

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Formulação Hidrodinâmica para a Equação de
Schrödinger Não-Linear e Não-Local em
Condensados de Bose-Einstein**

Rodrigo Vidmar

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Fernando Haas e co-orientação do Prof. Dr. Felipe Barbedo Rizzato, apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Porto Alegre, 14 de março de 2017

Agradecimentos

Agradeço à toda minha família e em especial aos meus pais Igidio Antonio Vidmar e Jandira Salete Moterle Vidmar, aos meus irmãos Jovani Vidmar e Andrei Júnior Vidmar e à minha avó Eclair Alberti Vidmar por me aturarem todos os dias de suas vidas.

À minha namorada Grazielle Fernanda Farinela da Silva pelo apoio, ajuda e amor.

Aos meus colegas de pesquisa Luiz Gustavo Ferreira Soares, Horácio Coelho Júnior, Alexandre Silveira, Gabriel Volkweis Leite, Alexandre Luis Junges, Kellen Alves Pascoal e todos os demais (que me perdoem não citá-los aqui) que contribuíram para a construção deste trabalho.

Aos meus orientadores Prof. Dr. Fernando Haas e Prof. Dr. Felipe Barbedo Rizzato pela fundamental ajuda, atenção e paciência em todo o percurso de desenvolvimento deste trabalho.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Resumo

Será explorada a versão hidrodinâmica da equação de Schrödinger não-linear e não-local, descrevendo condensados de Bose-Einstein com auto-interações de longo alcance. Tais sistemas têm despertado interesse tendo em vista a busca da realização da condensação de Bose-Einstein sem necessidade de um potencial externo confinante e nos quais as interações atômicas locais não são suficientes. Para obter a descrição hidrodinâmica, a transformação de Madelung para a função de onda será utilizada, reduzindo o problema a uma equação da continuidade e a uma equação de transporte de momentum. Esta última é similar à equação de Euler em fluidos ideais, porém contendo um potencial quântico efetivo e um termo não local, o qual advém da interação atômica. Tais equações de fluido traduzem, respectivamente, a conservação da probabilidade e do momentum total. O método hidrodinâmico permitirá o estudo de excitações elementares, entre os quais os modos de Bogoliubov, segundo uma abordagem macroscópica.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger não-linear e não-local. Condensados de Bose-Einstein. Formulação hidrodinâmica. Modos de Bogoliubov.

Abstract

The hydrodynamic version of the Schrödinger equation nonlinear and nonlocal will be explored, describing Bose-Einstein condensates with long-range self-interactions. Such systems have aroused interest with a view to pursuing the realization of Bose-Einstein condensation without an external confining potential and in which local atomic interactions are not enough. For the hydrodynamic description, the eikonal decomposition of the wave function is used, reducing the problem to one equation of continuity and to a transport of momentum equation. The latter is similar to the Euler equation in ideal fluid but containing an effective quantum potential and a nonlocal term, which comes from the atomic interaction. Such fluid equations translate, respectively, conservation of probability and total momentum. The hydrodynamic method will allow the study of elementary excitations, including Bogoliubov modes according to a macroscopic approach.

Keywords: Nonlinear and non-local Schrödinger equation. Bose-Einstein condensates. Hydrodynamic formulation. Bogoliubov modes.

Lista de ilustrações

- Figura 1 – Gráfico da fração de partículas N/N_0 para bósons no regime condensado $T < T_0$ em função da fração de temperatura T/T_0 . A linha contínua representa a equação (2.53) obtida para um gás de bósons livres. A equação (2.64), para um gás de bósons confinado, é mostrada na linha tracejada. 20
- Figura 2 – Figura referente à equação (3.27) onde é relacionado a energia por partícula, em unidades de $\hbar\omega_{ho}$, $E' = E/(N\hbar\omega_{ho})$ para átomos interagentes com forças do tipo contato atrativas confinados num potencial externo esférico, como função do comprimento efetivo η . Curvas foram plotadas com diversos valores de ν 26
- Figura 3 – Figura referente à equação (3.37) onde é relacionada a densidade de equilíbrio $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ (Partículas/m³) de um condensado formado por ($N = 10^6$) átomos de hidrogênio (massa $M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função da distância r em metros. Os três gráficos foram feitos usando um comprimento de espalhamento $a \approx 10^{-12}$ m, o que nos dá $g \approx 10^{-52}$ J.m³. No gráfico (a) usamos $\omega_0 = 1$ Hz, com $r_{TF} = 1,6 \times 10^{-4}$ m. Para o gráfico (b), $\omega_0 = 10^3$ Hz e $r_{TF} = 1,0 \times 10^{-5}$ m. E para o gráfico (c), $\omega_0 = 10^{-3}$ Hz e $r_{TF} = 2,5 \times 10^{-3}$ m. 28
- Figura 4 – Figura referente à equação (3.67) onde é relacionado a densidade de equilíbrio $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ (Partículas/m³) de um condensado formado por ($N = 10^6$) átomos de hidrogênio (massa $M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função da distância r em metros. Os três gráficos foram feitos usando um comprimento de espalhamento $a \approx 10^{-12}$ m, o que nos dá $g = 1,59 \times 10^{-52}$ J.m³, $C = 1,245 \times 10^{-42}$ J.m No gráfico (a) usamos $\omega_0 = 1$ Hz, com $r_{TF} = 1,00 \times 10^{-5}$ m. Para o gráfico (b), $\omega_0 = 10^2$ Hz e $r_{TF} = 9,97 \times 10^{-6}$ m. E para o gráfico (c), $\omega_0 = 10^3$ Hz e $r_{TF} = 8,17 \times 10^{-6}$ m. 33
- Figura 5 – Figura referente à equação (3.77) onde é relacionado a densidade de equilíbrio $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ (Partículas/m⁻³) de um condensado formado por ($N = 10^6$) átomos de hidrogênio (massa $M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função da distância r em metros para o caso de uma interação de longo alcance sem potencial externo ($\omega_0 = 0$). Os três gráficos foram feitos usando um comprimento de espalhamento $a \approx 10^{-12}$ m, o que nos dá $g \approx 10^{-52}$ J.m³. No gráfico (a) usamos $C = 1,245 \times 10^{-42}$ J.m, com $r_{TF} = 10^{-5}$ m. Para o gráfico (b), $C = 5,55 \times 10^{-45}$ J.m e $r_{TF} = 1,5 \times 10^{-4}$ m. Para o gráfico (c), $C = 1,998 \times 10^{-47}$ J.m e $r_{TF} = 2,5 \times 10^{-3}$ m. Para o gráfico (d), $C = 1$ J.m e $r_{TF} = 1,12 \times 10^{-26}$ m. 35

Figura 6 – Figura referente à equação (4.29). No eixo da ordenada é exibida a variável adimensional $\hbar\omega/g\rho_{eq}$ e no eixo da abscissa a variável adimensional $\hbar k/sM$. O gráfico (a) representa $\hbar k/sM \ll 1$. Já o gráfico (b) foi feito com $\hbar k/sM \gg 1$ 42

Figura 7 – Figura referente à equação (4.26) onde é relacionado a energia de excitação $\epsilon(k)$ do condensado formado por átomos de hidrogênio ($M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função do número de onda k . Foi adotado uma densidade de equilíbrio $\rho_{eq} = 10^{16}$ átomos/m³. Para cada gráfico foram sondados diferentes intervalos de número de onda k 42

Sumário

1	Introdução	8
2	Propriedades elementares dos condensados de Bose-Einstein	10
2.1	Breve histórico	10
2.2	Sistemas quânticos elementares	11
2.2.1	Sistemas quânticos de uma partícula	11
2.2.1.1	Partícula livre	12
2.2.1.2	Potencial harmônico	12
2.2.2	Sistemas quânticos de duas ou mais partículas, bósons e férmions	13
2.2.3	Descrição estatística de um gás quântico ideal	15
2.2.4	Propriedades termodinâmicas	15
2.3	Gás ideal de bósons	16
2.3.1	Condensação de um gás ideal de bósons	17
2.4	Gás ideal de bósons confinado	19
2.4.1	Condensação de um gás ideal de bósons confinado	19
3	A aproximação de campo médio para condensados de Bose-Einstein e a equação de Gross-Pitaevskii	21
3.1	A aproximação de campo médio	21
3.2	A equação de Gross-Pitaevskii	23
3.2.1	Colapso da função de onda	24
3.2.2	A equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo	26
3.2.2.1	A aproximação de Thomas-Fermi	27
3.3	A equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local independente do tempo	29
3.3.1	Potencial de interação variando com o inverso da distância	29
3.3.1.1	Auto confinamento, caso sem armadilha	33
3.3.2	Potencial de interação gaussiano	35
3.3.2.1	Solução para $\alpha r^2 \ll 1$	36
4	Hidrodinâmica e ondas lineares	37
4.1	Formulação hidrodinâmica para a equação de Schrödinger não-linear e não-local em condensados de Bose-Einstein	37
4.1.1	Dedução das equações para a densidade e a velocidade locais do condensado	37
4.2	Ondas Lineares	39
4.2.1	O processo de linearização	39
4.2.2	Densidade de equilíbrio uniforme	40
4.2.3	Densidade de equilíbrio não-uniforme	43
4.2.3.1	Equação de Gross-Pitaevskii	43

4.2.3.1.1	Potencial externo esfericamente simétrico	43
4.2.3.2	Equação de Gross-Pitaevskii não-local	44
4.2.3.2.1	Potencial de interação variando com o inverso da distância	44
4.2.3.2.2	Potencial de interação gaussiano	49
5	Conclusão	53
	Referências	54

1 Introdução

Condensados de Bose-Einstein foram propostos por Albert Einstein [1] em 1925 no seguimento do trabalho efetuado por Satyendra Nath Bose [2]. A ideia é que uma fração de partículas de um sistema quântico com spin inteiro convirja para o estado fundamental cujo momentum das partículas é nulo, populando este estado macroscopicamente. Este novo estado da matéria pode existir abaixo de uma temperatura crítica próxima do zero absoluto (condensados atômicos), e foi verificado experimentalmente em 1995 em vapores de átomos alcalinos [3, 4]. Desde então a análise teórica e experimental dos condensados de Bose-Einstein tem sido levada a cabo por uma comunidade científica numerosa, havendo diversos artigos de revisão e livros sobre o assunto [5, 6, 7].

Diferentemente do previsto originalmente, a condensação magneto-óptica de Bose-Einstein obtida em laboratório contém não apenas uma localização nas variáveis de momentum, mas também nas variáveis espaciais. Tal se deve à utilização de armadilhas magnético-ópticas causando o confinamento do gás de bósons. Consequentemente, os modelos teóricos deste tipo de problema incluem um potencial externo, o qual geralmente tem a forma de um potencial harmônico isotrópico ou anisotrópico. Todavia, o confinamento forçado pode ocasionar uma singularidade, num processo com analogias ao colapso estelar levando à formação de buracos negros [8].

Na aproximação de campo médio, e supondo um gás rarefeito para o qual apenas colisões binárias de curto alcance são relevantes, a equação básica para os condensados de Bose-Einstein é a equação de Gross-Pitaevskii [9, 10].

As soluções desta equação compreendem uma vasta gama de estruturas, tais como sólitons claros e escuros, estruturas caóticas e instabilidades lineares e não lineares [8]. A equação de Gross-Pitaevskii, ao ser desligado o potencial externo, recai na equação de Schrödinger não-linear, a qual é onipresente em aplicações em ótica, física de plasma, estudo de junções de Josephson, entre outras [11]. A equação de Schrödinger não-linear é completamente integrável em uma dimensão pelo método do espalhamento inverso [12] e as propriedades das suas soluções são razoavelmente bem conhecidas.

Alternativamente ao confinamento externo, há a possibilidade de considerar interações de longo alcance, preferencialmente causando uma atração efetiva entre os átomos. Neste caso, existe um termo integral na equação de evolução, levando a uma equação de Schrödinger não-linear e não-local [13, 14, 15, 16]. Um dos principais atrativos deste tipo de modelo está na possibilidade de evitar o colapso do condensado geralmente motivado pelo confinamento externo. A segunda razão física para o interesse no modelo seria o tratamento de condensados onde a distância média entre as partículas não é muito maior

do que o comprimento de espalhamento entre ondas s .

Há pouco conhecimento sobre as propriedades das soluções para condensados de Bose-Einstein no caso incluindo potenciais não locais. Em particular, é de interesse teórico e experimental um mapeamento no espaço de parâmetros (densidade, temperatura...) que identifique as dinâmicas do sistema, tais como: expansão auto-similar, oscilações em torno de um estado de equilíbrio, singularidade em tempo finito, caos temporal, instabilidades. Em particular, o espectro de excitações elementares, ou modos de Bogoliubov, há de merecer atenção especial.

Assim neste trabalho se tem como objetivo utilizar métodos hidrodinâmicos para a equação de Gross-Pitaevskii, que rege a dinâmica do condensado. Descrições hidrodinâmicas para sistemas quânticos [17] merecem atenção desde os primórdios da Mecânica Quântica, quando Madelung [18] propôs a versão hidrodinâmica da equação de Schrödinger. Desta forma, obtém-se acesso direto às quantidades macroscópicas pertinentes, a saber, as densidades de probabilidade e de corrente, entre outras.

O capítulo **II** da presente dissertação é destinado a dar uma visão histórica sobre o surgimento e desenvolvimento dos condensados de Bose-Einstein. Após, no capítulo **III**, é feita uma dedução, através de uma teoria de campo médio, da equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local. No capítulo **IV** é aplicado a formulação hidrodinâmica para a equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local, onde se deduz equações para a densidade e a velocidade do condensado e após é feita uma abordagem de ondas lineares para estas equações. Por fim, no capítulo **V** é feita a conclusão.

2 Propriedades elementares dos condensados de Bose-Einstein

Procuramos, neste capítulo, fazer uma descrição básica dos condensados de Bose-Einstein. Na [seção 2.1](#) é feito um breve desenvolvimento histórico dos condensados. Já na [seção 2.2](#) o enfoque são nos sistemas quânticos, aos quais pertencem os condensados de Bose-Einstein. O gás ideal de bósons é descrito na [seção 2.3](#). Por fim, na [seção 2.4](#), abordamos o gás ideal de bósons confinado num potencial externo.

As informações contidas neste capítulo foram extraídas principalmente das referências [7, 19, 20].

2.1 Breve histórico

A ideia básica da condensação de Bose-Einstein surge aproximadamente no ano de 1925 quando A. Einstein, com base nos estudos de S. N. Bose, prediz a ocorrência de uma transição de fase num gás de átomos não interagentes. Ele atribui esta transição à condensação de átomos no estado de menor energia.

Após a descoberta da superfluidicidade no Hélio líquido (Allen e Misener, 1938; Kapitza, 1938), F. London associa esse efeito no Hélio como sendo uma manifestação da condensação de Bose-Einstein.

Muitos trabalhos teóricos surgem desde então, vamos citar alguns. Landau, em 1941, formula uma teoria de superfluidos em termos do espectro de excitações elementares do fluido. Em 1947 Bogoliubov desenvolve a primeira teoria microscópica de gases de bósons interagentes baseada no conceito de condensação de Bose-Einstein. Landau e Lifshitz (1951), Penrose (1951) e Penrose e Onsager (1956) introduziram o conceito de ordem não diagonal de longo alcance e discutiram sua relação com os condensados. Um importante desenvolvimento dos condensados ocorre com a previsão de vórtices quantizados nesses sistemas por Onsager (1949) e Feynman (1955) e com sua descoberta experimental por Hall e Vinen (1956).

Os primeiros estudos experimentais para gases atômicos diluídos, que chegaram muito próximos de obter condensados, foram feitos em meados dos anos de 1970. Utilizavam novas técnicas que consistiam em armadilhas magnéticas e ópticas e mecanismos de resfriamento. Os primeiros estudos tinham como foco o átomo de hidrogênio spin-polarizado devido à sua pequena massa. Nos anos de 1980 novas técnicas foram desenvolvidas para confinar átomos neutros. Átomos alcalinos foram as substâncias mais utilizadas nesses

experimentos pois se conseguia resfriá-los à baixíssimas temperaturas. Depois que esses átomos eram confinados, conseguia-se resfriá-los ainda mais com técnicas de resfriamento por evaporação.

Combinando diferentes técnicas a equipe de E. Cornell e C. Wieman na University of Colorado Boulder finalmente conseguiu em 1995 atingir a temperatura e densidade necessárias para observar BEC em vapores de ^{87}Rb [3]. Posteriormente a equipe de W. Ketterle no Massachusetts Institute of Technology também obteve êxito na observação de condensados porém em vapores de ^{23}Na [4].

2.2 Sistemas quânticos elementares

Nesta seção temos como objetivo descrever alguns sistemas quânticos que serão úteis para o estudo dos condensados de Bose-Einstein. Na [subseção 2.2.1](#) estudamos a equação de Schrödinger para uma partícula com o principal objetivo a obtenção das energias dos estados quânticos que serão usados na descrição estatística de um condensado de Bose-Einstein ideal. Na [subseção 2.2.2](#) o principal objetivo foi introduzir como se chega a diferentes tipos de partículas quânticas, os férmions e os bósons, os quais são nosso tema de interesse. Após, na [subseção 2.2.3](#), abordamos a descrição estatística de um gás ideal quântico e, finalmente, na [subseção 2.2.4](#), mencionamos algumas propriedades termodinâmicas desses gases.

2.2.1 Sistemas quânticos de uma partícula

Uma partícula quântica pode ser descrita pela equação de Schrödinger [21]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.1)$$

onde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \quad (2.2)$$

é o hamiltoniano do sistema, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ é a função de onda da partícula, $V_{ext}(\mathbf{r}, t)$ é um potencial externo de confinamento em que a partícula é submetida,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.3)$$

é o operador laplaciano em coordenadas retangulares, \hbar é a constante de Planck reduzida $\hbar = h/2\pi$, onde h é a constante de Planck e M é a massa da partícula.

Se $V_{ext} = V_{ext}(\mathbf{r})$, podemos supor a solução da equação (2.1) como:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i \frac{Et}{\hbar}}, \quad (2.4)$$

onde $\psi(\mathbf{r})$ é a função de onda da partícula independente do tempo, E é o valor esperado da energia do sistema. Substituindo (2.4) em (2.1) e supondo um potencial externo independente do tempo, obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$H \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

2.2.1.1 Partícula livre

Uma partícula livre é caracterizada pela não aplicação de um potencial externo, $V_{ext}(\mathbf{r}, t) = 0$. Como vimos, da equação (2.5), com $V_{ext}(\mathbf{r}) = 0$, obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula livre:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = E_l \psi(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

onde E_l é a energia da partícula livre. Se definirmos $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z$, o vetor de onda da partícula, como sendo

$$k = \frac{\sqrt{2ME_l}}{\hbar}. \quad (2.7)$$

e \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z vetores unitários nas direções x , y e z , a equação (2.6) fica:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = -k^2 \psi(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Esta equação admite a seguinte solução

$$\psi(\mathbf{r}) = A e^{\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.9)$$

onde A é uma constante.

Da equação (2.7) obtemos a energia da partícula livre que depende do vetor número de onda \mathbf{k} ,

$$E_l(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \quad (2.10)$$

2.2.1.2 Potencial harmônico

A equação que descreve uma partícula quântica confinada num potencial do tipo

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} M (\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2) \quad (2.11)$$

é

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + \frac{1}{2} M (\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2) \right] \psi(x_1, x_2, x_3) = E_{oh} \psi(x_1, x_2, x_3). \quad (2.12)$$

onde os índices 1, 2 e 3 representam, respectivamente, as coordenadas x , y e z , ω_i , $i = 1, 2, 3$, é a frequência na coordenada i e E_{oh} é a energia da partícula nesse potencial.

Se supormos que a função de onda $\psi(x_1, x_2, x_3)$ possa ser representada pelo produto de três funções independentes $\phi_1(x_1)$, $\phi_2(x_2)$ e $\phi_3(x_3)$,

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3) \quad (2.13)$$

e substituirmos na equação (2.9), obtemos três equações independentes, uma para cada variável x_1 , x_2 e x_3 ,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx_i^2} + \frac{M}{2} \omega_i^2 x_i^2 \right) \phi_i(x_i) = E_{oh_i} \phi_i(x_i), \quad (2.14)$$

onde $i = 1, 2, 3$ e E_{oh_i} é a energia da partícula referente ao grau de liberdade i .

Esta última equação tem como solução

$$\phi_{n_i}(x_i) = \left(\frac{M\omega_i}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_i} n_i!}} H_{n_i}(\xi_i) \exp(-\xi_i^2/2), \quad (2.15)$$

onde $n_i = 0, 1, 2, \dots$, $\xi_i = x_i \sqrt{(M\omega_i)/\hbar}$ uma variável adimensional e $H_{n_i}(\xi_i)$ os polinômios de Hermite. Portanto a autofunção de onda total fica

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) = \phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_2)\phi_{n_3}(x_3). \quad (2.16)$$

As energia do sistema dependem de n_j de acordo com

$$E_{oh_{n_1 n_2 n_3}} = \sum_{i=1}^3 \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i. \quad (2.17)$$

2.2.2 Sistemas quânticos de duas ou mais partículas, bósons e férmions

Vamos analisar um sistema quântico que é formado por duas partículas em que uma está no estado $\psi_a(\mathbf{r})$ e a outra no estado $\psi_b(\mathbf{r})$. Utilizaremos duas partículas por questão de simplicidade, embora as conclusões deste sistema podem ser estendidas para um sistema de N partículas.

Nosso objetivo agora é encontrar uma expressão para a função de onda para este sistema. Uma das suposições é que as partículas não devem ocupar o mesmo lugar no espaço simultaneamente, isto é, temos condições de separá-las. Porém não podemos distingui-las, o que nos limita a certeza da posição espacial de ambas.

Com isso podemos construir a função de onda para este sistema de duas formas [19]:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)], \quad (2.18)$$

onde A é uma constante e $\psi_m(\mathbf{r}_n)$ é a função de onda da partícula $m = a, b$ na posição \mathbf{r}_n , $n = 1, 2$. Assim, admite-se dois tipos de partículas. As partículas cuja função de onda é $\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ são chamadas de bósons e as partículas cuja função é $\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ são chamadas de férmions.

Podemos verificar qual o comportamento da função se ambas partículas se encontram no mesmo estado quântico. Para bósons temos

$$\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_a(\mathbf{r}_1)] = 2A\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2) \quad (2.19)$$

É fácil verificar que para N bósons existiria tal função de onda onde todos os bósons ocupariam o mesmo estado quântico.

Vejamos agora o caso dos férmions.

$$\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_a(\mathbf{r}_1)] = 0 \quad (2.20)$$

Nota-se que para o caso de dois férmions, não é possível que eles ocupem o mesmo estado quântico. Este resultado está de acordo com o Princípio de Exclusão de Pauli.

Uma outra forma de formular o problema é definir um operador P , chamado de operador troca, que quando atua numa determinada função de onda, troca as coordenadas de duas partículas.

$$P\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (2.21)$$

Se aplicarmos novamente o operador na equação (2.21), obtemos:

$$P(P\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)) = P^2\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = P\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (2.22)$$

Logo, concluímos que os autovalores de P são iguais a ± 1 .

O Hamiltoniano deve ser invariante sob a operação de troca de partículas idênticas. Assim,

$$[P, H] = 0. \quad (2.23)$$

Logo P e H são observáveis compatíveis e, portanto podemos encontrar um conjunto completo de funções que são auto-estados simultâneos de ambas. Isto é, podemos encontrar soluções para a equação de Schrödinger que são tanto simétricas, com autovalor $+1$, quanto anti-simétricas, com autovalor -1 , sob a mudança

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (2.24)$$

As funções simétricas representam bósons, que são partículas de spin inteiro. Alguns exemplos são fótons, fônons, mágnons, átomos de He^4 . Estas partículas obedecem à estatística de Bose-Einstein.

Já as funções anti-simétricas representam férmions, que são partículas de spin semi-inteiro. Alguns exemplos são elétrons, prótons, nêutrons, átomos de He^3 . Os Férmions obedecem à estatística de Fermi-Dirac.

2.2.3 Descrição estatística de um gás quântico ideal

Um gás quântico ideal é um sistema no qual não ocorrem interações entre as partículas. Para estes sistemas, um estado quântico é caracterizado pelo conjunto de números [20]

$$\{n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\} \equiv \{n_j\}, \quad (2.25)$$

onde j representa o estado quântico de um orbital e n_j é o número de partículas do orbital j . Para férmions, um orbital j pode ser ocupado por no máximo duas partículas. Já os sistemas bosônicos não tem limitação para o número de partículas. Assim, se o sistema contém N partículas, n_j pode variar de 0 a N no caso de bósons.

A energia do sistema correspondente ao estado quântico $\{n_j\}$ é dada por

$$E = \sum_j \varepsilon_j n_j, \quad (2.26)$$

onde ε_j é a energia do orbital j . O número total de partículas é dado por

$$N = \sum_j n_j. \quad (2.27)$$

No ensemble grande canônico é definida a função de partição

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_j \left\{ \sum_{n_j} \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)n_j] \right\}, \quad (2.28)$$

onde μ é o potencial químico do sistema, β está relacionada com a constante de Boltzmann k_B e a temperatura T do sistema como $\beta = 1/k_B T$ e n_j é o número de partículas do orbital j .

Podemos obter algumas propriedades termodinâmicas, como veremos na próxima seção, uma vez obtida a função de partição $\Xi(T, V, \mu)$.

2.2.4 Propriedades termodinâmicas

No ensemble grande canônico o valor médio da energia ε_j para um orbital j é dado por:

$$\langle \varepsilon_j \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi(T, V, \mu) + \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi(T, V, \mu), \quad (2.29)$$

e do número de partículas n_j por

$$\langle n_j \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_j} \ln \Xi(T, V, \mu) \quad (2.30)$$

Podemos definir a energia interna do sistema U como sendo:

$$U = \langle E \rangle = \sum_j \varepsilon_j \langle n_j \rangle, \quad (2.31)$$

e o número termodinâmico de partículas como sendo

$$N = \langle N \rangle = \sum_j \langle n_j \rangle \quad (2.32)$$

O grande potencial termodinâmico $\phi(T, \mu)$ por unidade de volume é dado por

$$\phi(T, \mu) = -\frac{1}{\beta} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln \Xi(T, V, \mu) \quad (2.33)$$

Da relação de Euler, sabemos que a energia interna U é:

$$U = TS - PV + \mu N_t, \quad (2.34)$$

e o grande potencial termodinâmico é definido como

$$\Phi = U - TS - \mu N_t. \quad (2.35)$$

Então, substituindo (2.33) em (2.34), obtemos

$$p(T, \mu) = \frac{\Phi(T, \mu)}{V} = -\phi(T, \mu), \quad (2.36)$$

onde $-\phi(T, \mu)$ é o grande potencial termodinâmico por unidade de volume.

2.3 Gás ideal de bósons

Para um sistema de bósons, o número de partículas n_j num orbital j pode variar de 0 a ∞ . Portanto a equação (2.28) fica

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_j \left\{ \sum_{n_j=0}^{\infty} \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)n_j] \right\}. \quad (2.37)$$

Observamos que para o somatório dessa equação convergir, devemos ter $\exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)n_j] < 1$. Como n_j assume somente valores positivos, conclui-se que $\beta(\varepsilon_j - \mu) > 0$. O menor valor para ε_j é para $j = 0$, então ficamos com $\beta(\varepsilon_0 - \mu) > 0$. Como $\beta > 0$, então $\varepsilon_0 > \mu$. É nesse regime onde $\mu \rightarrow \varepsilon_0$ que ocorre a condensação de Bose-Einstein. Para um gás ideal de bósons livres $\varepsilon_0 = 0$, portanto $\mu < 0$.

Desenvolvendo o somatório da equação (2.37), impondo a condição $\beta(\varepsilon_0 - \mu) > 0$, obtemos

$$\sum_{n_j=0}^{\infty} \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)n_j] = \frac{1}{1 - \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]}. \quad (2.38)$$

Portanto, a função $\Xi(T, V, \mu)$ fica

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_j \frac{1}{1 - \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]}. \quad (2.39)$$

Uma vez obtida a função de partição $\Xi(T, V, \mu)$, podemos calcular algumas grandezas termodinâmicas. Por exemplo, o valor esperado do número de ocupação do orbital j , $\langle n_j \rangle$,

$$\langle n_j \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_j} \ln \Xi(T, V, \mu) = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] - 1}. \quad (2.40)$$

Observa-se que a condição $\exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)n_j] < 1$ antes mencionada que é equivalente à expressão $\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)n_j] > 1$ encontrada na equação (2.40) está relacionada ao fato de que $\langle n_j \rangle \geq 0$ para qualquer orbital j .

O número termodinâmico de partículas é

$$\langle N \rangle = \sum_j \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] - 1}. \quad (2.41)$$

A energia interna do sistema é

$$U = \sum_j \frac{\varepsilon_j}{\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] - 1}. \quad (2.42)$$

2.3.1 Condensação de um gás ideal de bósons

O fenômeno da condensação de Bose-Einstein é basicamente a ocupação macroscópica do estado fundamental do gás de bósons, ocorrendo no limite em que o potencial químico atinge o valor de menor energia do sistema, isto é, o estado fundamental, $\mu \rightarrow \varepsilon_0$. Para o caso de bósons livres, $\mu \rightarrow 0$, uma vez que para esse sistema $\varepsilon_0 = 0$.

Isto pode ser verificado analisando o comportamento da densidade de partículas do sistema bosônico, $\langle N \rangle/V$, no limite $\mu \rightarrow 0^-$. Para tal, partimos da equação (2.41)

$$\frac{N}{V} = \left[\frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \right] + \frac{1}{V} \sum_{j \neq 0} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_j) - 1}. \quad (2.43)$$

onde dividimos por V e separamos o termo correspondente ao estado fundamental, primeiro termo à direita do sinal de igual, do termo do correspondente aos estados excitados, segundo termo à direita do sinal de igualdade. Também introduzimos o termo $z = \exp(\beta \mu)$, conhecido como fugacidade.

No limite em que $\mu \rightarrow 0$ e $V \rightarrow \infty$, temos $z = \exp(\beta \mu) \rightarrow 1$. Assim, para o primeiro termo, mantendo a razão N/V fixa e computando os limites $\mu \rightarrow 0$ e $V \rightarrow \infty$, obtemos

$$\left[\frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \right] \rightarrow \rho_0, \quad (2.44)$$

onde ρ_0 é a densidade de partículas no nível fundamental, isto é, no regime condensado. Já o segundo termo, neste limite, fica:

$$\frac{1}{V} \sum_{j \neq 0} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_j) - 1} \rightarrow 0, \quad (2.45)$$

indicando que a maioria dos bósons deveram ocupar o estado fundamental.

Podemos definir um intervalo de temperatura onde ocorre o condensado de Bose-Einstein:

$$\begin{cases} 0 < T \leq T_0, & \text{regime condensado, } \mu = 0; \\ T > T_0, & \text{regime normal, } \mu < 0. \end{cases}$$

Aqui T_0 é chamada temperatura de Bose-Einstein ou temperatura de condensação. Pode-se definir T_0 como:

$$T_0 = \lim_{\mu \rightarrow \varepsilon_0} T. \quad (2.46)$$

Podemos obter uma expressão analítica para a temperatura de Bose-Einstein. Partimos da definição do número termodinâmico de partículas expresso de forma integral no limite termodinâmico, com $\mu = 0$, [20]

$$N = \gamma V C \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{\exp[\beta_0 \varepsilon] - 1}, \quad (2.47)$$

onde $\gamma = 2S + 1$ é conhecida como a multiplicidade de spins S , $C = (2M)^{1/2}/4\pi\hbar$ e $\beta_0 = 1/k_B T_0$. Fazendo uma mudança de variável $x = \beta_0 \varepsilon$ e utilizando o resultado

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{\exp[x] - 1} = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad (2.48)$$

obtemos para a temperatura de Bose-Einstein, T_0 , a seguinte expressão [20]

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2Mk_B} \left[\frac{4\pi^2}{\gamma \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right]^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (2.49)$$

onde $\Gamma(3/2)$ é uma função gama e $\zeta(3/2)$ é uma função zeta de Riemann.

Podemos expressar a fração de partículas no estado condensado, N_0/N , em relação à temperatura no regime $\mu = 0$, isto é $0 < T \leq T_0$.

Fazendo a mudança de variável $x = \beta \varepsilon$ na equação (2.47), obtemos

$$N_e = \frac{\gamma V C}{\beta^{3/2}} \Gamma(3/2) \zeta(3/2). \quad (2.50)$$

onde $\beta = 1/k_B T$. Como calculado anteriormente, para o número total de partículas N

$$N = \frac{\gamma V C}{\beta_0^{3/2}} \Gamma(3/2) \zeta(3/2). \quad (2.51)$$

onde $\beta_0 = 1/k_B T_0$ Portanto o total de partículas é composto pelo número de partículas no estado condensado mais as partículas que se encontram nos estados excitados

$$N = N_0 + N_e. \quad (2.52)$$

Com isso, obtemos uma expressão para a fração de partículas do condensado, N_0/N , no regime $0 < T \leq T_0$ [20]

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{N_e}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}. \quad (2.53)$$

2.4 Gás ideal de bósons confinado

Nesta seção pretendemos estudar qual é o comportamento de um gás de bósons ideal confinado em um potencial harmônico. Em especial obter a temperatura de condensação T_0 e a fração de partículas do condensado N_0/N [8].

2.4.1 Condensação de um gás ideal de bósons confinado

Conforme equação (2.17), as energias do sistema são

$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \sum_{j=1}^3 (n_j + 1/2) \hbar \omega_j, \quad \text{para } n_j = 0, 1, 2, 3... \quad (2.54)$$

A fim de obter a temperatura de condensação utilizamos a forma integral da equação (2.41) que define o número de partículas no limite em que $\mu \rightarrow \varepsilon_0$

$$N = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty dn_1 dn_2 dn_3 \frac{1}{\exp[\beta_0 \hbar (\omega_1 n_1 + \omega_2 n_2 + \omega_3 n_3)] - 1} \quad (2.55)$$

Fazendo a mudança de variável $\tau_j = \beta \hbar \omega_j n_j$ para $j = 1, 2, 3$ a integral acima fica

$$N = \frac{1}{(\beta_0 \hbar)^3} \frac{1}{\omega_1 \omega_2 \omega_3} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 \frac{1}{\exp[\tau_1 + \tau_2 + \tau_3] - 1}. \quad (2.56)$$

Usando o resultado

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 \frac{1}{\exp[\tau_1 + \tau_2 + \tau_3] - 1} = \zeta(3), \quad (2.57)$$

obtemos:

$$N = \frac{1}{(\beta_0 \hbar)^3} \frac{1}{\omega_1 \omega_2 \omega_3} \zeta(3). \quad (2.58)$$

Com a ajuda da equação (2.58) e usando $\beta_0 = 1/(k_B T_0)$, obtemos a expressão para T_0 :

$$T_0 = \frac{\hbar(\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/3}}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^3. \quad (2.59)$$

Para obtermos o número de partículas do condensado N_0 , usamos a relação

$$N_0 = N (1 - N_e/N). \quad (2.60)$$

O número de partículas nos estados excitados é definido pela seguinte fórmula

$$N_e = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty dn_1 dn_2 dn_3 \frac{1}{\exp[\beta \hbar (\omega_1 n_1 + \omega_2 n_2 + \omega_3 n_3)] - 1}, \quad (2.61)$$

que, fazendo o mesmo procedimento do cálculo da integral para N , obtemos

$$N_e = \frac{1}{(\beta \hbar)^3} \frac{1}{\omega_3 \omega_2 \omega_1} \zeta(3) \quad (2.62)$$

e a fração N_e/N fica

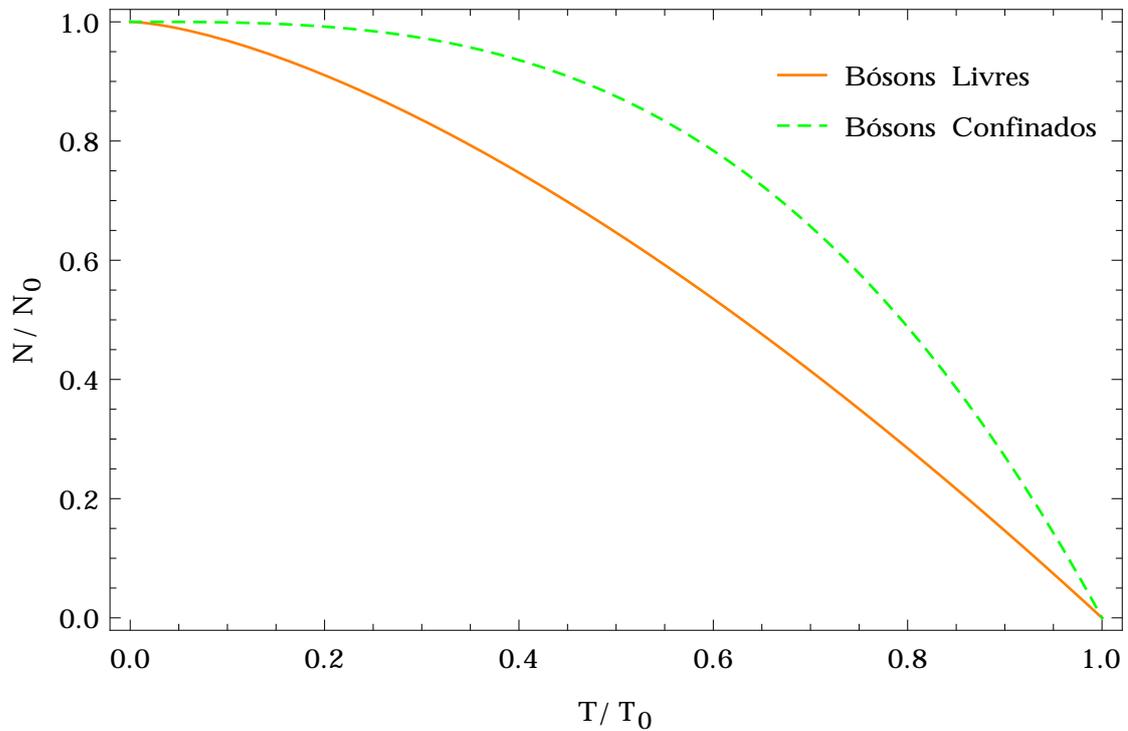
$$\frac{N_e}{N} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^3. \quad (2.63)$$

Portanto o número de partículas no estado condensado N_0 para $0 < T < T_0$ é:

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^3 \right]. \quad (2.64)$$

Na figura abaixo é feito uma comparação entre a fração de partículas, N/N_0 para ambos os casos, gás de bósons livres e confinados ambos no regime condensado $T < T_0$.

Figura 1 – Gráfico da fração de partículas N/N_0 para bósons no regime condensado $T < T_0$ em função da fração de temperatura T/T_0 . A linha contínua representa a equação (2.53) obtida para um gás de bósons livres. A equação (2.64), para um gás de bósons confinado, é mostrada na linha tracejada.



Fonte: PETHICK, C. J.; SMITH, H.[6]

3 A aproximação de campo médio para condensados de Bose-Einstein e a equação de Gross-Pitaevskii

Grande parte das informações contidas neste capítulo foram extraídas principalmente das referências [6, 8, 22, 23]. Na seção 3.1, é feita a transição da descrição quântica microscópica do condensado para a descrição macroscópica através da aproximação de campo médio. Também é abordado de forma breve, na seção 3.2, a equação de Gross-Pitaevskii. E por último, na seção 3.3, é resolvida a equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local independente do tempo.

3.1 A aproximação de campo médio

O estado quântico de um sistema bósons pode ser descrito em segunda quantização pelo operador quântico de campos e seu transposto e complexo conjugado, respectivamente, como [8, 22]:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_j \Psi_j(\mathbf{r}, t) \hat{a}_j, \quad (3.1)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_j \Psi_j^*(\mathbf{r}, t) \hat{a}_j^\dagger, \quad (3.2)$$

onde \hat{a}_j (\hat{a}_j^\dagger) são os operadores de aniquilação (criação) de uma partícula no estado ou função de onda em primeira quantização $\Psi_j(\mathbf{r}, t)$. Observa-se que $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$, \hat{a}_j e \hat{a}_j^\dagger obedecem às seguintes relações de comutação:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.3)$$

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] = 0, \quad (3.4)$$

$$[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] = 0, \quad (3.5)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad (3.6)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad (3.7)$$

e

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0. \quad (3.8)$$

Utilizando a equação de Heisenberg para o operador quântico de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}], \quad (3.9)$$

podemos obter a dinâmica desse operador. Para isso, nota-se que o Hamiltoniano, \hat{H} , é definido, em segunda quantização, como:

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} + \hat{H}_{int}, \quad (3.10)$$

onde $V_{ext}(\mathbf{r}, t)$ é um potencial externo genérico, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ é o operador momentum e \hat{H}_{int} é o termo de energia de interação entre as partículas, e é expresso como:

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (3.11)$$

onde $V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é o potencial de interação entre um par de partículas. Substituindo as equações (3.10) e (3.11) em (3.9) obtemos a equação de evolução para o operador quântico de campos, $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Podemos expressar a equação (3.1) como:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{a}_0 + \sum_{j \geq 1} \Psi_j(\mathbf{r}, t) \hat{a}_j, \quad (3.13)$$

O regime condensado tem como característica a ocupação macroscópica do estado fundamental, $N_0 \gg 1$. Essa característica nos possibilita implementar uma teoria de perturbação. Assim, na aproximação de campo médio, pode ser feita a decomposição [8]:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (3.14)$$

onde $\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$ é uma função complexa tal que seu módulo ao quadrado corresponde à densidade do condensado, $N_0 = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, e pode ser tratado como um campo clássico. Esta função, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, tem o significado de um parâmetro de ordem e é comumente conhecida como a função de onda macroscópica do sistema. Já $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, a componente não condensada, é considerada uma perturbação ou flutuação do estado quântico do sistema. A parte de flutuação pode ser desprezada para um número $N_0 \gg 1$ no limite em que a temperatura tende a zero. Assim, nesse limite, podemos trocar o operador $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ por sua média $\Psi(\mathbf{r}, t)$ na equação (3.12) para obtermos a Equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &+ \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi^*(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Se desmembrarmos o potencial de interação como $V_{int}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = g\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$, sendo o termo $g\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ responsável pelas interações binárias de curto alcance entre as partículas, onde $g = (4\pi\hbar^2 a)/M$, e a é o comprimento de espalhamento para ondas s . Para $g < 0$ as partículas interagem atrativamente. Quando $g > 0$, temos interação repulsiva entre pares de partículas. Já o termo $U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ é responsável pelas interações binárias de longo alcance entre as partículas. Com isso, a equação (3.15) fica:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &+ \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi^*(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.16)$$

É interessante observar a possibilidade de conseguir o confinamento do condensado sem a utilização de um potencial externo, visto que existem interações de longo alcance entre as partículas. Assim é interessante resolver a equação (3.16) com o potencial externo igual a zero:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &+ \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi^*(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.17)$$

A desconsideração de um potencial externo cria a possibilidade de evitarmos o colapso do condensado que surgia justamente quando este potencial era ligado.

3.2 A equação de Gross-Pitaevskii

As informações contidas nesta seção foram retiradas principalmente de [6]. No desenvolvimento deste cálculo assume-se que o condensado é suficientemente rarefeito, portanto apenas interações binárias de baixa energia são necessárias. Deste modo, desconsideramos interação de longo alcance entre as partículas, ou seja $U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = 0$. Assim, da equação (3.17) obtemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.18)$$

que é conhecida como equação de Gross-Pitaevskii. Esta equação descreve eficientemente uma série de fenômenos observados em condensados, incluindo os modos de Bogoliubov, que são suas excitações elementares básicas e que serão calculados nos capítulos subsequentes.

Quando a constante de acoplamento $g = 0$, fica-se com a equação de Schrödinger usual

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.19)$$

Tipicamente o potencial externo é de origem magneto-óptica. Ele tem um papel crucial no sistema, visto que garante o confinamento do condensado. Ainda mais necessário ao confinamento quando considera-se interações repulsivas entre as partículas. Porém, além de garantir o confinamento, o potencial externo pode levar o condensado a um colapso, na medida em que as colisões binárias não conseguem mais contrabalançar a força de confinamento gerada por este potencial. Quando $V_{ext}(\mathbf{r}, t) = 0$, a equação de Gross-Pitaevskii recai em

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.20)$$

conhecida como equação de Schrödinger não linear.

3.2.1 Colapso da função de onda

A escrita desta seção foi derivada principalmente de [22]. Soluções numéricas podem ser encontradas em [24, 25]. O colapso da função de onda do condensado pode ocorrer sob determinadas condições. Para o caso de interações binárias atrativas $g < 0$, ou equivalentemente $a < 0$, a densidade do condensado tende a crescer no centro da armadilha podendo gerar uma singularidade na densidade do condensado, conhecida como colapso da função de onda. A energia cinética das partículas ou pressão contrabalança essa tendência do colapso, podendo evitá-lo em determinadas circunstâncias.

Pode-se fazer uma estimativa das condições para que o colapso de onda ocorra. Considerando a energia cinética média local do condensado como $\langle K \rangle \simeq -\hbar^2/2M \Delta r^2$ e a energia de interação binária $\langle U \rangle = \langle g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle \simeq -|g| \rho_{eq} = -|g| N/V = -3|g| N/4\pi \Delta r^3$, onde Δr é o comprimento da armadilha. Supondo que a energia cinética seja menor que a energia de interação, estamos no regime onde ocorre o colapso. No limite em que as duas energias são iguais, encontramos um valor crítico para o número de partículas como sendo

$$N_{cr} = \frac{\Delta r}{6|a|}, \quad (3.21)$$

onde usamos que $g = 4\pi \hbar^2 a/M$. Se definirmos $\Delta r = a_{ho} = (\hbar/M\omega_0)^{1/2}$, ficamos com a seguinte relação de (3.21):

$$\frac{N_{cr} |a|}{a_{ho}} = 0.17, \quad (3.22)$$

onde a_{ho} é definido como o comprimento característico do oscilador harmônico.

Uma investigação mais elaborada pode ser feita partindo do funcional energia para a equação de Gross-Pitaevskii

$$E[\Psi(\mathbf{r}, t)] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2M} |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^4 \right]. \quad (3.23)$$

As soluções da equação de Gross-Pitaevskii correspondem ao mínimo local do funcional energia $E[\Psi(\mathbf{r}, t)]$. Para o estado fundamental a função de onda pode ser escrita da seguinte maneira

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{-i\mu t}{\hbar}\right), \quad (3.24)$$

com μ sendo o potencial químico e $\psi(\mathbf{r})$ uma função real que é normalizada pelo número de partículas no estado fundamental N_0 que é igual ao número de partículas total N para um gás de bósons inteiramente no regime condensado

$$\int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r})^2 = N_0 = N. \quad (3.25)$$

Para uma armadilha esfericamente simétrica, pode-se minimizar a energia $E[\Psi(\mathbf{r}, t)]$ através do ansatz:

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{N}{\eta^3 a_{ho}^3 \pi^{3/2}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\eta^2 a_{ho}^2}\right), \quad (3.26)$$

onde η é um parâmetro adimensional o qual fixa a largura do condensado. Substituindo (3.26) em (3.23) encontramos:

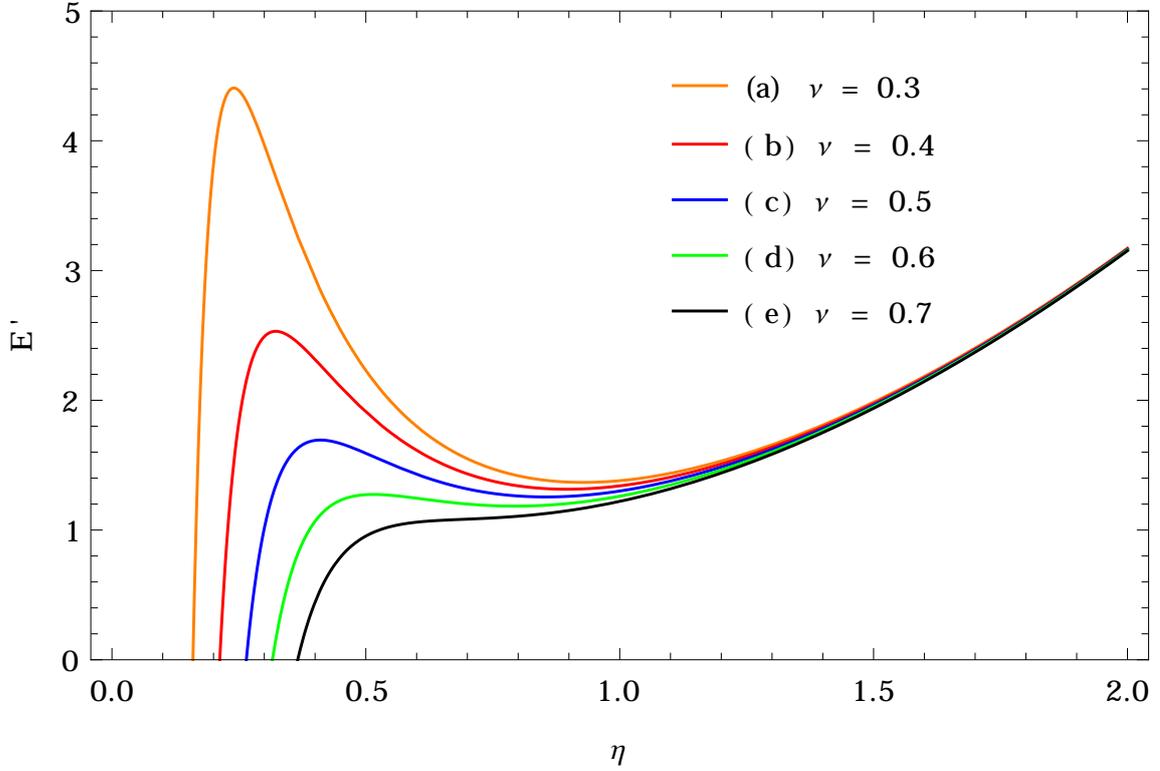
$$\frac{E(\eta)}{N\hbar\omega_0} = \frac{3}{4}(\eta^{-2} + \eta^2) - 2\pi^{-1/2} \frac{N|a|}{a_{ho}} \eta^{-3}. \quad (3.27)$$

Se definirmos o parâmetro $\nu = N|a|/a_{ho}$, pode-se encontrar um valor crítico ν_{cr} para o qual o mínimo local da função $E(\eta)$ desaparece, que corresponde a $N = N_{cr}$. A partir deste limite a equação de Gross-Pitaevskii não possui mais solução, ou também que a função de onda colapsou, ver [Figura 2](#) na página seguinte. Neste limite observa-se que a primeira e a segunda derivada de $E(\eta)$ em relação à η na equação (3.27) são iguais a zero para $\eta = \eta_{cr}$. Após estes cálculos, obtém-se

$$\frac{N_{cr}|a|}{a_{ho}} = 0,6705. \quad (3.28)$$

A seguir [Figura 2](#) referente à equação (3.27) para diferentes valores de ν , onde definimos o valor adimensional $E' = E/N\hbar\omega_{ho}$.

Figura 2 – Figura referente à equação (3.27) onde é relacionado a energia por partícula, em unidades de $\hbar\omega_{ho}$, $E' = E/(N\hbar\omega_{ho})$ para átomos interagentes com forças do tipo contato atrativas confinados num potencial externo esférico, como função do comprimento efetivo η . Curvas foram plotadas com diversos valores de ν .



Fonte: PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S [22].

3.2.2 A equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo

Os cálculos desta seção baseiam-se principalmente em [6]. Em problemas físicos é interessante abordar o sistema em seu regime estacionário, isto é, estudar suas características num tempo suficientemente grande para que o sistema atinja um equilíbrio. Para isto, é conveniente obter uma equação cujas variáveis independam do tempo.

Para isto adotamos a decomposição usual da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ como [6]

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left[-\frac{iE}{\hbar} t\right] \approx \psi(\mathbf{r}) \exp\left[-\frac{i\mu}{\hbar} t\right], \quad (3.29)$$

o qual já foi abordada na equação (3.24). A troca de E por μ refere-se ao fato de microscopicamente $\Psi(\mathbf{r}, t)$ é igual ao elemento de matriz do operador aniquilação $\hat{\Psi}$ entre o estado fundamental com N partículas e o estado com $N - 1$ partículas,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle N - 1 | \hat{\Psi}(\mathbf{r}) | N \rangle \propto \exp[-i(E_N - E_{N-1})t/\hbar], \quad (3.30)$$

uma vez que os estados $|N\rangle$ e $|N-1\rangle$ evoluem no tempo com $\exp(-iE_N t/\hbar)$ e $\exp(-iE_{N-1} t/\hbar)$,

respectivamente. Para N grande, a diferença em energia do estado fundamental $E_N - E_{N-1}$ é igual à $\partial E/\partial N$, o qual é o potencial químico μ .

Substituindo a equação (3.29) em (3.18) obtemos a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo:

$$\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) - V_{ext}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) - g|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) + \mu\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.31)$$

onde supomos que o potencial externo, $V_{ext}(\mathbf{r}, t)$ seja independente do tempo.

3.2.2.1 A aproximação de Thomas-Fermi

Nesta aproximação supõe-se que a distribuição da função de onda $\psi(\mathbf{r})$ seja quase uniforme. Com isso, podemos considerar $\nabla^2\psi(\mathbf{r})/\psi(\mathbf{r}) \approx 0$. Então a equação (3.31) resulta em:

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = \frac{\mu - V_{ext}(\mathbf{r})}{g}\Theta(r_{TF} - r), \quad (3.32)$$

no qual $\Theta(r - r_{TF})$ é uma função degrau e r_{TF} é conhecido como o raio de Thomas-Fermi, distância espacial para o qual $\psi(r_{TF}, \theta, \phi) = 0$. Se supormos um potencial externo esfericamente simétrico, $V_{ext}(\mathbf{r}) = (1/2)M\omega_0^2 r^2$, da equação (3.32) obtemos a seguinte expressão para $r > r_{TF}$:

$$\mu = \frac{1}{2}M\omega_0^2 r_{TF}^2. \quad (3.33)$$

Combinando as equações (3.32) e (3.33), ficamos com:

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = \frac{M\omega_0^2}{2g}(r_{TF}^2 - r^2)\Theta(r_{TF} - r). \quad (3.34)$$

Da condição de normalização para $|\psi(\mathbf{r})|^2$:

$$N = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi(\mathbf{r})|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi. \quad (3.35)$$

Substituindo (3.34) em (3.35), obtemos a seguinte expressão para r_{TF}

$$r_{TF} = \left(\frac{15gN}{4\pi M\omega_0^2} \right)^{\frac{1}{5}}. \quad (3.36)$$

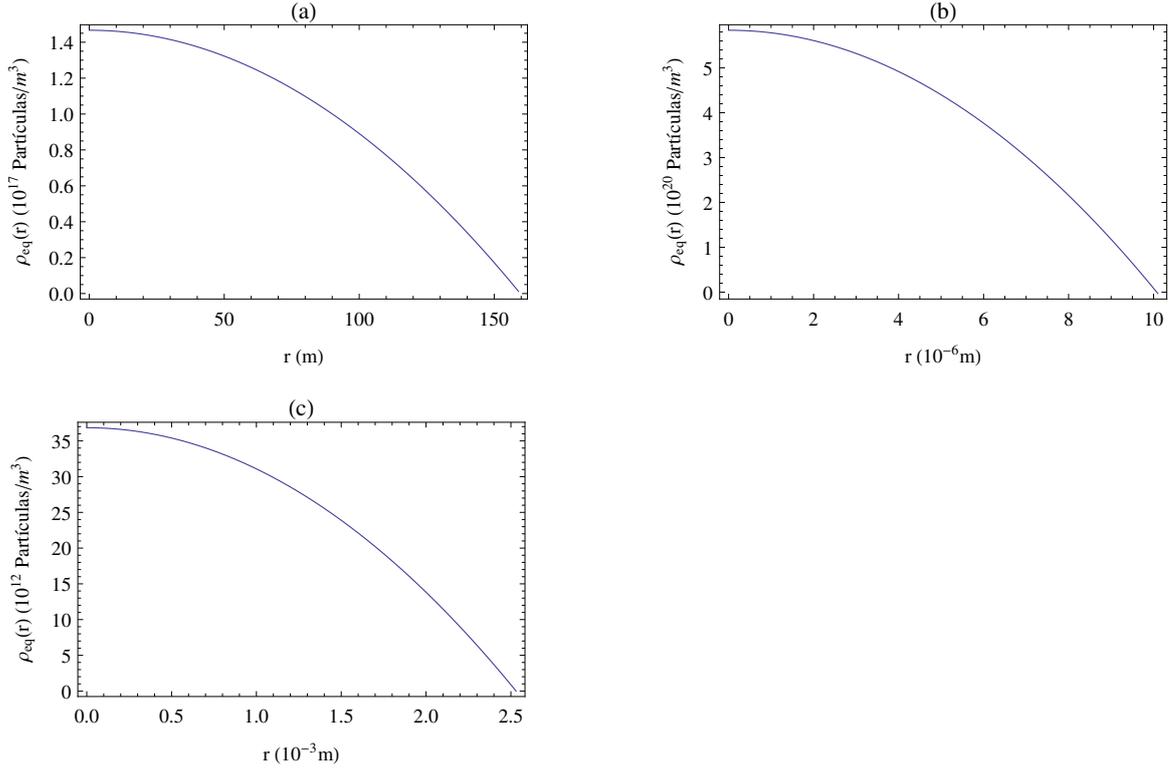
Voltando para a equação (3.34) com r_{TF} dado pela equação (3.36), e uma vez que $|\psi(\mathbf{r})|^2 = \rho_{eq}(\mathbf{r})$, podemos expressar $|\psi(\mathbf{r})|^2$ como:

$$\rho_{eq}(\mathbf{r}) = \frac{M\omega_0^2}{2g} \left[\left(\frac{15gN}{4\pi M\omega_0^2} \right)^{\frac{2}{5}} - r^2 \right] \Theta(r_{TF} - r), \quad (3.37)$$

onde $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ é a densidade de equilíbrio local do condensado.

Abaixo foram feitos três gráficos para a equação (3.37) onde supomos que o condensado seja formado por átomos de hidrogênio, comprimento de espalhamento $a \approx 10^{-12}$ m [6].

Figura 3 – Figura referente à equação (3.37) onde é relacionada a densidade de equilíbrio $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ (Partículas/m³) de um condensado formado por ($N = 10^6$) átomos de hidrogênio (massa $M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função da distância r em metros. Os três gráficos foram feitos usando um comprimento de espalhamento $a \approx 10^{-12}$ m, o que nos dá $g \approx 10^{-52}$ J.m³. No gráfico (a) usamos $\omega_0 = 1$ Hz, com $r_{TF} = 1,6 \times 10^{-4}$ m. Para o gráfico (b), $\omega_0 = 10^3$ Hz e $r_{TF} = 1,0 \times 10^{-5}$ m. E para o gráfico (c), $\omega_0 = 10^{-3}$ Hz e $r_{TF} = 2,5 \times 10^{-3}$ m.



É interessante notar que se desligarmos o potencial externo, conforme equação (3.32), obtemos o seguinte perfil para a densidade de equilíbrio

$$\rho_{eq} = \frac{\mu}{g} \Theta(r_{TF} - r). \quad (3.38)$$

Podemos obter uma expressão para o potencial químico a partir da condição de normalização, equação (3.35)

$$\mu = \frac{3gN}{4\pi r_{TF}^3}. \quad (3.39)$$

3.3 A equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local independente do tempo

Substituindo a equação (3.29) na equação (3.17) obtemos a equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + g|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) + \psi(\mathbf{r})\int_{-\infty}^{\infty}d\mathbf{r}'U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') = \mu\psi(\mathbf{r}) \quad (3.40)$$

Podemos obter uma relação para o potencial químico μ utilizando as condições de fronteira do problema. Por exemplo, para o caso de simetria esférica, tem-se que $\psi(r \geq r_{TF}) = 0$. Assim

$$\mu = V_{ext}(r_{TF}), \quad (3.41)$$

vide equação (3.32).

Agora, vamos procurar soluções para a equação (3.40). Para isso vamos definir um potencial externo esféricamente simétrico:

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}M\omega_0^2r^2. \quad (3.42)$$

Por último, precisamos definir o potencial de interação de longo alcance $U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$. Vamos trabalhar com dois tipos, o potencial de interação variando com o inverso da distância entre dois corpos e o potencial de interação gaussiano.

3.3.1 Potencial de interação variando com o inverso da distância

A escrita desta seção tem como referência principalmente [23]. O potencial de interação inverso da distância é dado por:

$$U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \frac{C}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad (3.43)$$

onde C é uma constante que modula a intensidade da interação. Para $C > 0$ a interação entre as partículas é repulsiva e para $C < 0$ a interação atrativa.

Vale ressaltar que a interação inverso da distância se assemelha ao potencial gravitacional.

Substituindo o potencial de interação (3.43) na equação (3.40) com $C < 0$ e $g > 0$, e também utilizando a aproximação de Thomas-Fermi, que consiste em desprezar o termo $\nabla^2\psi(\mathbf{r})$, obtemos:

$$\frac{1}{2}M\omega_0^2r^2 + g|\psi(\mathbf{r})|^2 - C\int_0^{2\pi}\int_0^\pi\int_0^\infty\frac{|\psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}r'^2\sin\theta'dr'd\theta'd\phi' = \mu, \quad (3.44)$$

Prosseguindo no cálculo da equação (3.44), vamos supor que o problema tem simetria esférica, $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r)$. Dado esta simetria, a integral pode ser resolvida fixando \mathbf{r} em qualquer posição do espaço, que por simplicidade escolhemos no eixo z. Com isso temos que o raio \mathbf{r} em coordenadas esféricas fica, no eixo z, $\mathbf{r} = (0, 0, r)$. Isto nos possibilita expressar o termo $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ como:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'}. \quad (3.45)$$

Sabendo que $d \cos \theta' = -\text{sen} \theta' d\theta'$, a integral da equação (3.44) fica:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{|\psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} r'^2 \text{sen} \theta' dr' d\theta' d\phi' = \\ & 2\pi \int_0^\infty r'^2 |\psi(r')|^2 dr' \int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta'}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'}}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

Seguindo o cálculo da integral, observa-se que:

$$\int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta'}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'}} = -\frac{1}{2rr'} \int_{r^2+r'^2-2rr'}^{r^2+r'^2+2rr'} u^{-\frac{1}{2}} du, \quad (3.47)$$

onde fizemos

$$u = r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta' \quad (3.48)$$

então (3.47) fica

$$-\frac{1}{2rr'} \int_{r^2+r'^2-2rr'}^{r^2+r'^2+2rr'} u^{-\frac{1}{2}} du = \frac{1}{rr'} \left((r^2 + r'^2 + 2rr')^{\frac{1}{2}} - (r^2 + r'^2 - 2rr')^{\frac{1}{2}} \right). \quad (3.49)$$

A equação (3.49) pode ser expressa como:

$$\int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta'}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta'}} = \frac{1}{rr'} (r + r' - |r - r'|). \quad (3.50)$$

Antes de retornarmos para a equação (3.46), vamos analisar o termo $r + r' - |r - r'|$ para os casos $r < r'$ e $r > r'$.

Para $r < r'$ temos:

$$r + r' - |r - r'| = 2r, \quad (3.51)$$

e para $r > r'$:

$$r + r' - |r - r'| = 2r'. \quad (3.52)$$

Agora retornando para a equação (3.46), obtemos:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{|\psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} r'^2 \sin\theta' dr' d\theta' d\phi' = 4\pi \int_0^r \frac{|\psi(r')|^2 r'^2}{r} dr' + 4\pi \int_r^{r_{TF}} |\psi(r')|^2 r' dr', \quad (3.53)$$

onde r_{TF} é o raio de Thomas-Fermi, o raio para o qual $\psi(r_{TF}) = 0$. Voltando para a equação (3.44), ficamos com:

$$\frac{1}{2} M \omega_0^2 r^2 + g |\psi(r)|^2 - 4\pi C \left[\int_0^r \frac{|\psi(r')|^2 r'^2}{r} dr' + \int_r^{r_{TF}} |\psi(r')|^2 r' dr' \right] = \mu \quad (3.54)$$

Se multiplicarmos a equação (3.54) por r e diferenciarmos duas vezes em relação a r obtemos:

$$3M\omega_0^2 r + g \frac{d^2}{dr^2} [r |\psi(r)|^2] - 4\pi C \frac{d^2}{dr^2} \left[\int_0^r |\psi(r')|^2 r'^2 dr' + r \int_r^{r_{TF}} |\psi(r')|^2 r' dr' \right] = 0. \quad (3.55)$$

A fim de simplificarmos as integrais, utilizaremos a seguinte propriedade:

$$\frac{d}{dx} \int_a^x f(x, y) dy = \int_a^x \frac{df(x, y)}{dx} dy + f(x, y). \quad (3.56)$$

Então para a primeira integral obtemos:

$$\frac{d^2}{dr^2} \left[\int_0^r |\psi(r')|^2 r'^2 dr' \right] = r^2 \frac{d}{dr} [|\psi(r)|^2] + 2r |\psi(r)|^2. \quad (3.57)$$

e para a segunda:

$$\frac{d^2}{dr^2} \left[r \int_r^{r_{TF}} r' |\psi(r')|^2 dr' \right] = -r |\psi(r)|^2 - 2r |\psi(r)|^2 - r^2 \frac{d}{dr} [|\psi(r)|^2]. \quad (3.58)$$

Portanto, a equação (3.55) fica:

$$g \frac{d^2}{dr^2} [r |\psi(r)|^2] + 4\pi C r |\psi(r)|^2 + 3M\omega_0^2 r = 0. \quad (3.59)$$

Com o propósito de simplificarmos a equação acima, faremos a seguinte substituição

$$|\psi(r)|^2 = \frac{\varphi(r)}{r}, \quad (3.60)$$

com isso obtemos:

$$\frac{d^2}{dr^2} \varphi(r) + \frac{4\pi C}{g} \varphi(r) + \frac{3M\omega_0^2}{g} r = 0 \quad (3.61)$$

Essa equação diferencial tem como solução:

$$\varphi(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr) - \frac{3M\omega_0^2}{4\pi C} r, \quad (3.62)$$

onde A , B e k são constantes com

$$k = \sqrt{\frac{4\pi C}{g}} \quad (3.63)$$

Substituindo a equação (3.62) em (3.60), obtemos:

$$|\psi(r)|^2 = \left[\frac{1}{r} (A \operatorname{sen}(kr) + B \operatorname{cos}(kr)) - \frac{3M\omega_0^2}{4\pi C} \right] \Theta(r_{TF} - r). \quad (3.64)$$

onde $\Theta(r_{TF} - r)$ é a função degrau, que garante que a função $\psi(r)$ vá para zero para valores maiores que o raio de Thomas-Fermi, r_{TF} .

Sabemos que $\psi(r)$ é finita em $r = 0$, portanto $B = 0$. Com isso, (3.64) fica:

$$|\psi(r)|^2 = \left[\frac{A \operatorname{sen}(kr)}{r} - \frac{3M\omega_0^2}{4\pi C} \right] \Theta(r_{TF} - r). \quad (3.65)$$

Agora, se usarmos a condição $|\psi(r_{TF})|^2 = 0$, obtemos

$$A = \frac{3M\omega_0^2 r_{TF}}{4\pi C \operatorname{sen}(kr_{TF})} \quad (3.66)$$

e a equação (3.65) resulta em:

$$\rho_{eq}(r) = \frac{3M\omega_0^2}{4\pi C} \left[\frac{r_{TF}}{\operatorname{sen}(kr_{TF})} \frac{\operatorname{sen}(kr)}{r} - 1 \right] \Theta(r_{TF} - r), \quad (3.67)$$

onde $|\psi(r)|^2 = \rho_{eq}(r)$.

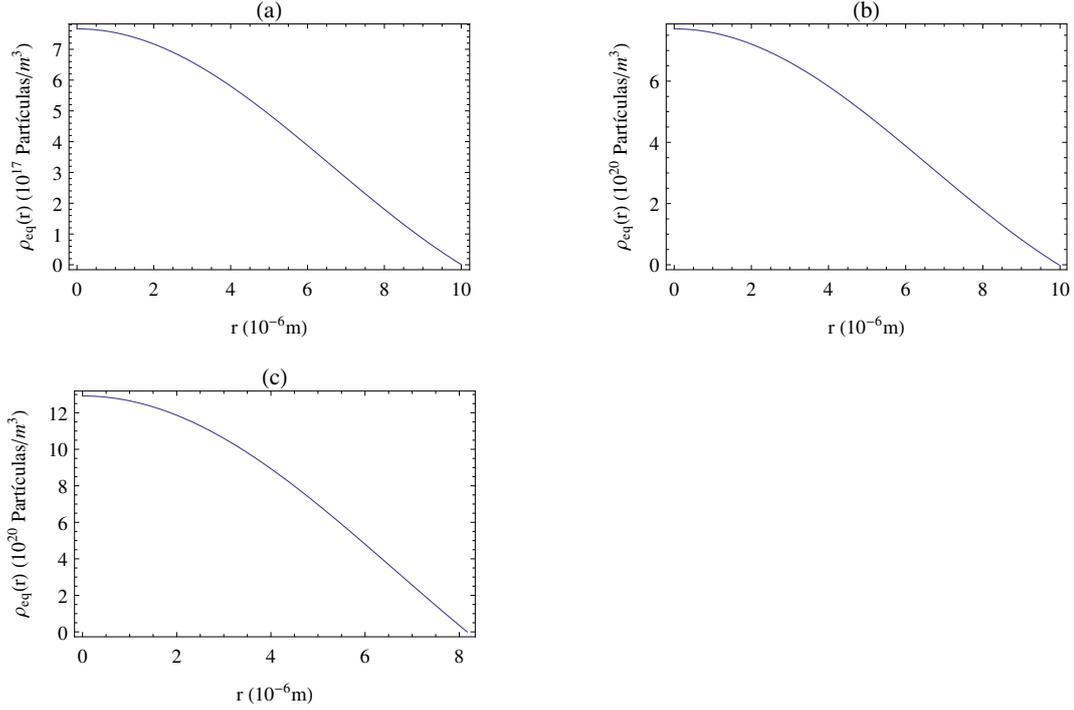
Utilizando a condição de normalização, equação (3.35), obtemos

$$k^2 \operatorname{sen}(kr_{TF}) \left[\frac{r_{TF}^2}{3} + \frac{NC}{3M\omega_0^2 r_{TF}} \right] = \operatorname{sen}(kr_{TF}) - kr_{TF} \operatorname{cos}(kr_{TF}) \quad (3.68)$$

que pode nos permitir encontrar o valor do raio de Thomas-Fermi, r_{TF} , dadas as constantes do problema.

Abaixo gráfico da equação (3.67).

Figura 4 – Figura referente à equação (3.67) onde é relacionado a densidade de equilíbrio $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ (Partículas/m³) de um condensado formado por ($N = 10^6$) átomos de hidrogênio (massa $M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função da distância r em metros. Os três gráficos foram feitos usando um comprimento de espalhamento $a \approx 10^{-12}$ m, o que nos dá $g = 1,59 \times 10^{-52}$ J.m³, $C = 1,245 \times 10^{-42}$ J.m. No gráfico (a) usamos $\omega_0 = 1$ Hz, com $r_{TF} = 1,00 \times 10^{-5}$ m. Para o gráfico (b), $\omega_0 = 10^2$ Hz e $r_{TF} = 9,97 \times 10^{-6}$ m. E para o gráfico (c), $\omega_0 = 10^3$ Hz e $r_{TF} = 8,17 \times 10^{-6}$ m.



3.3.1.1 Auto confinamento, caso sem armadilha

Se fizermos $\omega_0 = 0$, recaímos no caso em que desligamos o potencial externo:

$$|\psi(r)|^2 = \frac{A \text{sen}(kr)}{r} \Theta(r_{TF} - r). \quad (3.69)$$

Agora se usarmos a definição do raio de Thomas-Fermi,

$$\psi(r_{TF}) = 0, \quad (3.70)$$

obtemos, da expressão (3.69), que:

$$\text{sen}(k r_{TF}) = 0, \quad (3.71)$$

e portanto,

$$r_{TF} = \frac{n\pi}{k}, \quad (3.72)$$

com n um número inteiro positivo e diferente de zero. Vamos escolher um valor para n cuja o tamanho de r_{TF} seja o menor. Isto corresponde à $n = 1$. Portanto,

$$r_{TF} = \frac{\pi}{k}. \quad (3.73)$$

Para obter a constante A , usamos a condição de normalização:

$$\int_0^\pi \text{sen}\theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^\infty |\psi(r')|^2 r'^2 dr' = N, \quad (3.74)$$

onde N é o número de partículas do condensado. Substituindo (3.69) em (3.74), ficamos com

$$4\pi A \int_0^{r_{TF}} r' \text{sen}(kr') dr' = \frac{4\pi A}{k} \left[\frac{\text{sen}(kr_{TF})}{k} - r_{TF} \cos(kr_{TF}) \right] = N. \quad (3.75)$$

Agora substituindo (3.73) em (3.75), encontramos o valor da constante A :

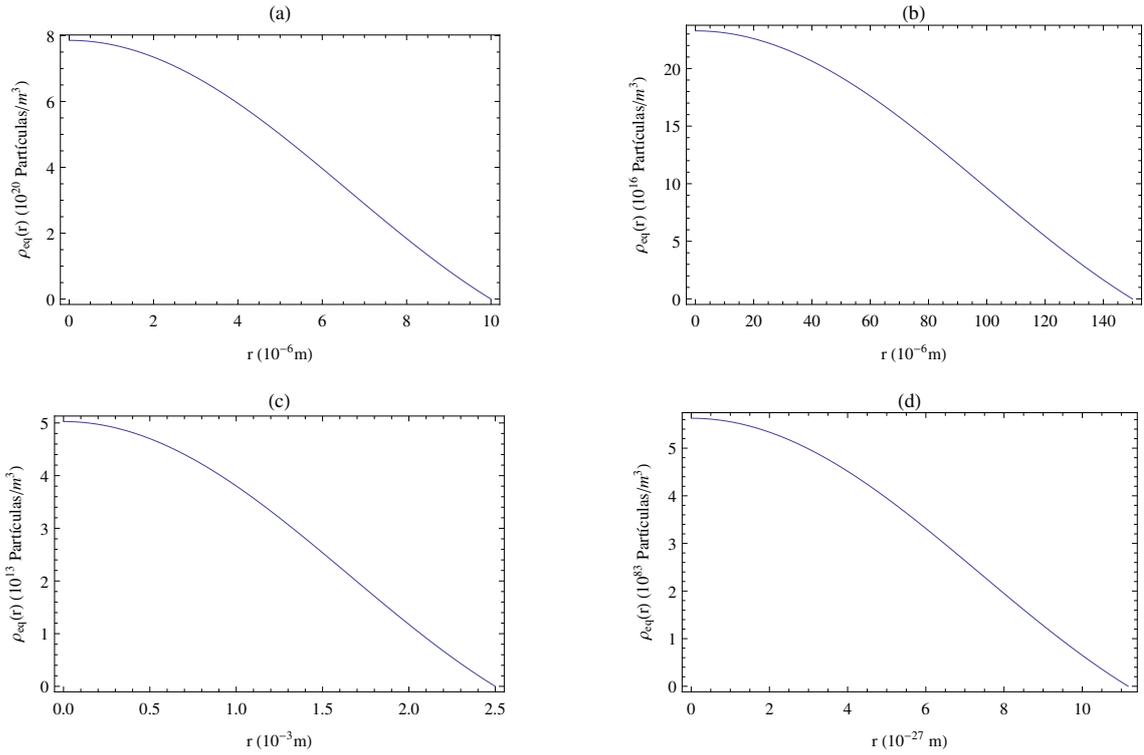
$$A = \frac{N}{4} \left(\frac{k}{\pi} \right)^2. \quad (3.76)$$

Voltando para a equação (3.69) com o valor da constante A , obtemos:

$$|\psi(r)|^2 = \frac{N}{4} \left(\frac{k}{\pi} \right)^2 \frac{\text{sen}(kr)}{r} \Theta(r_{TF} - r). \quad (3.77)$$

Na figura abaixo são mostrados quatro gráficos. Para os gráficos (a), (b) e (c), foi escolhido uma constante C de tal forma que o raio de Thomas-Fermi, r_{TF} , coincidissem com o da Figura 3. Já para o gráfico (d), optamos pela escolha de $C = 1 \text{ J.m}$, uma vez que está numa ordem de grandeza bem diferente que nos outros três gráficos.

Figura 5 – Figura referente à equação (3.77) onde é relacionado a densidade de equilíbrio $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ (Partículas/m⁻³) de um condensado formado por ($N = 10^6$) átomos de hidrogênio (massa $M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função da distância r em metros para o caso de uma interação de longo alcance sem potencial externo ($\omega_0 = 0$). Os três gráficos foram feitos usando um comprimento de espalhamento $a \approx 10^{-12}$ m, o que nos dá $g \approx 10^{-52}$ J.m³. No gráfico (a) usamos $C = 1,245 \times 10^{-42}$ J.m, com $r_{TF} = 10^{-5}$ m. Para o gráfico (b), $C = 5,55 \times 10^{-45}$ J.m e $r_{TF} = 1,5 \times 10^{-4}$ m. Para o gráfico (c), $C = 1,998 \times 10^{-47}$ J.m e $r_{TF} = 2,5 \times 10^{-3}$ m. Para o gráfico (d), $C = 1$ J.m e $r_{TF} = 1,12 \times 10^{-26}$ m.



3.3.2 Potencial de interação gaussiano

O potencial de interação gaussiano é dado por:

$$U_{int}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = V_0 \exp\left[-\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2\right], \quad (3.78)$$

onde V_0 e α são constantes que modulam, respectivamente a intensidade e o alcance da interação. A constante α é definida como sendo positiva e para $\alpha \rightarrow \infty$, o potencial gaussiano vira um potencial de contato. Já a constante V_0 pode ser tanto positiva quanto negativa. Para $V_0 > 0$ a interação entre as partículas é repulsiva e para $V_0 < 0$ a interação é atrativa. Vamos considerar o caso de interação atrativa nesta seção, $V_0 < 0$.

Substituindo o potencial de interação (3.78) com $V_0 < 0$ na equação (3.40) e utilizando a aproximação de Thomas-Fermi que consiste em desprezar o termo

$(-\hbar^2 \nabla^2 \psi(\mathbf{r})) / (2M\psi(\mathbf{r}))$, obtemos:

$$\frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + g|\psi(\mathbf{r})|^2 - |V_0| \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi(\mathbf{r}')|^2 \exp[-\alpha|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2] r'^2 \sin\theta' dr' d\theta' d\phi' = \mu, \quad (3.79)$$

Fazendo a suposição, mesma feita na [subseção 3.3.1](#), de que a função tenha simetria radial, $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r)$, a integral da equação (3.79) pode ser computada fixando \mathbf{r} no eixo z. Com isso $\mathbf{r} = (0, 0, r)$ e o termo $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2$ na integral da equação (3.79) pode ser expresso como:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 = r^2 + r'^2 - 2rr' \cos\theta'. \quad (3.80)$$

A integral em (3.79), fazendo a mudança de variável $\sin\theta' d\theta' = -d\cos\theta'$, resulta em:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi(r')|^2 \exp[-\alpha|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2] r'^2 \sin\theta' dr' d\theta' d\phi' = \\ & -\frac{\pi}{r\alpha} \int_0^\infty r' |\psi(r')|^2 \left(\exp[-\alpha(r+r')^2] - \exp[-\alpha(r-r')^2] \right) dr' \end{aligned} \quad (3.81)$$

Substituindo esse resultado na equação (3.79), obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{\pi|V_0|}{r\alpha} \int_0^\infty dr' r' |\psi(r')|^2 \left(\exp[-\alpha(r+r')^2] - \exp[-\alpha(r-r')^2] \right) \\ & + \frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + g|\psi(r)|^2 = \mu, \end{aligned} \quad (3.82)$$

que é uma equação integral singular uma vez que um dos limites de integração é infinito.

3.3.2.1 Solução para $\alpha r^2 \ll 1$

Neste caso, podemos expressar o termo da integral contida na equação (3.82) como sendo

$$\frac{1}{r\alpha} \left\{ \exp[-\alpha(r+r')^2] - \exp[-\alpha(r-r')^2] \right\} \approx -4 \exp[-\alpha r'^2]. \quad (3.83)$$

Portanto, (3.82) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$4\pi|V_0| \int_0^\infty dr' r'^2 |\psi(r')|^2 \exp[-\alpha r'^2] + \frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + g|\psi(r)|^2 = \mu. \quad (3.84)$$

Derivando (3.84) em relação a r obtemos

$$\frac{d|\psi(r)|^2}{dr} + \frac{M\omega_0^2}{g} r = 0. \quad (3.85)$$

A equação (3.85) tem como solução, usando a condição $|\psi(r_{TF})| = 0$,

$$|\psi(r)|^2 = \frac{M\omega_0^2}{2g} (r_{TF}^2 - r^2). \quad (3.86)$$

Esta solução coincide com a encontrada na seção [subseção 3.2.2.1](#).

4 Hidrodinâmica e ondas lineares

4.1 Formulação hidrodinâmica para a equação de Schrödinger não-linear e não-local em condensados de Bose-Einstein

O objetivo nesta seção é obter uma descrição do condensado análoga à obtida na mecânica dos fluidos [26, 27]. Para isso, vamos aplicar uma formulação hidrodinâmica semelhante à que é aplicada em sistemas quânticos [28, 29]. A escrita deste seção reproduz as informações que estão contidas principalmente nas referências [6, 8, 22, 23].

4.1.1 Dedução das equações para a densidade e a velocidade locais do condensado

Fazendo o complexo conjugado da equação (3.16), obtemos:

$$\begin{aligned}
 -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t) \\
 &+ \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi(\mathbf{r}', t) \Psi^*(\mathbf{r}', t) \right) \Psi^*(\mathbf{r}, t).
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Se multiplicarmos a equação (3.16) por Ψ^* , e a equação (4.1) por Ψ e, após, subtrairmos a primeira pela segunda, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0, \tag{4.2}$$

que é a equação da continuidade para o condensado. Aqui temos que

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \tag{4.3}$$

é a densidade local de partículas do condensado e

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2Mi} \left[\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right], \tag{4.4}$$

é a densidade local de corrente do condensado.

A definição de corrente local de um fluido quântico, $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, é:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \tag{4.5}$$

onde $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ é a velocidade local do condensado.

Inserindo a equação (4.5) em (4.2) obtemos uma nova equação que relaciona a velocidade do condensado e sua densidade local partículas, que é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \right] = 0 \tag{4.6}$$

A função de onda do condensado $\Psi(\mathbf{r}, t)$ pode ser definida como [23]

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, t)\right], \quad (4.7)$$

onde $S(\mathbf{r}, t)$ é a fase do condensado. E agora inserirmos a equação (4.7) em (4.4), obtemos

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{M} \rho(\mathbf{r}, t) \nabla S(\mathbf{r}, t). \quad (4.8)$$

Agora, substituindo $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ da equação (4.8) pelo da equação (4.5), ficamos com:

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{M} \rho(\mathbf{r}, t) \nabla S(\mathbf{r}, t) \quad (4.9)$$

que resulta em:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{M} \nabla S(\mathbf{r}, t). \quad (4.10)$$

Vamos novamente utilizar a definição para a função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, equação (4.7), e substituir na equação (3.16). Dessa substituição, resulta uma equação com parte real e parte imaginária:

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} - \frac{1}{2M} \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} (\nabla S(\mathbf{r}, t))^2 - \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{r}, t) \\ & - V_{ext}(\mathbf{r}, t) \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} - \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \int U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \\ & + g\rho(\mathbf{r}, t) \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} + i \frac{\hbar}{2\sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)}} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) \\ & + i \frac{\hbar}{2M} \left[\nabla \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \cdot \nabla S(\mathbf{r}, t) + \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \nabla^2 S(\mathbf{r}, t) \right] = 0. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Para essa equação ser satisfeita, tanto a parte real quanto a parte imaginária são iguais a zero. Com a parte imaginária reobtemos a equação (4.6). Da parte real, obtemos:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{1}{2M} (\nabla S(\mathbf{r}, t))^2 + g\rho(\mathbf{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)}}{\sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)}} \\ &+ V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \int U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Como estamos interessados na velocidade local do condensado $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, aplicamos o gradiente em ambos os lados da equação (4.12) e, em seguida, inserimos (4.10) com a ajuda do termo $\nabla S(\mathbf{r}, t)$. Com isso, obtemos uma equação que relaciona a velocidade local do condensado com a sua densidade local,

$$\begin{aligned} M \left(\frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \right) &= -\nabla \left(V_{ext}(\mathbf{r}, t) + g\rho(\mathbf{r}, t) + \int U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)}}{\sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)}} \right). \end{aligned} \quad (4.13)$$

A equação (4.13) é semelhante a uma equação de Euler [26, 27] para o campo de velocidade local de um líquido ideal, invíscido, e é governada por forças dadas pelos gradientes do potencial externo, dos potenciais de interação, e da pressão quântica, também conhecida como potencial de Bohm [8], que é o último termo do lado direito da equação (4.13).

As equações (4.6) e (4.13) formam um conjunto de equações acopladas para $\rho(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ que são, respectivamente, a densidade local do condensado e a velocidade local do condensado e serão discutidas na próxima seção.

4.2 Ondas Lineares

Nesta seção analisaremos as equações para a densidade e a velocidade do condensado que foram obtidas no seção 4.1 através do método hidrodinâmico [30, 31, 32]. Utilizaremos, para esta análise, o método de linearização, descrito na subseção 4.2.1, que nos permitirá investigar, entre outras coisas, as soluções de equilíbrio para a densidade e a velocidade locais do condensado. A subseção 4.2.2 aborda o caso em que o termo denominado densidade de equilíbrio do condensado usado no método de linearização é constante. Já na subseção 4.2.3 esse termo é escolhido ser uma função que varia lentamente no espaço.

4.2.1 O processo de linearização

As informações contidas nesta seção foram extraídas principalmente de [6, 23]. As equações (4.6) e (4.13) nos dão informações sobre a densidade e velocidade do condensado. O processo de linearização consiste em considerar essas quantidades como pequenas perturbações do estado de equilíbrio do sistema. Com isto, escrevemos [6]:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_{eq}(\mathbf{r}) + \delta\rho(\mathbf{r}, t), \quad (4.14)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v}_{eq}(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{v}(\mathbf{r}, t). \quad (4.15)$$

Aqui $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ e $\mathbf{v}_{eq}(\mathbf{r})$ são, respectivamente, os valores da densidade e da velocidade quando o sistema atinge o equilíbrio. Já $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ e $\delta\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ representam pequenas perturbações destes valores.

A configuração de equilíbrio pode ser suposta de várias formas. No nosso problema, vamos supor sempre $\mathbf{v}_{eq}(\mathbf{r}) = 0$. Já para a densidade de equilíbrio, $\rho_{eq}(\mathbf{r})$, vamos supor dois casos. Um em que $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ é uniforme em todo o espaço e um outro caso em que ele é uma função que tem uma variação espacial lenta. Assim, prosseguindo no processo de linearização, devemos substituir ambas equações (4.14) e (4.15) na equação (4.6) e (4.13) a fim de obter a linearização de ambas. Da equação (4.6) obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \left[\rho_{eq}(\mathbf{r}) \delta\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (4.16)$$

Da equação (4.13), obtemos duas equações, uma de ordem zero:

$$\nabla \left(V_{ext}(\mathbf{r}) + g\rho_{eq}(\mathbf{r}) + \int U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho_{eq}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho_{eq}(\mathbf{r})}}{\sqrt{\rho_{eq}(\mathbf{r})}} \right) = 0, \quad (4.17)$$

e outra linearizada:

$$M \frac{\partial}{\partial t} \delta \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \left(g\delta\rho(\mathbf{r}, t) + \int U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' - \frac{\hbar^2}{4M} \frac{\nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}, t)}{\rho_{eq}(\mathbf{r}, t)} \right). \quad (4.18)$$

A fim de obter o desacoplamento de $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ e $\delta\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ nas equações linearizadas, derivamos (4.16) em relação ao tempo

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \left[\rho_{eq}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial t} \delta\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (4.19)$$

e substituímos a equação (4.18) em (4.19). Com isso, obtemos uma equação linear apenas para a variável densidade local e sua perturbação:

$$\begin{aligned} M \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot \left[\rho_{eq}(\mathbf{r}) \nabla \left(g\delta\rho(\mathbf{r}, t) + \int U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\hbar^2}{4M} \frac{\nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}, t)}{\rho_{eq}(\mathbf{r})} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.20)$$

4.2.2 Densidade de equilíbrio uniforme

Nesta seção, consideramos que o estado de equilíbrio do sistema seja o mais trivial possível. Para isso atribuímos um valor constante para a densidade de equilíbrio do condensado. A equação (4.20), a equação linearizada, com essa suposição é dada por:

$$\begin{aligned} M \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho(\mathbf{r}, t) &= \nabla^2 \left[g\rho_{eq} \delta\rho(\mathbf{r}, t) + \rho_{eq} \int U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hbar^2}{4M} \nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}, t) \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Agora vamos olhar para uma solução na forma de onda para a perturbação da densidade, $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$, como:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \delta\tilde{\rho} \exp \left[-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \right], \quad (4.22)$$

onde $\delta\tilde{\rho}$ é uma constante.

Substituindo a equação (4.22) em (4.21) e fazendo a mudança de variável no termo integral do tipo $\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$ obtemos:

$$\omega^2 = \frac{\hbar^2}{4M^2} k^4 + \frac{g\rho_{eq}}{M} k^2 + \frac{\rho_{eq}}{M} k^2 \left[\int U(R) \exp \left[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} \right] d^3 R \right]. \quad (4.23)$$

Nas seções seguintes iremos definir diferentes potenciais de interação de longo alcance. Mas antes, vamos analisar o caso particular onde $U(\mathbf{R}) = 0$. Assim, da equação (4.23), obtemos:

$$\omega^2 = \frac{\hbar^2}{4M^2} k^4 + \frac{g\rho_{eq}}{M} k^2 \quad (4.24)$$

Observamos uma dependência da frequência de oscilação com seu comprimento de onda $\omega = \omega(k)$. Podemos determinar, uma vez conhecida a frequência, a energia de excitação do condensado

$$\epsilon(k) = \hbar\omega(k). \quad (4.25)$$

Ficamos com:

$$\epsilon(k) = \sqrt{\frac{\hbar^4 k^4}{4M^2} + \frac{g\rho_{eq}\hbar^2 k^2}{M}}. \quad (4.26)$$

Sabendo que a energia de uma partícula livre é

$$\epsilon^0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad (4.27)$$

a equação (4.26) fica:

$$\epsilon(k) = \sqrt{\epsilon^0(k)^2 + 2g\rho_{eq}\epsilon^0(k)} \quad (4.28)$$

Este espectro foi primeiro derivado por Bogoliubov da teoria microscópica para o condensado [33].

A equação (4.28) pode ser expressa em termos adimensionais da seguinte forma:

$$\frac{\epsilon(k)}{g\rho_{eq}} = \frac{\hbar k}{sM} \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar k}{2sM}\right)^2}, \quad (4.29)$$

onde $s = \sqrt{(g\rho_{eq})/M}$ é conhecida como a velocidade do som no condensado.

Podemos obter o comportamento da equação (4.29) para dois regimes. Para $\hbar k/sM \ll 1$, ficamos com:

$$\frac{\epsilon(k)}{g\rho_{eq}} \simeq s\hbar k, \quad (4.30)$$

e para $\hbar k/sM \gg 1$, a equação (4.29) pode ser aproximada por:

$$\frac{\epsilon(k)}{g\rho_{eq}} \simeq \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar k}{sM}\right)^2 \quad (4.31)$$

Gráficos da equação (4.29) são apresentados a seguir na [Figura 6](#). De forma complementar à análise acima, foi gerada [Figura 7](#) contendo alguns gráficos do espectro de excitação da equação (4.26) para um gás homogêneo no estado condensado formado por átomos de hidrogênio, $M = 1,83 \times 10^{-27}$ Kg com densidade de equilíbrio $\rho_{eq} = 10^{16}$ átomos/m³.

Figura 6 – Figura referente à equação (4.29). No eixo da ordenada é exibida a variável adimensional $\hbar\omega/g\rho_{eq}$ e no eixo da abscissa a variável adimensional $\hbar k/sM$. O gráfico (a) representa $\hbar k/sM \ll 1$. Já o gráfico (b) foi feito com $\hbar k/sM \gg 1$.

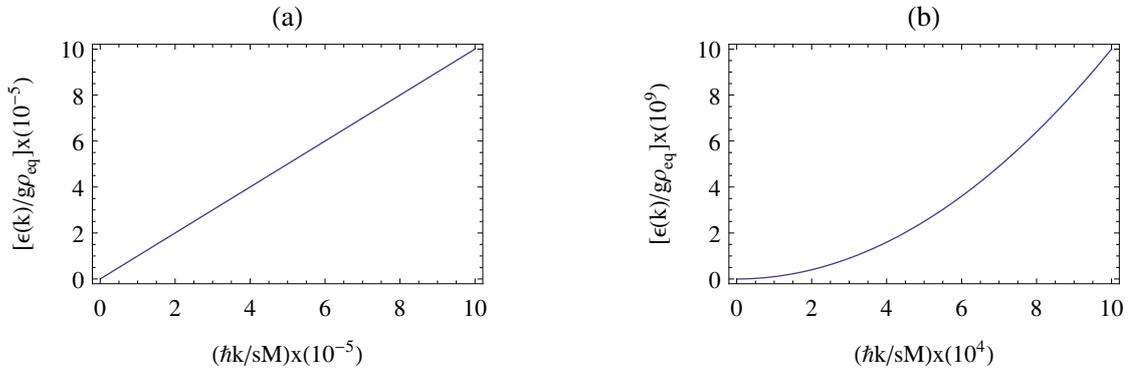
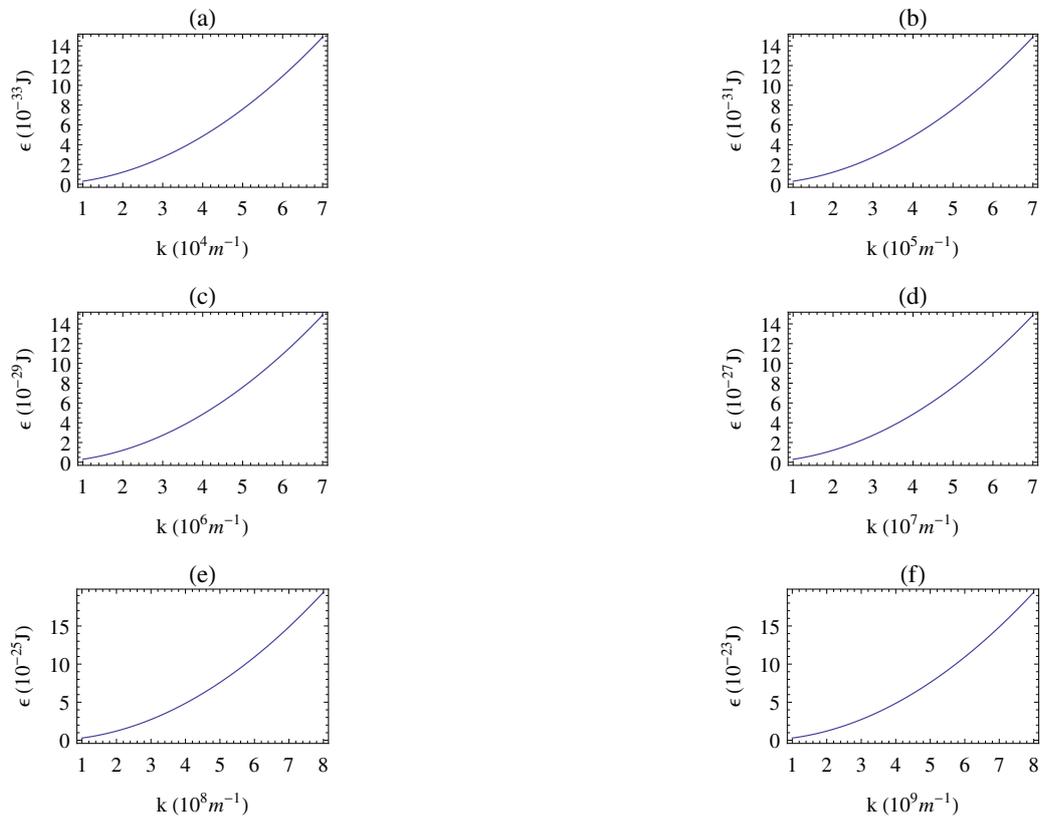


Figura 7 – Figura referente à equação (4.26) onde é relacionado a energia de excitação $\epsilon(k)$ do condensado formado por átomos de hidrogênio ($M = 1,83 \times 10^{-27}$ kg) em função do número de onda k . Foi adotado uma densidade de equilíbrio $\rho_{eq} = 10^{16}$ átomos/m³. Para cada gráfico foram sondados diferentes intervalos de número de onda k .



4.2.3 Densidade de equilíbrio não-uniforme

Nesta seção consideraremos o caso em que o condensado tem sua densidade de equilíbrio não uniforme espacialmente. Para que o sistema entre em equilíbrio, sob ação de um potencial externo, este potencial não pode ser função do tempo.

De acordo com a [subseção 4.2.1](#), após o processo de linearização, obtemos duas equações para a densidade. Uma equação de ordem zero, a equação (4.17), e uma equação linearizada, a equação (4.20). Nas seções seguintes estudaremos com detalhe novamente a equação linearizada, equação (4.20), para diferentes potenciais de interação de longo alcance $U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$.

4.2.3.1 Equação de Gross-Pitaevskii

O conteúdo contido nesta seção foi extraído principalmente de [6]. Nesta abordagem, não consideramos as interações de longo alcance. Com isso, novamente retomamos a equação (4.20) e consideramos a aproximação de Thomas-Fermi que significa desprezar o termo de pressão quântica $\hbar^2 \nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}, t) / \rho_{eq}(\mathbf{r})$. Assim, obtemos

$$M \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho(\mathbf{r}, t) = g \nabla \cdot \left(\rho_{eq}(\mathbf{r}) \nabla \delta\rho(\mathbf{r}, t) \right). \quad (4.32)$$

Supondo que a perturbação na densidade oscile no tempo conforme $\delta\rho(\mathbf{r}, t) \propto \exp(-i\omega t)$, vide [6], a equação (4.32) resulta em:

$$-M\omega^2 \delta\rho(\mathbf{r}) = g \left(\nabla \rho_{eq}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \delta\rho(\mathbf{r}) + \rho_{eq}(\mathbf{r}) \nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}) \right). \quad (4.33)$$

Utilizando a expressão (3.32) para a densidade de equilíbrio local do condensado, a equação (4.33) torna-se:

$$-M\omega^2 \delta\rho(\mathbf{r}) = -\nabla V_{ext}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \delta\rho(\mathbf{r}) + \left(\mu - V_{ext}(\mathbf{r}) \right) \nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}) \quad (4.34)$$

4.2.3.1.1 Potencial externo esfericamente simétrico

Nesta seção consideraremos que o potencial externo tenha simetria esférica, os cálculos foram desenvolvidos com base em [6]. Tal potencial tem a seguinte forma:

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} M \omega_0^2 r^2. \quad (4.35)$$

Fazendo uso das equações (3.33) e (4.35), podemos escrever (4.34) como:

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2} \delta\rho(r, \theta, \phi) = r \frac{\partial}{\partial r} \delta\rho(r, \theta, \phi) + \frac{1}{2} \left(r^2 - r_{TF}^2 \right) \nabla^2 \delta\rho(r, \theta, \phi). \quad (4.36)$$

Devido à simetria esférica, a solução para a perturbação na densidade $\delta\rho(r, \theta, \phi)$ na equação (4.36) é:

$$\delta\rho(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.37)$$

onde $Y_{lm}(\theta, \phi)$ é um esférico harmônico.

Uma solução simples para a equação (4.36) é [6]

$$\delta\rho(r, \theta, \phi) = Cr^l Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (4.38)$$

onde C é uma constante arbitrária e l um número inteiro maior ou igual a zero. Substituindo a equação (4.38) em (4.36) obtemos a seguinte relação:

$$\omega^2 = l\omega_0^2. \quad (4.39)$$

A solução mais geral é encontrada substituindo a equação (4.37) em (4.36) e fazendo a mudança de variável $G(r) = R(r)/r^l$

$$\epsilon G(r) = lG(r) + r \frac{dG(r)}{dr} - \frac{1}{2} \left(r_{TF}^2 - r^2 \right) \left[\frac{d^2 G(r)}{dr^2} + \frac{2(l+1)}{r} \frac{dG(r)}{dr} \right], \quad (4.40)$$

com $\epsilon = \omega^2/\omega_0^2$. Com o objetivo de fazer mais uma simplificação na equação (4.40), faz-se a mudança de variável $u = r^2/r_{TF}^2$:

$$u(1-u) \frac{d^2 G(u)}{du^2} + \left(\frac{2l+3}{2} - \frac{2l+5}{2} u \right) \frac{dG(u)}{du} + \frac{(\epsilon-l)}{2} G(u) = 0. \quad (4.41)$$

A equação (4.41) tem o formato de uma equação hipergeométrica

$$u(1-u) \frac{d^2 G(u)}{du^2} + \left[\gamma - (\alpha + \beta + 1)u \right] \frac{dG(u)}{du} - \alpha\beta G(u) = 0. \quad (4.42)$$

Para $G(u)$ ser bem comportada, α ou β devem ser um inteiro negativo $-n$. Como a função hipergeométrica é simétrica com a troca entre α e β , escolhemos $\alpha = -n$. Com isso, obtemos $\beta = l + n + 3/2$, $\gamma = l + 3/2$. Portanto, obtemos a seguinte relação de dispersão:

$$\omega^2 = \omega_0^2 (l + 3n + 2nl + 2n^2), \quad (4.43)$$

onde n especifica o número de nodos radiais.

4.2.3.2 Equação de Gross-Pitaevskii não-local

4.2.3.2.1 Potencial de interação variando com o inverso da distância

Os cálculos desta seção foram extraídos de [23]. Conforme equação linearizada (4.20), para prosseguirmos na sua análise, devemos especificar o potencial de interação, $U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. Nossa primeira abordagem será o potencial de interação variando com o inverso da distância [23],

$$U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = -\frac{C}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (4.44)$$

onde C é uma constante positiva. Observa-se que este potencial modela uma interação de longo alcance atrativa partícula-partícula.

Neste momento vamos usar a aproximação de Thomas-Fermi, que consiste em desprezar o termo $\hbar^2 \nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}, t)/4M\rho_{eq}(\mathbf{r})$, uma vez que consideramos ondas lentamente variáveis no espaço. Assim da equação (4.20):

$$\begin{aligned} M \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho(\mathbf{r}, t) &= [\nabla \rho_{eq}(\mathbf{r})] \cdot \nabla \left[g\delta\rho(\mathbf{r}, t) - C \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \\ &+ \rho_{eq}(\mathbf{r}) \nabla^2 \left[g\delta\rho(\mathbf{r}, t) - C \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right]. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Agora observamos o fato de que os operadores ∇ e ∇^2 são aplicados na coordenada \mathbf{r} . Assim podemos usar a propriedade que corresponde à equação (?). Com isto, a equação (4.45) resulta:

$$\begin{aligned} M \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho(\mathbf{r}, t) &= [\nabla \rho_{eq}(\mathbf{r})] \cdot \left[g\nabla \delta\rho(\mathbf{r}, t) - C\nabla \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \\ &+ \rho_{eq}(\mathbf{r}) \left[g\nabla^2 \delta\rho(\mathbf{r}, t) + 4\pi C \delta\rho(\mathbf{r}, t) \right]. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Vamos desenvolver o termo contendo $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ na equação (4.46). Para isso, expandimos a função $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ em harmônicos esféricos, $Y_{lm}(\theta, \phi)$, utilizando a seguinte equação [34]:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta', \phi') Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.47)$$

onde, fixado r' , $r_{<}$ é o módulo de r quando este é menor que r' e $r_{>}$ é o módulo de r quando este é maior que r' . Os ângulos θ e ϕ correspondem à \mathbf{r} em coordenadas esféricas e θ' e ϕ' à \mathbf{r}' . Utilizando a função degrau, podemos reescrever a equação (4.47) como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{2l+1} \frac{r^l}{r^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta', \phi') Y_{lm}(\theta, \phi) \Theta(r - r') \\ &+ 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{1}{2l+1} \frac{r^l}{r^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta', \phi') Y_{lm}(\theta, \phi) \Theta(r' - r) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Para o caso em que

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = f(r, \theta, \phi) \exp[-i\omega t] \quad (4.49)$$

e $f(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$, a integral da equação (4.46), já utilizando a equação (4.48), fica:

$$\begin{aligned} C\nabla \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' &= C\nabla \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{4\pi}{2l'+1} Y_{l'm'}(\theta, \phi) \\ &\times \left[\int \frac{r'^{l'}}{r^{l'+1}} \Theta(r - r') R(r') dr' \int Y_{l'm'}^*(\theta', \phi') Y_{lm}(\theta', \phi') \text{sen}\theta' d\theta' d\phi' \right. \\ &\left. + \int \frac{r'^{l'}}{r^{l'+1}} \Theta(r' - r) R(r') dr' \int Y_{l'm'}^*(\theta', \phi') Y_{lm}(\theta', \phi') \text{sen}\theta' d\theta' d\phi' \right]. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Utilizamos a relação de ortogonalidade para harmônicos esféricos,

$$\int Y_{l'm'}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (4.51)$$

para resolver a integral angular em (4.50):

$$\begin{aligned} C \nabla \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' &= C \frac{4\pi}{2l+1} \nabla \left[Y_{lm}(\theta, \phi) \left(\int_0^r \frac{r'^{l+2}}{r'^{l+1}} f(r') dr' \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \int_r^\infty \frac{r'^l}{r'^{l-1}} f(r') dr' \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Com a finalidade de prosseguirmos no desenvolvimento da equação (4.46), usamos a relação para $\delta\rho(\mathbf{x}, t)$ representada pela equação (4.49) já com a expansão $f(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ e aplicamos o laplaciano e o gradiente em coordenadas esféricas

$$\nabla^2 f(r, \theta, \phi) = \nabla_r^2 f(r, \theta, \phi) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \phi}^2 f(r, \theta, \phi), \quad (4.53)$$

$$\nabla f(r, \theta, \phi) = \frac{\partial}{\partial r} f(r, \theta, \phi) \hat{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} f(r, \theta, \phi) \hat{e}_\theta + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} f(r, \theta, \phi) \hat{e}_\phi. \quad (4.54)$$

Temos as seguintes relações para o laplaciano:

$$\nabla_r^2 f(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} f(r, \theta, \phi) \right), \quad (4.55)$$

$$\nabla_{\theta, \phi}^2 f(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} f(r, \theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} f(r, \theta, \phi), \quad (4.56)$$

e

$$\nabla_{\theta, \phi}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (4.57)$$

Finalmente, aplicando os resultados (4.52), (4.53), (4.54), (4.55), (4.57) e o fato de que $\rho_{eq}(\mathbf{r}) = \rho_{eq}(r)$ na equação (4.46), chegamos à seguinte equação íntegro-diferencial para r :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{\partial R(r)}{\partial r} \left[\frac{2}{r} + \frac{1}{\rho_{eq}(r)} \frac{\partial \rho_{eq}(r)}{\partial r} \right] + R(r) \left[\frac{M\omega^2}{g\rho_{eq}(r)} + \frac{4\pi C}{g} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \\ &+ \frac{4\pi C}{(2l+1)g\rho_{eq}(r)} \frac{\partial \rho_{eq}(r)}{\partial r} \left[\frac{l+1}{r^{l+2}} \int_0^r r'^{l+2} R(r') dr' - l r^{l-1} \int_r^\infty \frac{1}{r'^{l-1}} R(r') dr' \right] \end{aligned} \quad (4.58)$$

Com o propósito de seguirmos com o tratamento analítico, estudaremos nesta seção o caso particular em que $r \ll r_{TF}$ e $kr \ll 1$. A equação (3.77) pode ser expandida em r com a condição $kr \ll 1$ até ordem linear

$$\rho_{eq}(r) = \frac{A \operatorname{sen}(kr)}{r} \Theta(r_{TF} - r) \approx Ak. \quad (4.59)$$

Já o termo

$$\frac{1}{\rho_{eq}(r)} \frac{\partial \rho_{eq}(r)}{\partial r} \approx -\frac{k^2 r}{3} \quad (4.60)$$

Também é feita as expansões das integrais, que ficam

$$\begin{aligned} T_n \left[\int_0^r r'^{l+2} R(r') dr' \right] &= \int_0^r T_{n+1} [r'^{l+2} R(r')] dr' \\ &= \int_0^r r'^{l+2} \left[R(0) + r' R'(0) + \frac{r'^2 R''(0)}{2!} + \dots \right] dr' \\ &= \frac{R(0)r^{l+3}}{l+3} + \frac{R'(0)r^{l+4}}{l+4} + \frac{R''(0)r^{l+5}}{l+5} + \dots, \end{aligned} \quad (4.61)$$

e

$$\frac{1}{r^{l+1}} T_n \left[\int_0^r r'^{l+2} R(r') dr' \right] = \frac{R(0)r^2}{l+3} + \frac{R'(0)r^3}{l+4} + \frac{R''(0)r^4}{2!(l+5)} + \dots, \quad (4.62)$$

onde $T_n[f(x)]$ [35] representa a expansão de Taylor até ordem n da função $f(x)$. Se supormos $R(0) \gg R'(0)r \gg R''(0)r^2 \dots$, então

$$\frac{1}{r^{l+1}} T_n \left[\int_0^r r'^{l+2} R(r') dr' \right] \simeq \frac{R(0)r^2}{l+3}. \quad (4.63)$$

Já a expansão da outra integral fica sendo

$$\begin{aligned} T_n \left[\int_r^{r_{TF}} \frac{R(r')}{r'^{l-1}} dr' \right] &= \frac{R(0)}{-l+2} \left[r_{TF}^{-l+2} - r^{-l+2} \right] \\ &+ \frac{R'(0)}{-l+3} \left[r_{TF}^{-l+3} - r^{-l+3} \right] \\ &+ \frac{R''(0)}{2!(-l+4)} \left[r_{TF}^{-l+4} - r^{-l+4} \right] + \dots \end{aligned} \quad (4.64)$$

e

$$\begin{aligned} r^l T_n \left[\int_r^{r_{TF}} \frac{R(r')}{r'^{l-1}} dr' \right] &= \frac{R(0)}{-l+2} \left[r_{TF}^2 - r^2 \right] \\ &+ \frac{R'(0)}{-l+3} \left[r_{TF}^3 - r^3 \right] + \frac{R''(0)}{2!(-l+4)} \left[r_{TF}^4 - r^4 \right] + \dots \end{aligned} \quad (4.65)$$

Como consideramos $r_{TF} \gg r$, a equação acima fica sendo

$$\begin{aligned} r^l T_n \left[\int_r^{r_{TF}} \frac{R(r')}{r'^{l-1}} dr' \right] &\simeq \frac{R(0)r_{TF}^2}{-l+2} + \frac{R'(0)r_{TF}^3}{-l+3} \\ &+ \frac{R''(0)r_{TF}^4}{2!(-l+4)} + \dots \end{aligned} \quad (4.66)$$

Substituindo todos essas aproximações na equação (4.58), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + R(r) \left[\frac{M\omega^2}{gAk} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \\ - \frac{4\pi Ck^2}{3g(2l+1)} \left[\frac{(l+1)R(0)r^2}{l+3} - \frac{lR(0)r_{TF}^2}{-l+2} \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.67)$$

Como supomos $r_{TF} \gg r$, a equação acima simplifica-se ainda mais

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + R(r) \left[\frac{M\omega^2}{gAk} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \\ + \frac{4\pi ClR(0)}{3g(2l+1)(-l+2)} (kr_{TF})^2 = 0. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Se fizermos uma última suposição $kr_{TF} \ll 1$ e a constante C não sendo muito maior que a constante g , obtemos

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + R(r) \left[\frac{M\omega^2}{gAk} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] = 0, \quad (4.69)$$

onde usamos o fato que $C = k^2g/4\pi$.

A equação (4.69) é uma equação diferencial que tem o seguinte formato

$$R''(r) + \frac{1-2\alpha}{r} R'(r) + \left(\beta^2 + \frac{\alpha^2 - \nu^2}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (4.70)$$

cuja solução é:

$$R(r) = c_1 r^\alpha J_\nu(\beta r) + c_2 r^\alpha Y_\nu(\beta r), \quad (4.71)$$

onde $c_1, c_2, \alpha, \beta, \nu$ são constantes e $J_\nu(\beta r), Y_\nu(\beta r)$ são funções de Bessel de primeiro e segundo tipo, respectivamente.

Comparando as equações (4.69) e (4.70), obtemos os seguintes valores para α, β e ν :

$$\alpha = -\frac{1}{2}, \quad (4.72)$$

$$\beta = \sqrt{\frac{Agk^3 + M\omega^2}{Agk}} \quad (4.73)$$

e

$$\nu = \frac{1}{2}(2l+1). \quad (4.74)$$

Portanto, a solução da equação (4.69) é:

$$R(r) = \frac{c_1}{\sqrt{r}} J_{\frac{1}{2}(2l+1)} \left(r \sqrt{\frac{Agk^3 + M\omega^2}{Agk}} \right) + \frac{c_2}{\sqrt{r}} Y_{\frac{1}{2}(2l+1)} \left(r \sqrt{\frac{Agk^3 + M\omega^2}{Agk}} \right), \quad (4.75)$$

onde $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Para o modo monopolo, $l = 0$, obtemos:

$$R(r) = \frac{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[c_1 \operatorname{sen} \left(r \sqrt{k^2 + \frac{M\omega^2}{Akg}} \right) - c_2 \cos \left(r \sqrt{k^2 + \frac{M\omega^2}{Akg}} \right) \right]}{r \left(k^2 + \frac{M\omega^2}{Akg} \right)^{1/4}}, \quad (4.76)$$

uma vez que

$$J_{\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \operatorname{sen}(x), \quad (4.77)$$

$$J_{-\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos(x) \quad (4.78)$$

e

$$Y_{n+\frac{1}{2}}(x) = (-1)^{n-1} J_{-n-\frac{1}{2}}(x). \quad (4.79)$$

Se impormos a condição de que em $r = 0$, $R(0)$ é uma função finita, então $c_2 = 0$. Logo, a equação (4.76) fica:

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} c_1 \frac{\operatorname{sen} \left(r \sqrt{k^2 + \frac{M\omega^2}{Akg}} \right)}{r \left(k^2 + \frac{M\omega^2}{Akg} \right)^{\frac{1}{4}}}. \quad (4.80)$$

Podemos obter informação sobre as excitações do condensado ω , lembrado que $R(r_{TF}) = 0$, com isso:

$$\omega^2 = \frac{Agk}{M} \left[\left(\frac{n\pi}{r_{TF}} \right)^2 - k^2 \right], \quad (4.81)$$

onde $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ e as constantes A e r_{TF} são dadas pelas fórmulas (3.66) e (3.68), respectivamente.

4.2.3.2.2 Potencial de interação gaussiano

Como vimos na subseção 3.3.2, o potencial de interação gaussiano atrativo é definido como:

$$U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = -|V_0| \exp \left[-\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \right]. \quad (4.82)$$

Substituindo esse potencial na equação (4.23), e usando a aproximação de Thomas-Fermi obtemos:

$$\begin{aligned} M \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho(\mathbf{r}, t) &= [\nabla \rho_{eq}(\mathbf{r})] \cdot \nabla \left(g \delta\rho(\mathbf{r}, t) - V_0 \int \exp \left[-\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \right] \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right) \\ &+ \rho_{eq}(\mathbf{r}) \nabla^2 \left(g \delta\rho(\mathbf{r}, t) - V_0 \int \exp \left[-\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \right] \delta\rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right). \end{aligned} \quad (4.83)$$

Fazendo as seguintes suposições $\delta\rho(\mathbf{r}, t) = R(r)Y_{l,m}(\theta, \phi) \exp[-i\omega t]$ e $\rho_{eq}(\mathbf{r}) = \rho_{eq}(r)$, a equação acima fica sendo:

$$\begin{aligned} M\omega^2 R(r)Y_{l,m}(\theta, \phi) &= [\nabla\rho_{eq}(r)] \cdot \nabla \left(gR(r)Y_{l,m}(\theta, \phi) \right. \\ &+ V_0 \int_{r'=0}^{\infty} \int_{\theta'=0}^{\pi} \int_{\phi'=0}^{2\pi} \exp[-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2] R(r')Y_{l,m}(\theta', \phi') r'^2 dr' d\sigma' \\ &- \rho_{eq}(r) \nabla^2 \left(gR(r)Y_{l,m}(\theta, \phi) \right. \\ &\left. + V_0 \int_{r'=0}^{\infty} \int_{\theta'=0}^{\pi} \int_{\phi'=0}^{2\pi} \exp[-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2] R(r')Y_{l,m}(\theta', \phi') r'^2 dr' d\sigma' \right), \end{aligned} \quad (4.84)$$

onde $d\sigma' = \sin\theta' d\theta' d\phi'$.

Agora vamos considerar o caso em que temos $r \ll r_{TF}$. Também consideraremos o regime $\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 \ll 1$. Neste caso, podemos fazer a seguinte expansão até ordem quadrática:

$$\exp[-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2] = 1 - \alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2. \quad (4.85)$$

Sabemos que

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 = r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\gamma, \quad (4.86)$$

onde γ é o ângulo entre \mathbf{r} e \mathbf{r}' , e usando os polinômios de Legendre, $P_l(\cos\gamma)$, a equação (4.85) pode ser expressa como:

$$\exp[-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2] = [1 - \alpha(r^2 + r'^2)] P_0(\cos\gamma) - 2\alpha rr' P_1(\cos\gamma). \quad (4.87)$$

A integral da equação (4.84) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} &\int_{r'=0}^{\infty} \int_{\theta'=0}^{\pi} \int_{\phi'=0}^{2\pi} \exp[-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2] R(r')Y_{l,m}(\theta', \phi') r'^2 dr' d\sigma' = \\ &\int_{r'=0}^{\infty} \int_{\theta'=0}^{\pi} \int_{\phi'=0}^{2\pi} [1 - \alpha(r^2 + r'^2)] P_0(\cos\gamma) R(r')Y_{l,m}(\theta', \phi') r'^2 dr' d\sigma' \\ &- 2\alpha r \int_{r'=0}^{\infty} \int_{\theta'=0}^{\pi} \int_{\phi'=0}^{2\pi} P_1(\cos\gamma) R(r')Y_{l,m}(\theta', \phi') r'^3 dr' d\sigma'. \end{aligned} \quad (4.88)$$

Combinando as duas seguintes propriedades,

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{m=l} Y_{l,m}^*(\theta', \phi') Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (4.89)$$

e

$$\int_{\theta'=0}^{\pi} \int_{\phi'=0}^{2\pi} Y_{l',m'}^*(\theta, \phi) Y_{l,m}(\theta, \phi) d\sigma' = \delta_{l'l} \delta_{m'm}, \quad (4.90)$$

a equação (4.88) resulta em:

$$\begin{aligned}
 & \int_{r'=0}^{\infty} \int_{\theta'=0}^{\pi} \int_{\phi'=0}^{2\pi} \exp\left[-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2\right] R(r') Y_{l,m}(\theta', \phi') r'^2 dr' d\sigma' = \\
 & 4\pi \delta_{0,l} \delta_{0,m} Y_{0,0}(\theta, \phi) \int_{r'=0}^{\infty} r'^2 [1 - \alpha(r^2 + r'^2)] R(r') dr' \\
 & - \frac{8\pi\alpha r}{3} \left[\delta_{1,l} \delta_{1,m} Y_{1,1}(\theta, \phi) + \delta_{1,l} \delta_{0,m} Y_{1,0}(\theta, \phi) \right. \\
 & \left. + \delta_{1,l} \delta_{-1,m} Y_{1,-1}(\theta, \phi) \right] \int_{r'=0}^{\infty} r'^3 R(r') dr'. \quad (4.91)
 \end{aligned}$$

Utilizando a equação (4.91) e a equação (3.86) para o caso $r \ll r_{TF}$, a equação (4.84) fica sendo:

$$\begin{aligned}
 Y_{l,m}(\theta, \phi) \left[\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left(\frac{2\omega^2}{r_{TF}^2 \omega_0^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) \right] \\
 + 24\pi\alpha |V_0| \delta_{0,l} \delta_{0,m} Y_{0,0}(\theta, \phi) \int_0^{\infty} r'^2 R(r') dr' = 0. \quad (4.92)
 \end{aligned}$$

Para o caso $l = 0$, a equação (4.92) resulta em

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \frac{2\omega^2}{r_{TF}^2 \omega_0^2} R(r) + 24\pi\alpha |V_0| \int_0^{\infty} r'^2 R(r') dr' = 0. \quad (4.93)$$

Derivando em relação a r a equação (4.93), obtemos

$$\frac{\partial^3 R(r)}{\partial r^3} + \frac{2}{r} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \left(\frac{2\omega^2}{r_{TF}^2 \omega_0^2} - \frac{2}{r^2} \right) \frac{\partial R(r)}{\partial r} = 0. \quad (4.94)$$

Obtemos como solução

$$R(r) = c_1 - \frac{c_2 \text{sen}(\sqrt{Ar})}{Ar} + \frac{c_3 \text{cos}(\sqrt{Ar})}{Ar}, \quad (4.95)$$

onde definimos $A = 2\omega^2/r_{TF}^2 \omega_0^2$. Usando a condição de que $R(0)$ é finita, fazemos $c_3 = 0$. Assim, escrevemos a equação (4.95) como sendo

$$R(r) = c_1 - \frac{c_2 \text{sen}(\sqrt{Ar})}{Ar}. \quad (4.96)$$

Sabemos que $R(r_{TF}) = 0$, portanto a equação (4.96) resulta em

$$R(r) = \frac{c_1}{A} \left(\frac{\text{sen}(\sqrt{Ar_{TF}})}{r_{TF}} - \frac{\text{sen}(\sqrt{Ar})}{r} \right) \quad (4.97)$$

Já para o caso $l \geq 1$, a equação (4.92) pode ser escrita como

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left(\frac{2\omega^2}{r_{TF}^2 \omega_0^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0, \quad (4.98)$$

que tem como solução

$$R(r) = c_1 j_l\left(\frac{\sqrt{2}\omega}{r_{TF}\omega_0}r\right) + c_2 y_l\left(\frac{\sqrt{2}\omega}{r_{TF}\omega_0}r\right), \quad (4.99)$$

onde c_1 e c_2 são constantes, j_l e y_l são as funções de Bessel esféricas de primeiro e segundo tipo, respectivamente e $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Observa-se que para $r \rightarrow 0$, $y_l\left(\frac{\sqrt{2}\omega}{r_{TF}\omega_0}r\right) \rightarrow -\infty$ para $l \geq 1$, portanto escolhemos $c_2 = 0$. Assim, a equação (4.99) resulta em

$$R(r) = c_1 j_l\left(\frac{\sqrt{2}\omega}{r_{TF}\omega_0}r\right). \quad (4.100)$$

A função esférica de Bessel de primeiro tipo $j_l(x)$ pode ser expressa em funções trigonométricas através da fórmula de Rayleigh [36]:

$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^l \left(\frac{\sin(x)}{x}\right) \quad (4.101)$$

Usando a condição de contorno $R(r = r_{TF}) = 0$ podemos obter uma expressão para a frequência de excitação das ondas no condensado ω para um determinado valor de l a partir de (4.100). No caso em que $l = 1$, com o auxílio da equação (4.101) obtemos a seguinte equação para ω :

$$\omega - \frac{\sqrt{2}}{2}\omega_0 \tan\left(\frac{\sqrt{2}\omega}{\omega_0}\right) = 0. \quad (4.102)$$

Verifica-se, após as diversas aproximações consideradas, que as excitações do sistema representadas pela equação (4.102) dependem somente da frequência da armadilha ω_0 e podem ser facilmente obtidas com métodos numéricos ou com certa aproximação através da inspeção gráfica e sua equação.

5 Conclusão

Este trabalho teve como objetivo a aplicação da formulação hidrodinâmica para a equação de Gross-Pitaevskii não-linear e não-local, a qual rege a dinâmica dos condensados de Bose-Einstein. O sistema em estudo foi considerado sob a influência de um potencial externo (do tipo oscilador harmônico com simetria esférica, o qual é largamente usado em experimentos além de ter um fator simplificante nos cálculos) e as partículas sendo interagentes com interações locais (através do potencial delta) e de longo alcance (através dos potenciais inverso da distância e gaussiano).

No estudo do sistema no regime estacionário ou de equilíbrio, foram obtidos perfis analíticos aproximativos da densidade do condensado para os três tipos de interações com e sem o potencial externo .

Com o método hidrodinâmico foi possível obter uma equação para a dinâmica da densidade do condensado. A partir desta equação foram estudadas ondas lineares no sistema em questão. Foram obtidos espectros de excitação para as diferentes interações interpartículas quando supomos a densidade de equilíbrio ser constante. Para densidade de equilíbrio variável foram obtidas soluções analítico aproximativas para a dinâmica da densidade do condensado, além de espectros de excitação para os casos do sistema com interação delta somente e o caso de interação binária entre as partículas formada pelos potenciais de interação delta mais inverso da distância e delta mais gaussiano.

Conclui-se que o método hidrodinâmico, dentro das teorias macroscópicas utilizadas em condensados, é uma valiosa ferramenta para o estudo das grandezas observáveis em condensados uma vez que ele naturalmente introduz grandezas como densidade e velocidade, possibilitando uma série de estudos para estas grandezas, como por exemplo excitações elementares além de possibilitar também a análise dinâmica das mesmas. A inclusão de interações de longo alcance transformam as equações resultantes para densidade e velocidade em equações integro-diferenciais, o que dificulta a obtenção de suas soluções analíticas, se as mesmas existirem. Porém, isto proporciona um campo vasto de estudos para estes sistemas na medida que equações integro-diferenciais são largamente estudadas na Matemática.

Para trabalhos futuros seria interessante procurar resultados analíticos exatos para estas equações integro-diferenciais assim como resultados numéricos das mesmas, se os mesmos existirem.

Referências

- [1] EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases II. *Sitz. Ber. Preuss. Akad. Wissensch.*, v. 3, 1925.
- [2] BOSE, S. N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Z. Phys.*, v. 26, p. 178, 1924.
- [3] ANDERSON, M. H. et al. Observations of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, v. 269, n. 5221, p. 198, julho 1995.
- [4] DAVIS, K. B. et al. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, n. 75, p. 3969, 1995.
- [5] DALFOVO, F. et al. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.*, v. 71, p. 463, 1999.
- [6] PETHICK, C. J.; SMITH, H. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. 2. ed. Cambridge/New York: Cambridge University Press, 2008.
- [7] PATHRIA, R. K. *Statistical Mechanics*. 2. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1996.
- [8] MENDONÇA, J. T.; TERÇAS, H. *Physics of Ultra-Cold Matter: Atomic Clouds, Bose Einstein Condensates and Rydberg Plasmas*. New York: Springer, 2013.
- [9] GROSS, E. P. Structure of a quantized vortex in boson systems. *il Nuovo Cimento*, v. 20, p. 454, 1961.
- [10] PITAEVSKII, L. P. Vortex lines in an imperfect bose gas. *Sov. Phys. JETP*, v. 13, p. 451, 1961.
- [11] SULEM, C.; SULEM, P. *The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-Focusing and Wave Collapse*. New York: Springer-Verlag, 1999.
- [12] ABLOWITZ, M. J.; SEGUR, H. *Solitons and the Inverse Scattering Transform*. Philadelphia: SIAM, 1981.
- [13] MAUCHER, F. et al. Rydberg-induced solitons: Three-dimensional self-trapping of matter waves. *Phys. Rev. Lett.*, v. 106, n. 170401, p. 1–4, Abril 2011.
- [14] MAUCHER, F.; SKUPIN, S.; KRÓLIKOWSKI, W. Collapse in the nonlocal nonlinear Schrödinger equation. *Nonlinearity*, v. 24, p. 1987, 2011.
- [15] MAUCHER, F. et al. Quasiperiodic oscillations and homoclinic orbits in the nonlinear nonlocal Schrödinger equation. *New J. Phys.*, v. 15, n. 083055, 2013.
- [16] LIN, J.; CHEN, W.; JIA, J. Abundant soliton solutions of general nonlocal nonlinear Schrödinger system with external field. *J. Opt. Soc. Am, A* 31, p. 188–195, Jan 2014.
- [17] HAAS, F. *Quantum Plasmas: an Hydrodynamic Approach*. New York: Springer, 2011.

- [18] MADELUNG, E. Eine anschauliche deutung der gleichung von Schrödinger. *Naturwissenschaften*, v. 14, p. 1004, Novembro 1926.
- [19] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. [S.l.]: Prentice Hall, 1995.
- [20] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. 2. ed. [S.l.]: Edusp - Editora da Universidade de São Paulo, 2008.
- [21] SCHRÖDINGER, E. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *The Physical Review*, v. 28, n. 6, p. 1049–1070, 1926.
- [22] PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. *Bose-Einstein Condensation*. Oxford: Oxford University Press Inc., 2003.
- [23] SCHÜTTE, M. *Bose-Einstein Condensates with Long-Range Interactions*. Tese (Doutorado) — Universidade de Berlim, Fevereiro de 2007.
- [24] GAMMAL, A.; FREDERICO, T.; TOMIO, L. Improved numerical approach for the time-independent Gross-Pitaevskii nonlinear Schrödinger equation. *Physical Review E*, v. 60, n. 2, 1999.
- [25] GAMMAL, A. et al. Stability analysis of the D-dimensional nonlinear Schrödinger equation with trap and two- and three-body interactions. *Physics Letters A*, v. 267, p. 305–311, 2000.
- [26] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Fluid Mechanics*. 2. ed. Oxford: Pergamon, 1987.
- [27] CHILDRESS, S. *An Introduction to Theoretical Fluid Dynamics*. New York: Courant Institute, 2008.
- [28] HAAS, F.; KOURAKIS, I. Nonlinear hydrodynamic Langmuir waves in fully degenerate relativistic plasma. *Plasma Phys. Control. Fusion*, v. 57, n. 044056, 2015.
- [29] MANFREDI, G.; HAAS, F. Self-consistent fluid model for a quantum electron gas. *Phys. Rev. B*, v. 64, n. 075316, 2001.
- [30] MENDONÇA, J. T.; HAAS, F. Neutrino oscillations in a turbulent plasma. *Phys. Plasmas*, v. 20, n. 072107, 2013.
- [31] HAAS, F.; MENDONÇA, J. T. Exact solution to neutrino-plasma two-flavor dynamics. *J. Plasma Phys.*, v. 79, n. 991, 2013.
- [32] MENDONÇA, J. T.; HAAS, F.; BRET, A. Influence of flavor oscillations in neutrino beam instabilities. *Phys. Plasmas*, v. 21, n. 092117, 2014.
- [33] BOGOLIUBOV, N. N. On the theory of superfluidity. *J. Phys.*, v. 11, p. 23–32, 1947.
- [34] JACKSON, J. D. *Classical Electrodynamics*. 3. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1999.
- [35] APOSTOL, T. M. *Calculus: One-variable calculus, with an introduction to linear algebra*. 2. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1961.
- [36] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J.; HARRIS, F. E. *Mathematical Methods for Physicist*. 7. ed. [S.l.]: Elsevier, 2013.