como não existe derivada em  $H_1$ , esta propagação é realizada (para pequenos  $\Delta$ ) através da operação:

$$\varphi^{n+\frac{1}{2}} = \widehat{O}_{nd} \left( H_1 \right) \ \varphi^n = e^{-\Delta H_1} \ \varphi^n \tag{A.10}$$

Onde  $\hat{O}_{nd}$  é o operador de evolução temporal com  $H_1$  (que não contem derivadas sub-índice nd), para posteriormente realizar a propagação em tempo correspondente com o operador  $H_2$ , de forma que propagamos a solução intermédia  $\varphi^{n+\frac{1}{2}}$  por um passo de tempo  $\Delta$  gerando a solução no seguinte passo de tempo  $\bar{t}_{n+1}$ , da forma:

$$\varphi^{n+1} = \widehat{O}_{CN}(H_2) \ \varphi^{n+\frac{1}{2}} = \widehat{O}_{CN}(H_2) \ \widehat{O}_{nd}(H_1) \ \varphi^n \tag{A.11}$$

Onde o sub-índice CN indica que o operador correspondente ao  $H_2$  é calculado empregando o método semi-implicito de Crank-Nicolson que leva a equação DF dentro de  $N_x$  pontos numa rede espacial unidimensional em x, assim a discretização no espaço vai como:

 $x = x_i = ih$ , Onde  $i = 0, 1, 2, ..., N_x$  e h é o passo no espaço

Deste jeito a propagação em tempo que corresponde com o termo  $H_2$  está dada pela relação [34]:

$$\frac{\left(\varphi_{i}^{n+1}-\varphi_{i}^{n+1/2}\right)}{\Delta} = \frac{1}{4h^{2}} \left[ \left(\varphi_{i+1}^{n+1}-2\varphi_{i}^{n+1}+\varphi_{i-1}^{n+1}\right) + \left(\varphi_{i+1}^{n+1/2}-2\varphi_{i}^{n+1/2}+\varphi_{i-1}^{n+1/2}\right) \right]$$
(A.12)

### A.1.1 Potencial Químico 1D

Procuramos uma expressão para a solução numérica do potencial químico, multiplicando a equação A.1 por  $\varphi(x)$  e integramos em tudo o espaço:

$$\mu \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^2(x) \, dx = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \, \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) \, dx + \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^2(x) \left(\frac{x^2}{2} + \mathcal{N} \, \varphi^{4/3}(x)\right) \, dx \tag{A.13}$$

Onde integrando por partes a primeira integral da direita, temos:

$$-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)\ dx = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d\varphi(x)}{dx}\right)^2dx$$
(A.14)

Depois de empregar a relação de normalização, a expressão para o potencial químico fica:

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{d\varphi(x)}{dx} \right)^2 + \varphi^2(x) \left( \frac{x^2}{2} + \mathcal{N} \varphi^{4/3}(x) \right) \right] dx$$
 (A.15)

### A.1.2 Resultados Numéricos 1D

Na seguinte tabela, apresentamos os valores do potencial químico  $\mu$ , o raio médio quadrático rms, e a função de onda no origem, para diversas não linearidades ( $\mathcal{N}$ ) no caso de uma dimensão. Empregamos  $N_x = 8 \times 10^3$  pontos no espaço, um passo espacial  $DX = 25 \times 10^{-4}$  e um passo no tempo  $DT = 2 \times 10^{-5}$ .

$\mathcal{N}$	$arphi\left(0 ight)$	$x_{rms}$	$\mu$
0	0.75112	0.70711	0.5
5	0.59925	1.02931	2.684131
10	0.53351	1.26047	4.416829
50	0.39645	2.21534	14.587810
100	0.34820	2.86348	24.511880
500	0.25752	5.22658	81.922069
1000	0.22613	6.77716	137.771593

Tabela A.1: Resultados numéricos da equação DF 1D.

Na figura A.1 apresentamos a representação gráfica do perfil da função de onda para o SF no limite BCS numa armadilha unidimensional com relação ao aumento da não linearidade.



Figura A.1: Função de onda para o sistema SF com forma de cigarro (caso 1D). *N* corresponde com o valor do termo não linear dentro da equação DF.

## A.2 Aproximação Variacional

No caso de uma dimensão e para o limite BCS definimos a Lagrangena efetiva da forma:

$$L(\mu, u(x)) = \int \pounds(\mu, u(x)) \, dx - \mu \tag{A.16}$$

Onde  $\pounds$  representa a densidade lagrangeana dada por:

$$\pounds (\mu, u(x)) = \mu u^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{du}{dx}\right)^2 - \frac{x^2}{2}u^2 - \frac{3}{5}\mathcal{N}(u)^{10/3}$$
(A.17)

#### A.2.1 Forma da Lagrangeana

Na aproximação variacional consideramos u(x) como uma função de onda real estacionária, dada pela gaussiana:

$$u(x) = \pi^{-1/4} \sqrt{\frac{\eta}{w}} \exp\left(-\frac{x^2}{2w^2}\right)$$
 (A.18)

Onde  $\eta \in w$  são parâmetros variacionais que representam a norma  $(\eta)$  da solução u(x), e a largura (w) da função de onda.

Agora vamos substituir a forma de u(x) na Lagrangeana, para obter:

$$L = \begin{bmatrix} \mu \frac{\eta}{\sqrt{\pi w}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{w^2}\right) dx - \frac{1}{2} \frac{\eta}{\sqrt{\pi w^5}} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{w^2}\right) dx \right] \\ -\frac{\eta}{2\sqrt{\pi w}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{w^2}\right) dx - \frac{3}{5} \mathcal{N} \left(\pi^{-1/4} \sqrt{\frac{\eta}{w}}\right)^{10/3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{5x^2}{3w^2}\right) dx \end{bmatrix} - \mu$$

Com o valor das integrais temos que:

$$L = \left[ \mu \frac{\eta}{\sqrt{\pi}w} \sqrt{\pi w^2} - \frac{1}{2} \frac{\eta}{\sqrt{\pi}w^5} \frac{w^3}{2} \sqrt{\pi} - \frac{\eta}{2\sqrt{\pi}w} \frac{w^3}{2} \sqrt{\pi} - \frac{3}{5} \mathcal{N} \pi^{-5/6} \left(\frac{\eta}{w}\right)^{5/3} \sqrt{\frac{3\pi w^2}{5}} \right] - \mu$$

Assim finalmente encontramos:

$$L = \mu \eta - \frac{1}{4w^2} \eta - \frac{1}{4} \eta w^2 - \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \mathcal{N} \frac{\eta^{5/3}}{\pi^{1/3} (w)^{2/3}} - \mu$$
(A.19)

Esta última expressão corresponde com a forma da Lagrangeana que vamos a empregar na aproximação variacional.

## A.2.2 Equações Variacionais

Com a forma da Lagrangeana tomamos uma primeira equação variacional com relação de  $\mu$ :

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = \frac{\partial}{\partial \mu} \left[ \mu \eta - \frac{1}{4w^2} \eta - \frac{1}{4} \eta w^2 - \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \mathcal{N} \frac{\eta^{5/3}}{\pi^{1/3} (w)^{2/3}} - \mu \right] = 0 , \quad \to \eta - 1 = 0$$

Assim o parâmetro variacional  $(\eta)$  que representa a norma da solução u(x) é:

$$\eta = 1 \tag{A.20}$$

Agora tomamos uma segunda equação variacional com relação do parâmetro w:

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \frac{\partial}{\partial w} \left[ \mu \eta - \frac{1}{4w^2} \eta - \frac{1}{4} \eta w^2 - \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \mathcal{N} \frac{\eta^{5/3}}{\pi^{1/3} (w)^{2/3}} - \mu \right] = 0$$
  
$$\rightarrow \frac{1}{2w^3} \eta - \frac{w}{2} \eta + \frac{2}{3} \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \mathcal{N} \frac{\eta^{5/3}}{\pi^{1/3} (w)^{5/3}} = 0$$

Com  $\eta = 1$  então:

$$\frac{1}{2w^3} - \frac{w}{2} + \frac{2}{3} \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \mathcal{N} \frac{1}{\pi^{1/3} (w)^{5/3}} = 0$$
$$1 - w^4 + \frac{4}{5\pi^{1/3}} \sqrt{\frac{3}{5}} \mathcal{N} w^{4/3} = 0$$

Assim temos uma expressão que permite encontrar o valor numérico de w, para sistemas com diferentes valor de não linearidade:

$$1 - w^4 + 0.423106 \mathcal{N} w^{4/3} = 0 \tag{A.21}$$

Agora empregamos a seguinte equação variacional para o parâmetro  $\eta$  e encontramos:

$$\frac{\partial L}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \mu \eta - \frac{1}{4w^2} \eta - \frac{1}{4} \eta w^2 - \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \mathcal{N} \frac{\eta^{5/3}}{\pi^{1/3} (w)^{2/3}} - \mu \right] = 0$$
$$\mu - \frac{1}{4w^2} - \frac{w^2}{4} - \frac{5}{3\pi^{1/3}} \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \mathcal{N} \left(\frac{\eta}{w}\right)^{2/3} = 0$$

Empregando o resultado de  $\eta=1$  temos o potencial químico como uma função de w e  $\mathcal{N}$ :

$$\mu = \frac{1}{4w^2} \left( 1 + w^4 \right) + \left( \frac{3}{5} \right)^{1/2} \mathcal{N} \frac{1}{\left( \pi w^2 \right)^{1/3}}$$
(A.22)

Assim diferentes valores numéricos de  $\mu$  podem ser encontrados.

#### Tamanho Médio Quadrático

Além, posso conhecer outra importante quantidade  $x_{rms}$  que representa o tamanho médio do sistema, pela definição do valor medio:

$$x_{rms}^{2} = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2} u^{2}(x) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}w} \int_{-\infty}^{\infty} x^{2} \exp\left(-\frac{x^{2}}{w^{2}}\right) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}w} \left(\frac{w^{3}}{2}\sqrt{\pi}\right) = \frac{w^{2}}{2}$$

Assim encontramos que  $x_{rms}$  esta dado por:

$$x_{rms} = \sqrt{\frac{w^2}{2}}$$

## A.2.3 Resultados Variacionais 1D

Desta forma, empregando o método variacional encontramos os seguintes valores para o potencial químico  $\mu$ , a funcão de onda no origem u(0) e o raio médio quadrático  $x_{rms}$  do SF unidimesional no limite BCS:

$\mathcal{N}$	w	$u\left(0 ight)$	$x_{rms}$	$\mu$	$\mu_{\#}$	erro%
0	1	0.75113	0.70711	0.5	0.5	0
0.5	1.05235	0.732203	0.74412	0.758202	0.757794	0.0005
5	1.45567	0.622559	1.02932	2.70655	2.684131	0.835
10	1.7856	0.562109	1.2626	4.46888	4.416829	1.180
50	3.15275	0.423027	2.2293	14.8091	14.587810	1.517

Tabela A.2: Resultados da aproximação variacional no SF 1D no limite BCS. A aproximação é boa para pequenas não linearidades.

## A.3 Aproximação de Thomas-Fermi

Para o desenvolvimento da aproximação de Thomas Fermi menosprezamos o termo da energia cinética dentro da equação A.1 numa dimensão, assim a DF pode ser escrita da forma:

$$\mu - \frac{1}{2}x^2 - \mathcal{N}|u(x)|^{4/3} = 0 \tag{A.23}$$

De onde podemos ter uma forma para a função de onda do sistema:

$$u(x) = \left[\frac{1}{\mathcal{N}}\left(\mu - \frac{1}{2}x^2\right)\right]^{3/4}$$
(A.24)

Assim,  $x^2 > 2\mu$  implica uma função de onda complexa (com parte real e parte imaginária). Mas para definir a densidade de pares <sup>†</sup> como uma quantidade real, é necessário que:

$$x^2 < 2\mu \to x < \pm \sqrt{2\mu} \tag{A.25}$$

Empregando isto na condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2(x) \, dx \to \int_{-\sqrt{2\mu}}^{\sqrt{2\mu}} \left[ \frac{1}{\mathcal{N}} \left( \mu - \frac{1}{2} x^2 \right) \right]^{3/2} dx = \frac{1}{\mathcal{N}^{3/2}} \left( \frac{3\pi}{4\sqrt{2}} \mu^2 \right) = 1$$

De aqui podemos ter uma expresão para o potencial químico no sistema:

$$\mu = \left[4\sqrt{2N^3}/(3\pi)\right]^{\frac{1}{2}} = \left[4\sqrt{2}\left[\frac{6}{5}\left(6\pi\right)^{2/3}\right]^{3/2}N\sqrt{\lambda}/(3\pi)\right]^{\frac{1}{2}}$$
(A.26)

<sup>&</sup>lt;sup>†</sup>Lembrese que a densidade do sistema está dada por  $n = u^2(x)$ .

Também encontramos o raio médio quadrático correspondente com:

$$x_{rms}^{2} = \frac{1}{\mathcal{N}^{3/2}} \int_{-\sqrt{2\mu}}^{\sqrt{2\mu}} x^{2} \left(\mu - \frac{1}{2}x^{2}\right)^{3/2} dx = \frac{1}{\mathcal{N}^{3/2}} \left[\frac{\pi}{4\sqrt{2}}\mu^{3}\right] = \frac{\mu}{3} \Rightarrow x_{rms} = \left(\frac{\mu}{3}\right)^{1/2} (A.27)$$

## A.3.1 Resultados Thomas-Fermi 1D

Apresentamos a continuação resultados para o potencial químico  $\mu$ , a funcão de onda no origem u(0) e o raio médio quadrático  $x_{rms}$  para diferentes valores da não linearidades dentro da aproximação de Thomas-Fermi do sistema unidimensional:

$\mathcal{N}$	$u\left(0 ight)$	$x_{rms}$	$\mu$	$\mu_{\#}$	erro%
0	-	-	-	0.5	_
5	0.61066	0.9292	2.5904	2.6841	3.492
10	0.53624	1.4522	4.3560	4.4168	1.3636
50	0.39655	2.2036	14.567	14.5878	0.1426
500	0.25752	5.2255	81.918	81.9220	0.00496

Desta forma encontramos que para o caso de uma armadilha com forma de cigarro

Tabela A.3: Resultados da aproximação Thomas-Fermi no SF unidimensional para o limite BCS. A aproximação não é boa para pequenas  $\mathcal{N}$ .

o sistema SF pode ser estudado empregando uma equação DF efetiva em uma dimensão, onde as soluções da aproximação variacional podem ser empregadas para pequenos valores da não linearidades, enquanto que para os casos onde o coeficiente não linear toma valores grandes a aproximação de Thomas-Fermi é uma descrição mais adequada (fig A.2).



Figura A.2: Perfil da função de onda do SF numa armadilha com forma de cigarro em diferentes não linearidades (N). A aproximação de Thomas-Fermi é válida para N grande e a aproximação variacional para N pequeno.

# **Apêndice B**

# Solução da Equação DF 2D para BEC

Para uma armadilha anisotrópica em duas dimensões com forte confinamento axial temos um sistema tipo disco e consideramos assim uma redução bidimensional da equação DF.

## B.1 Solução Numérica

No caso bidimensional (ou para uma armadilha com simetria axial) o procedimento para a solução numérica da equação DF é similar de aquele feito anteriormente na equação A.5 só que neste caso dividimos o Hamiltoniano em três partes:

$$\hat{H} = H_1 + H_2 + H_3 \tag{B.1}$$

Onde  $H_1$  é a parte do Hamiltoniano que não contem derivadas,  $H_2$  só contem as derivadas com relação à uma das variáveis x (ou  $\rho$  no caso de simetria axial) e  $H_3$ tem em si o termo com derivada da segunda variável y (ou z para simetria axial). Posteriormente realizamos a propagação em tempo empregando cada uma das partes do Hamiltoniano completo sucessivamente em passos independentes para completar um único passo sobre a evolução temporal de  $\hat{H}$ .

Assim para a equação DF em duas dimensões (equação 4.22), fazemos:

$$H_1 = \frac{1}{2} \left( x^2 + \kappa^2 y^2 \right) + \mu_0, \ H_2 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \ H_3 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$
(B.2)

E então a evolução temporal em  $H_1$  está dada pela equação A.10, e para a parte que depende das derivadas com  $H_2$  e  $H_3$  a evolução é feita pelas expresões A.11 e A.12 independentemente.
Agora para a equação DF em simetria axial (equação 4.67), temos que:

$$H_1 = \frac{1}{2} \left( \kappa^2 \rho^2 + \lambda^2 z^2 \right) + \mu_0, \ H_2 = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right), \ H_3 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
(B.3)

A única diferença neste caso é que  $H_2$  contem além da derivada de segundo ordem uma primeira derivada na variável  $\rho$ , e agora o método de discretização Crank-Nicolson [34] tem a forma:

$$\frac{\left(\varphi_{i}^{n+1}-\varphi_{i}^{n+1/2}\right)}{\Delta} = \frac{1}{4h^{2}} \begin{bmatrix} \left(\varphi_{i+1}^{n+1}-2\varphi_{i}^{n+1}+\varphi_{i-1}^{n+1}\right) + \left(\varphi_{i+1}^{n+1/2}-2\varphi_{i}^{n+1/2}+\varphi_{i-1}^{n+1/2}\right) \\ -\frac{1}{4\rho_{i}h} \left[ \left(\varphi_{i+1}^{n+1}-\varphi_{i-1}^{n+1}\right) + \left(\varphi_{i+1}^{n+1/2}-\varphi_{i-1}^{n+1/2}\right) \right] \end{bmatrix}$$
(B.4)

Para as partes do Hamiltoniano referentes com  $H_1$  e  $H_3$  continuam válidas as equações A.10, e A.12 independentemente.

Agora vamos tomar a equação DF estacionária em duas dimensões válida no limite BEC equação 4.25:

$$\mu\varphi(x,y) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}\left(x^2 + \kappa^2 y^2\right) + \mu_0\left(n_d, a_d\right)\right]\varphi(x,y)$$
(B.5)

Aqui  $\mu$  representa o potencial químico para o sistema de átomos na armadilha e o termo não linear corresponde com:

$$\mu_0(n_d, a_d) = 2a_d N \left(2\pi\lambda\right)^{1/2} |\varphi(x, y)|^2 \left[1 + 2\alpha \left(\lambda/\pi\right)^{1/4} \left(a_d^3 N/5\right)^{1/2} |\varphi(x, y)|\right]$$
(B.6)

Onde  $a_d \in N$  são o comprimento de espalhamento e o número de dímeros no sistema. A densidade de dímeros n está relacionada com o parâmetro de ordem da forma  $n = N |\varphi(x, y)|^2$ . Agora no limite de acoplamento fraco  $(a_d \rightarrow +0)$  escrevemos o termo não linear da forma:

$$\mu_0(n_d, a_d) = \mathcal{N} |\varphi(x, y; t)|^2 \tag{B.7}$$

De esta forma a equação que estudaremos nesta seção corresponde com a eq. Gross-Pitaevskii em duas dimensões e tem a forma:

$$\mu\varphi\left(x,y\right) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}\left(x^2 + \kappa^2 y^2\right) + \mathcal{N} \left|\varphi\left(x,y\right)\right|^2\right]\varphi\left(x,y\right)$$
(B.8)

Onde a constante  $\mathcal{N} = 2 (2\pi\lambda)^{1/2} a_d N$ . A normalização desta equação está dada por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, |\varphi(x,y)|^2 = 1$$
(B.9)

#### **B.1.1 Potencial Químico 2D**

Procuramos uma expressão para o potencial químico multiplicando a equação B.8 por  $\varphi(x, y)$  e integramos em tudo o espaço:

$$\mu \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \left| \varphi\left(x,y\right) \right|^{2} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \varphi\left(x,y\right) \left( \frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} \varphi\left(x,y\right) + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} \varphi\left(x,y\right) \right)$$
$$+ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \left(x^{2} + \kappa^{2} y^{2}\right) \left| \varphi\left(x,y\right) \right|^{2} + \mathcal{N} \, \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \left| \varphi\left(x,y\right) \right|^{4}$$

Com a condição de normalização, temos:

$$\mu = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \,\varphi(x,y) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x,y) - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \,\varphi(x,y) \frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi(x,y) + \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \,|\varphi(x,y)|^2 \left[ \left( x^2 + \kappa^2 y^2 \right) / 2 + \mathcal{N} \,|\varphi(x,y)|^2 \right]$$

Onde integrando por partes a primeira integral encontramos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \,\varphi(x,y) \,\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x,y) = \left.\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \,\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 \qquad (B.10)$$

Da mesma forma, a segunda integral da direita pode-se escrever como:

$$-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\,\varphi(x,y)\frac{\partial^2}{\partial y^2}\varphi(x,y) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\,\left(\frac{\partial}{\partial y}\varphi(x,y)\right)^2 \qquad (B.11)$$

Assim, finalmente a expressão para o potencial químico é:

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left\{ \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi(x,y)}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi(x,y)}{\partial y}\right)^2}{+ |\varphi(x,y)|^2 \left[ \left(x^2 + \kappa^2 y^2\right)/2 + \mathcal{N} |\varphi(x,y)|^2 \right]} \right\}$$
(B.12)

Agora temos uma expressão para integrar numericamente e conhecer o potencial químico do superfluido de pares de átomos de Fermi numa armadilha de duas dimensões no limite BEC.

#### B.1.2 Resultados Numéricos 2D

A continuação, apresentamos os valores do potencial químico  $\mu$ , o raio médio quadrático rms, e a função de onda no origem, para diversas não linearidades no caso do SF em duas dimensões para uma armadilha de simetria circular esto é com  $\kappa = 1$  na equação B.8, no limite BEC empregando uma divisão de  $N_X = N_Y = 800$  passos na rede espacial, um passo DX = DY = 0.02 espacial e um passo no tempo DT = 0.0001. Apresentamos resultados na tabela B.1.

$\mathcal{N}$	$\varphi\left(0 ight)$	$r_{rms}$	$\mu$
0	0.5642	1	1
3.1371	0.4913	1.10513	1.42005
12.5484	0.3919	1.30687	2.25583
62.742	0.2676	1.78817	4.60982
313.71	0.1787	2.6044	10.06825
627.42	0.1502	3.08453	14.189228

Tabela B.1: Resultados numéricos para o SF 2D numa armadilha de simetria circular.

## **B.2** Aproximação Variacional

Neste ponto consideramos a solução da equação de funcional densidade dentro da aproximação variacional para descrever os dímeros num superfluido de Fermi no limite BEC numa armadilha tipo disco.

Para a implementação do método variacional, vamos mostrar que a equação DF bidimensional e a sua normalização podem ser derivadas desde uma Lagrangeana efetiva (L):

$$L(\mu, u(x, y)) = \int dx \int dy \, \pounds (\mu, u(x, y)) - \mu$$

Onde  $\pounds$  representa a densidade Lagrangeana, de forma que:

$$L = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \begin{bmatrix} \mu \ u^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \\ -\frac{(x^2 + \kappa^2 y^2)}{2} u^2 - \frac{N}{2} u^4 \end{bmatrix} - \mu$$
(B.13)

Podemos encontrar a normalização através da primeira derivada parcial da Lagrangeana com relação de  $\mu$ :

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[ \begin{array}{c} \mu \, u^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \\ -\frac{\left(x^2 + \kappa^2 y^2\right)}{2} u^2 - \frac{N}{2} u^4 \end{array} \right] - \mu \right\} = 0$$
$$\implies \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, u^2 = 1$$
(B.14)

Na procura da equação de movimento empregamos a equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\delta L}{\delta u} = \frac{\partial \pounds}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_x u)} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_y u)} \right] = 0$$

Onde:

$$\frac{\partial \pounds}{\partial u} = \frac{\partial}{\partial u} \left[ \mu u^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{(x^2 + \kappa^2 y^2)}{2} u^2 - \frac{\mathcal{N}}{2} u^4 \right]$$
  
$$\frac{\partial \pounds}{\partial u} = 2\mu u - (x^2 + \kappa^2 y^2) u - 2\mathcal{N} u^3$$
(B.15)

Além de:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_x u)} \right] = -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_y u)} \right] = -\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$
(B.16)

Assim, obtemos que:

$$\frac{\partial \pounds}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_x u)} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial \pounds}{\partial (\partial_y u)} \right] = 0$$
$$2\mu \ u - \left( x^2 + \kappa^2 y^2 \right) u - 2\mathcal{N} \ u^3 + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

Finalmente encontramos a equação de funcional densidade 2D:

$$\mu u + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{1}{2} \left( x^2 + \kappa^2 y^2 \right) u - \mathcal{N} u^3 = 0$$
(B.17)

Estas equações são equivalentes com as expresões B.8 e B.9 que descrevem o SF para 2D no limite BEC.

#### **B.2.1** Forma da Lagrangeana

Na aproximação variacional consideramos u(x, y) como uma função de onda real estacionária dada pela Gaussiana:

$$u(x,y) = \kappa^{1/4} \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2w^2}\right) \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{2\alpha^2}\right)$$
(B.18)

Onde  $\eta \in w$  são parâmetros variacionais que representam a norma  $(\eta)$  e a largura (w) da solução  $u(x, y) \in x$ , e  $\beta \in \alpha$  são parâmetros que representam a norma  $(\beta)$  e a largura  $(\alpha)$  da função de onda na direção y.

Agora com substituir a forma de u(x, y) na Lagrangeana, temos:

$$L = \mu \kappa^{1/2} \left( \frac{\eta \beta}{\pi w \alpha} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{x^2}{w^2}\right) \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{\alpha^2}\right) -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \right] -\frac{\kappa^{1/2}}{2} \left(\frac{\eta \beta}{\pi w \alpha}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left(x^2 + \kappa^2 y^2\right) \left[ \exp\left(-\frac{x^2}{w^2}\right) \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{\alpha^2}\right) \right] -\frac{\mathcal{N}}{2} \kappa \left(\frac{\eta \beta}{\pi w \alpha}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[ \exp\left(-\frac{2x^2}{w^2}\right) \exp\left(-\frac{2\kappa y^2}{\alpha^2}\right) \right] -\mu$$

Onde :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \ u^2(x,y) = \kappa^{1/2} \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{w^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{\alpha^2}\right)$$
$$= \kappa^{1/2} \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right) \left(w\sqrt{\pi}\right) \left(\alpha\sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}\right) = \eta\beta$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \ u^4(x,y) = \kappa \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{2x^2}{w^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{2\kappa y^2}{\alpha^2}\right)$$
$$= \kappa \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)^2 \left(w\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right) \left(\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2\kappa}}\right) = \frac{\sqrt{\kappa} \left(\eta\beta\right)^2}{2\pi w\alpha}$$

Para as derivadas temos que:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{x\kappa^{1/4}}{w^2} \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{2\alpha^2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2w^2}\right)$$
$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\kappa^{5/4}y}{\alpha^2} \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2w^2}\right) \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{2\alpha^2}\right)$$

E com as integrais que são:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{w^2}\right) dx = \frac{1}{2} \left(w^2\right)^{3/2} \sqrt{\pi} = \frac{w^3}{2} \sqrt{\pi}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \, \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{\alpha^2}\right) = \alpha \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \, y^2 \exp\left(-\frac{\kappa y^2}{\alpha^2}\right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha^2}{\kappa}\right)^{3/2} \sqrt{\pi} = \frac{\alpha^3}{2\kappa^{3/2}} \sqrt{\pi}$$

Encontramos que:

$$L = \mu\eta\beta - \frac{\mathcal{N}}{4}\frac{\sqrt{\kappa}(\eta\beta)^2}{\pi w\alpha} - \mu$$
  
$$-\frac{\kappa^{1/2}}{2w^4}\left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)\left(\frac{w^3}{2}\sqrt{\pi}\right)\left(\alpha\sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}\right) - \frac{\kappa^{5/2}}{2\alpha^4}\left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)\left(w\sqrt{\pi}\right)\left(\frac{\alpha^3}{2\kappa^{3/2}}\sqrt{\pi}\right)$$
  
$$-\frac{\kappa^{1/2}}{2}\left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right)\left[\left(\frac{w^3}{2}\sqrt{\pi}\right)\left(\alpha\sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}\right) + \kappa^2\left(w\sqrt{\pi}\right)\left(\frac{\alpha^3}{2\kappa^{3/2}}\sqrt{\pi}\right)\right]$$

~

Assim finalmente:

$$L = \mu \eta \beta - \frac{\eta \beta}{4w^2} - \frac{\eta \beta \kappa}{4\alpha^2} - \frac{1}{4} \eta \beta \left( w^2 + \kappa \alpha^2 \right) - \frac{\mathcal{N}}{4} \frac{\sqrt{\kappa} \left( \eta \beta \right)^2}{\pi w \alpha} - \mu$$
(B.19)

Corresponde com a forma da Langrangeana que vamos empregar para a aproximação variacional.

### **B.2.2** Equações Variacionais

Com a forma da Langrangeana temos que uma primeira equação variacional com relação do potencial químico é:

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = \frac{\partial}{\partial \mu} \left[ \mu \eta \beta - \frac{\eta \beta}{4w^2} - \frac{\eta \beta \kappa}{4\alpha^2} - \frac{1}{4} \eta \beta \left( w^2 + \kappa \alpha^2 \right) - \frac{\mathcal{N}}{4} \frac{\sqrt{\kappa} \left( \eta \beta \right)^2}{\pi w \alpha} - \mu \right] = 0$$
  
$$\rightarrow \eta \beta - 1 = 0$$

Assim para os parâmetros variacionais  $\eta\beta$ , que representa a norma da solução  $u\left(x,y\right)$ , obtemos:

$$\eta\beta = 1 \tag{B.20}$$

Para o parâmetro variacional w temos a siguente equação variacional:

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \frac{\partial}{\partial w} \left[ \mu \eta \beta - \frac{\eta \beta}{4w^2} - \frac{\eta \beta \kappa}{4\alpha^2} - \frac{1}{4} \eta \beta \left( w^2 + \kappa \alpha^2 \right) - \frac{\mathcal{N}}{4} \frac{\sqrt{\kappa} \left( \eta \beta \right)^2}{\pi w \alpha} - \mu \right] = 0$$
$$\rightarrow \frac{\eta \beta}{2w^3} - \frac{\eta \beta}{2} w + \frac{\mathcal{N}}{4} \frac{\sqrt{\kappa} \left( \eta \beta \right)^2}{\pi \alpha} \frac{1}{w^2} = 0$$

Com  $\eta\beta = 1$  então:

$$1 - w^4 + \frac{N\sqrt{\kappa}}{2\pi\alpha}w = 0 \tag{B.21}$$

Agora para o parâmetro variacional  $\alpha$  encontramos que:

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[ \mu \eta \beta - \frac{\eta \beta}{4w^2} - \frac{\eta \beta \kappa}{4\alpha^2} - \frac{1}{4} \eta \beta \left( w^2 + \kappa \alpha^2 \right) - \frac{\mathcal{N}}{4} \frac{\sqrt{\kappa} \left( \eta \beta \right)^2}{\pi w \alpha} - \mu \right] = 0$$
$$\rightarrow \frac{\eta \beta \kappa}{2\alpha^3} - \frac{\eta \beta \kappa}{2} \alpha + \frac{\mathcal{N}}{4} \frac{\sqrt{\kappa} \left( \eta \beta \right)^2}{\pi w} \frac{1}{\alpha^2} = 0$$

Com  $\eta\beta = 1$  então:

$$1 - \alpha^4 + \frac{\mathcal{N}}{2\pi w \sqrt{\kappa}} \alpha = 0 \tag{B.22}$$

Assim, no caso da armadilha de simetria circular ( $\nu = \kappa = 1$ ) as equações para os parâmetros w e  $\alpha$  são idênticas, então eles assumem o mesmo valor. No caso anisotrópico assumimos os valores de  $\nu = 1$  e  $\kappa = 2$ , e procuramos os diferentes valores para os parâmetros w e  $\alpha$ , em relação da não linearidade ( $\mathcal{N}$ ).

Agora com relação do parâmetro  $\eta$  temos:

$$\frac{\partial L}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \begin{bmatrix} \mu \eta \beta - \frac{\eta \beta}{4w^2} - \frac{\eta \beta \kappa}{4\alpha^2} \\ -\frac{1}{4}\eta \beta \left(w^2 + \kappa \alpha^2\right) - \frac{N}{4} \frac{\sqrt{\kappa}(\eta \beta)^2}{\pi w \alpha} - \mu \end{bmatrix} = 0$$
$$\mu \beta - \frac{\beta}{4w^2} - \frac{\beta \kappa}{4\alpha^2} - \frac{1}{4}\beta \left(w^2 + \kappa \alpha^2\right) - \frac{N}{2} \frac{\sqrt{\kappa} \eta \beta^2}{\pi w \alpha} = 0$$
(B.23)

Empregando o resultado de  $\eta\beta = 1$  temos uma expressão para o potencial químico:

$$\mu = \frac{1}{4w^2} + \frac{\kappa}{4\alpha^2} + \frac{1}{4} \left( w^2 + \kappa \alpha^2 \right) + \frac{\mathcal{N}}{2} \frac{\sqrt{\kappa}}{\pi w \alpha}$$
$$\mu = \frac{1}{4\alpha^2 w^2} \left( \alpha^2 + w^2 \kappa + \alpha^2 w^4 + \kappa \alpha^4 w^2 + 2\mathcal{N} \alpha w \frac{\sqrt{\kappa}}{\pi} \right)$$
(B.24)

Assim posso ter diferentes valores de  $\mu$ , para diversas simetrias (dependendo do valor de  $\kappa$ ) e para os valores de w, e  $\alpha$  associados com distintos, valores da não linearidade.

Agora com relação do parâmetro  $\beta$  encontramos:

$$\frac{\partial L}{\partial \beta} = \mu \eta - \frac{\eta}{4w^2} - \frac{\eta \kappa}{4\alpha^2} - \frac{1}{4} \eta \left( w^2 + \kappa \alpha^2 \right) - \frac{\mathcal{N}}{2} \frac{\sqrt{\kappa} \eta^2 \beta}{\pi w \alpha} = 0$$
  

$$\rightarrow \mu = \frac{1}{4\alpha^2 w^2} \left( \alpha^2 + w^2 \kappa + \alpha^2 w^4 + \kappa \alpha^4 w^2 + 2\mathcal{N} \alpha w \frac{\sqrt{\kappa}}{\pi} \right)$$
(B.25)

A mesma expressão para o potencial químico.

#### Raio Méio Quadrático

Além, posso conhecer outra importante quantidade  $r_{rms}$  que representa o tamanho médio do sistema, definida por:

$$r_{rms} = \sqrt{x^2 + y^2} \tag{B.26}$$

Empregamos a definição do valor médio para encontrar:

$$r_{rms}^{2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \ \left(x^{2} + y^{2}\right) \ u^{2} \left(x, y\right)$$
$$= \kappa^{1/2} \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \ \left(x^{2} + y^{2}\right) \exp\left(-\frac{x^{2}}{w^{2}}\right) \exp\left(-\frac{\kappa y^{2}}{\alpha^{2}}\right)$$
$$r_{rms}^{2} = \kappa^{1/2} \left(\frac{\eta\beta}{\pi w\alpha}\right) \left(\frac{w^{3}}{2} \sqrt{\pi} \alpha \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}} + w \sqrt{\pi} \frac{\alpha^{3}}{2\kappa^{3/2}} \sqrt{\pi}\right) = \left(\frac{\eta\beta}{2}\right) \left(w^{2} + \frac{\alpha^{2}}{\kappa}\right)$$
(B.27)

Com o resultado de  $\eta\beta = 1$ , então encontramos o raio médio quadrático do sistema:

$$r_{rms} = \sqrt{\frac{w^2 + \alpha^2/\kappa}{2}} \tag{B.28}$$

#### **B.2.3 Resultados Variacionais 2D**

Empregando o valor de  $\kappa = 1$ , temos que a equação de funcional densidade descreve o sistema numa armadilha de simetria circular, neste caso o método variacional permite encontrar os valores da tabela B.2 para o potencial químico  $\mu$ , a funcão de onda no origem u(0) e o raio médio quadrático  $r_{rms}$ .

# B.3 Aproximação de Thomas Fermi

Començamos menosprezando o termo da energia cinética na equação DF estacionária (eq. B.8) para dois dimensões, encontrando:

$$\mu - \frac{1}{2} \left( x^2 + \kappa^2 y^2 \right) - \mathcal{N} ||u(x,y)|^2 = 0$$
(B.29)

$\mathcal{N}$	$w = \alpha$	$u\left(0 ight)$	$r_{rms}$	$\mu$	$\mu_{\#}$	$\mathbf{erro}\%$
0	1	0.5642	1	1	1	0
3.1371	1.10655	0.5098	1.10655	1.4283	1.42	0.58
12.5484	1.31576	0.4287	1.31576	2.308	2.25583	2.31
62.742	1.82057	0.3099	1.82057	4.8208	4.60982	4.60
313.71	2.67141	0.2112	2.67141	10.635	10.06825	5.63
627.42	3.16903	0.1780	3.16903	15.014	14.18922	5.81

Tabela B.2: Resultados da aproximação variacional no SF 2D no limite BEC. A aproximação é boa para pequenas não linearidades.

Onde a constante  $\mathcal{N} = 2 (2\pi\lambda)^{1/2} a_d N$ . Onde N é o número de dímeros e  $\mu$  é o potencial químico do sistema na armadilha. A normalização desta equação está dada por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \ |u(x,y)|^2 = 1$$
(B.30)

Da equação B.29 podemos ter uma forma para a função de onda do sistema:

$$u(x,y) = \left(\frac{1}{N} \left[\mu - \frac{1}{2} \left(x^2 + \kappa^2 y^2\right)\right]\right)^{1/2}$$
(B.31)

Neste caso,  $(x^2 + \kappa^2 y^2) > 2\mu$  implica uma função de onda completamente imaginária. Assim, é necessário que:

$$x^2 + \kappa^2 y^2 < 2\mu \tag{B.32}$$

Então vamos empregar ista condição na normalização da eq. DF (eq. B.30), onde para o caso de  $\kappa \neq 1$  temos que:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[ \mu - \frac{1}{2} \left( x^2 + \kappa^2 y^2 \right) \right] = 1$$
(B.33)

O resultado para o potencial químico pode-se encontrar com uma transformação para coordenadas cilindricas  $(r, \theta)$ , assim que a nossa integral fica da forma:

$$\frac{1}{\mathcal{N}\kappa} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\sqrt{2\mu}} r \, dr \, \left\{ \mu - \frac{1}{2} \left( r^2 \cos^2\left(\theta\right) + \kappa^2 \frac{r^2}{\kappa^2} \sin^2\left(\theta\right) \right) \right\} = \frac{2\pi}{\mathcal{N}\kappa} \left( \frac{\mu^2}{2} \right) = 1$$

Finalmente, encontramos a siguente expressão para o potencial químico:

$$\mu = \left(\frac{N\kappa}{\pi}\right)^{1/2} \tag{B.34}$$

#### Raio Médio Quadrático

Empregando a definição do valor médio procuramos o tamanho do sistema definido por:

$$r_{rms}^{2} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \left(x^{2} + y^{2}\right) \left[\mu - \frac{1}{2} \left(x^{2} + \kappa^{2} y^{2}\right)\right]$$
(B.35)

Empregando a transformação para coordenadas cilindricas, encontramos que:

$$r_{rms}^2 = \frac{\pi}{3\mathcal{N}\kappa^3}\mu^3\left(1+\kappa^2\right)$$

Finalmente o tamanho do condensado pode-se encontrar com a expressão:

$$r_{rms} = \left[\frac{\pi\mu^3}{3\mathcal{N}\kappa^3} \left(1 + \kappa^2\right)\right]^{1/2}$$
(B.36)

#### **B.3.1 Resultados Thomas Fermi**

Agora apresentamos os resultados para o potencial químico  $\mu$ , a funcão de onda no origem u(0) e o raio médio quadrático  $r_{rms}$  em diferentes não linearidade, da equação DF de simetria circular ( $\kappa = 1$ ) empregando as expresões obtidas na aproximação de Thomas-Fermi:

$$\mu = \left(\frac{\mathcal{N}\kappa}{\pi}\right)^{1/2}, \ u\left(0\right) = \left(\frac{\mu}{\mathcal{N}}\right)^{1/2}, \ r_{rms} = \left[\frac{\pi\mu^3}{3\mathcal{N}\kappa^3}\left(1+\kappa^2\right)\right]^{1/2}$$
(B.37)

$\mathcal{N}$	$u\left(0 ight)$	$r_{rms}$	$\mu$	$\mu_{\#}$	erro%
3.1371	0.56439	0.8162	0.99928	1.42005	29
12.5484	0.39909	1.1543	1.9986	2.25583	11
62.742	0.26688	1.726	4.4689	4.60982	3.05
313.71	0.17848	2.581	9.9928	10.06825	0.749
627.42	0.15008	3.0694	14.132	14.189	0.402

Tabela B.3: Resultados da aproximação Thomas-Fermi no SF com forma de disco em simetria circular no limite BEC. A aproximação é boa para grandes valores da não linearidade.

Assim demonstramos que a equação DF anisotrópica em três dimensões pode ser levada a uma equação efetiva em duas dimensões para o estudo do SF numa armadilha com forte confinamento axial (tipo disco), onde a aproximação variacional pode ser empregada para pequenos valores da não linearidade, enquanto que para os casos onde o coeficiente não linear toma valores grandes as soluções da aproximação de Thomas-Fermi correspondem com uma descrição mais adequada.

# **Referências Bibliográficas**

- [1] S.R.A. Salinas, Introdução à Física Estatística, EDUSP, 2<sup>a</sup> ed. (1999).
- [2] M.Tinkham, Introduction to Superconductivity, McGraw-Hill Inc (1996).
- [3] L. P. Pitaevskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 40, 646 (1961) [Sov. Phys. JETP 13, 451 (1961)].
- [4] Blume et al., Phys. Rev. Lett.5, 233201 (2007).
- [5] S. Y. Chang and G. F. Bertsch, Phys. Rev. A76, 021603(R) (2007).
- [6] Bourdel, T., J. Cubizolles, L. Khaykovich, K. M. F. Magalhães, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov, and C. Salomon, *Phys. Rev. lett.***91**, 020402 (2003).
- [7] Kevin E. Strecker, Guthrie B. Partridge, and Randall G. Hulet, *Phys. Rev. lett.* 91, 080406 (2003).
- [8] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm, *Phys. Rev. lett.* 92, 120401 (2004).
- [9] C. J. Pethick & H. Smith, Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases, Cambridge (2002).
- [10] A. Fabrocini and A. Polls, Phys. rev. A 60, 2319 (1999); 64, 063610 (2001).
- [11] S. K. Adhikari, *Phys. Rev. A* **79**, 023611 (2009).
- [12] S. K. Adhikari and L. Salasnich, Phys. Rev. A 78, 043616 (2008).
- [13] Zwierlein, M. W., J. R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle, *Nature***435**, 1047-1051 (2005).
- [14] S. K. Adhikari, Phys. Rev. A 77, 033618 (20081).
- [15] S. K. Adhikari1 and L. Salasnich New Journal of Physics 11, 023011 (2009).

- [16] G. A. Baker, Jr., Phys. Rev. C 60, 054311 (1999).
- [17] K. Huang and C.N. Yang, Phys. Rev. 105, 767 (1957).
- [18] G. A. Baker, Jr., Int. J. Mod. Phys. B 15, 1314 (2001).
- [19] A. F. R. de Toledo Piza, Mecânica Quântica, Edusp, 2003.
- [20] S. K. Adhikari, Phys. Rev. A 77, 045602 (2008).
- [21] T. D. Lee, K. Huang and C.N. Yang, Phys. Rev. 106, 1135 (1957).
- [22] T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. 105, 1119 (1957).
- [23] A. Fabrocini and A. Polls, Phys. rev. A 60, 2319 (1999); 64, 063610 (2001).
- [24] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Rev. Mod. Phys. 80, 1215 (2008).
- [25] Stewart, J. T., J. P. Gaebler, C. A. Regal, and D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* 97, 220406 (2006).
- [26] Partridge, G. B., W. Li, R. I. Kamar, Y. A. Liao, and R. G. Hulet, Science 311, 503 (2006).
- [27] Carlson, J., S.-Y. Chang, V. R. Pandharipande, and K. E. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 050401(2003).
- [28] Astrakharchik, G. E., J. Boronat, J. Casulleras, and S.Giorgini, *Phys. Rev. Lett.* 93, 200404(2004).
- [29] Carlson, J., and S. Reddy, Phys. Rev. Lett. 95, 060401 (2005).
- [30] D. Blume et al., Phys. Rev. Lett. 99, 233201 (2007).
- [31] S. Y. Chang and G. F. Bertsch, Phys. Rev. A 76, 021603(R) (2007).
- [32] D. S. Petrov et. al., Phys. Rev. lett. 93, 090404 (2004).
- [33] I. V. Brodsky et. al., Phys. Rev. A 73, 032724 (2006).
- [34] P. Muruganandam and S. K. Adhikari, Phys. Commun. 180,1888-1912 (2009).
- [35] J. K. Nilsen, et al., Phys. Rev. A 71, 053610 (2005).
- [36] Dalfovo, Giorgini, Pitaevskii, Stringari, Rev. Mod. Phys 71, 463 (1999).
- [37] Ancilotto, Salasnich, Toigo, Phys. Rev. A 79, 033627 (2009).

# Livros Grátis

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

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 Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo