



**UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA
AFRO-BRASILEIRA
INSTITUTO DE EXATAS E DA NATUREZA - ICEN
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

FRANCISCO MATEUS ALVES GUIMARÃES

ABORDAGEM VARIACIONAL ÀS GOTÍCULAS QUÂNTICAS DIPOLARES

ACARAPE

2020

FRANCISCO MATEUS ALVES GUIMARÃES

ABORDAGEM VARIACIONAL ÀS GOTÍCULAS QUÂNTICAS DIPOLARES

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Orientadora: Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena

ACARAPE

2020

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da UNILAB
Catalogação de Publicação na Fonte.

Guimarães, Francisco Mateus Alves.

GU963a

Abordagem Variacional às Gotículas Quânticas Dipolares /
Francisco Mateus Alves Guimarães. - Redenção, 2020.
53f: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto De Ciências Exatas E Da
Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia
Afro-Brasileira, Redenção, 2020.

Orientador: Silvia Helena Roberto de Sena.

1. Condensado de Bose-Einstein. 2. interação dipolo-dipolo. 3.
gotículas quânticas dipolares. 4. flutuações quânticas. 5.
equações de movimento. I. . II. Título.

CE/UF/BSCA

CDD 530.12

FRANCISCO MATEUS ALVES GUIMARÃES

ABORDAGEM VARIACIONAL ÀS GOTÍCULAS QUÂNTICAS DIPOLARES

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Aprovada em: 07 de Janeiro de 2020

BANCA EXAMINADORA

Silvia Helena R. de Sena

Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena (Orientadora)
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

Levi Rodrigues Leite

Prof. Dr. Levi Rodrigues Leite
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

A. W. - F. N. - 1

Aurélio Wildson Teixeira de Noronha
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

Ao meu pai, que com muito carinho e apoio, não mediu esforços para que eu chegasse até esta etapa de minha vida.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de começar deixando claro que a ordem dos agradecimentos não representa a ordem de importância.

Começo deixando exposto a minha enorme gratidão pelo meu pai, por ter prestado suporte em toda a minha formação, por ter se esforçado pra sempre me dar uma educação de qualidade. Meu pai é para mim, o motivo principal de todo meu esforço.

Agradeço ao meu orientador, professor e amigo Dr. Aristeu Lima, por toda paciência e confiança no meu potencial e por ter me tratado como alguém que consegue resolver os desafios. Que abriu minha mente para que sempre priorizasse as pedras maiores para preencher o vaso das coisas importantes da minha vida.

À minha irmã, que sempre esteve comigo, que sempre me deu os melhores conselhos e que sempre torceu por mim.

Gostaria de agradecer a todos os professores que participaram da minha formação, em especial, os professores João Philipe, Silvia Helena, Levi Leite e Cinthia Marques. Vocês tornaram a minha formação mais feliz, interessante e divertida. Guardo com muito carinho todos os momentos que tivemos juntos.

Agradeço também as Professoras Dra. Milene, Dra. Elisângela André e ao professor Dr. Elcimar pelos momentos de aprendizados que tivemos juntos

Aos membros da banca, professores Dra. Silvia Helena, Dr. Levi Leite e Dr. Aurélio Teixeira, por aceitarem o convite de participar da banca examinadora desta monografia

Gostaria de agradecer aos meus amigos José Fernandes, Karla, ao meu amigo Joel, com quem já dividi apartamento, ao Ismael, Roberto e Rogelândio pelos nossos momentos de debates e brincadeiras. Pelos momentos felizes, mas principalmente pelos momentos de sufoco que passamos, pois foram nesses momentos que tomamos conta o quão é importante ter amigos. Pelos momentos de estudos e de aprendizagem.

À Emília, que sem sombra de dúvidas é uma pessoa especial pra mim. Que esteve comigo em todos os momentos, e em todos os momentos teve na ponta da língua as palavras certas a serem ditas. E que em momentos de angústia, a sua presença era sempre o melhor remédio.

Aos colegas do nosso grupo de pesquisa Teoria Quântica de Campo e Matéria Condensada, em especial, ao José Fernandes e Joel Lopes, uns grandes amigos que fiz nesses anos de graduação

Gostaria de agradecer aos meus amigos de infância, Renan, Breno e Bruna, que mesmo sem saber, sempre me deram forças para seguir o meu sonho. Estudar Física!

À Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo apoio financeiro às pesquisas presente nesse trabalho

Enfim, agradeço a todos que de uma forma ou de outra contribuíram para o desenvolvimento desse estudo.

Obrigado a todos!

"Não esconda os seus talentos. Para o uso eles foram feitos. O que é um relógio de sol na sombra?"

(Benjamin Franklin)

RESUMO

Neste trabalho, partimos de uma abordagem variacional para se entender os conceitos básicos requeridos para a aplicação da teoria de Gross-Pitaevskii. Adotamos um *ansatz* gaussiano para a forma da função de onda e fizemos uso desta para chegar a energia de um condensado de Bose-Einstein ideal. Um *ansatz* gaussiano também é utilizado considerando a estrutura de um condensado na presença de interações de contato entre as partículas e fazemos um comparativo com o resultado obtido da solução de Thomas-Fermi. Após o estudo inicial sobre condensado de Bose-Einstein, passamos a levar em consideração os efeitos da interação dipolar entre os bósons que constituem o gás. Assim, calculamos a contribuição da energia devida à interação de dipolo-dipolo no condensado de Bose-Einstein por meio da transformada de Fourier. Feito isso, estudamos a partir de uma abordagem variacional o condensado dipolar, onde novamente fizemos o uso de um *ansatz* gaussiano para a forma da função de onda e um *ansatz* harmônico para a fase da função de onda do condensado. Assim, derivamos as equações de movimento para os parâmetros variacionais do condensado dipolar, partindo do princípio da mínima ação. Logo após, adentramos no contexto das gotículas quânticas dipolares, e calculamos a contribuição da energia fornecida pela presença das flutuações quânticas, mecanismo utilizado para explicar teoricamente a formação desses sistemas autoligados conhecidos como gotículas quânticas. Por fim, obtemos as equações de movimento generalizadas para os parâmetros variacionais relacionado com o comprimento da nuvem, onde agora é levada em conta a física além de campo médio, devido as flutuações quânticas.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein; interação dipolo-dipolo; gotículas quânticas dipolares; flutuações quânticas; equações de movimento.

ABSTRACT

In this work, we start from a variational approach to understand the basic concepts required for the application of Gross-Pitaevskii theory. We adopted a Gaussian ansatz for the wave function profile and made use of it to arrive at result in the energy of an ideal Bose-Einstein condensate. Gaussian ansatz is also used considering the structure of a condensate in the presence of contact interactions between particles and we make a comparison with the result obtained from the Thomas-Fermi solution. Following the initial study on Bose-Einstein condensate, we now consider the effects of the dipolar interaction between the bosons that make up the gas. Thus, we calculate the energy contribution due to the dipole-dipole interaction in the Bose-Einstein condensate through the Fourier transform. Done this, we studied from a variational approach the dipolar condensate, where again we used a gaussian ansatz for the wave function shape and a harmonic ansatz for the phase of the condensate wave function. Thus, we derive the equations of motion for the variational parameters of dipolar condensate, assuming the least action principle. Soon after, we entered the context of the dipolar quantum droplets, and calculated the contribution of the energy provided by the presence of quantum fluctuations, a mechanism used to theoretically explain the formation of these self-bound systems known as quantum droplets. Finally, we obtain the generalized equations of motion for the variational parameters related to cloud length, where physics beyond mean-field is now taken into account due to quantum fluctuations.

Keywords: Bose-Einstein condensate; dipole-dipole interaction; dipolar quantum droplets; quantum fluctuations; equations of motion.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Imagens em cores falsas que exibem a distribuição de velocidades em uma nuvem de átomos de ^{87}Rb . A primeira imagem representa a nuvem pouco antes da condensação. A segunda imagem, o exato momento da condensação, e a última, o momento após a evaporação, onde obtém-se um condensado quase puro. 15
- Figura 2 – Energia por partícula, em unidades de $N\hbar\omega_{\text{osc}}$ para um oscilador harmônico isotrópico como uma função do parâmetro variacional β , para diferentes valores do parâmetro adimensional $\chi = Na_s/a_{\text{osc}}$. A nuvem passa a ser instável no valor crítico de aproximadamente -0.67 26
- Figura 3 – Representação da energia por partícula obtido pelo *ansatz* gaussiano e pela solução de Thomas-Fermi para um potencial harmônico isotrópico em função dos parâmetros adimensionais Na_s/a_{osc} 28
- Figura 4 – Interação dipolo-dipolo. a) Ilustração esquemática da interação dipolo-dipolo entre dois dipolos com momento dipolar μ_m alinhados por um campo magnético externo \mathbf{B} ao longo da direção z . b) O caráter da interação é indicada em forma de cores, onde representa interações atrativas as cores claras brilhantes, enquanto que as interações repulsivas são representadas pelas cores escuras. A força de interação dipolar é dado em unidades de $\mu_0\mu_m^2/4\pi$ 30
- Figura 5 – Função de anisotropia $f(x, y)$ correspondente a equação (3.18). A função está limitada entre os valores 1 para pequenos valores de x ou y e -2 para grandes valores de x e y 33
- Figura 6 – Gráfico da função de anisotropia em simetria cilíndrica $f_s(x)$ como função de x . Em $x = 1$ $f_s(x)$ muda seu sinal, mostrando sua dependência com a geometria do sistema. 34
- Figura 7 – Crescimento de um cristal microscópico de gotículas. a) Representação esquemática do procedimento experimental. Modulação do comprimento de espalhamento a_s , induzindo uma instabilidade próxima de $a_s \approx a_{bg}$. b) Padrões de gotículas fotografadas em *in situ* com o número de gotículas N_d em cada arranjo variando de dois a dez. c) Número médio de átomos N em função do número de gotículas N_d , onde as barras de erros indicam o desvio padrão e a linha tracejada indica a relação linear entre N e N_d 39

Figura 8 – Gráfico da função Q_5 (linha vermelha) e da aproximação da Eq.(4.5) (linha azul). A linha tracejada representa a parte real de $|\text{Re}(Q_5)|$ 41

Figura 9 – Simulação numérica do processo de preparação de uma gotícula autoligada a partir de um condensado de disprósio ^{164}Dy aprisionado em uma armadilha. As linhas pretas delimitam a armadilha harmônica e as cores indicam a densidade do condensado. Em $t = 10$ ms, é observado a formação da gotícula autoligada, em $t = 20$ ms a armadilha é desligada e, posteriormente, é possível observar a gotícula coesa. 42

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|-----------------|-----------------------------------|
| μ | Potencial químico |
| a_s | Comprimento de espalhamento |
| μ_0 | Permeabilidade magnética no vácuo |
| μ_m | Momento de dipolo magnético |
| \mathbf{d} | Momento de dipolo elétrico |
| k_B | Constante de Boltzmann |
| a_{dd} | Comprimento dipolar |
| g_{dd} | Acoplamento dipolar |
| ϵ_{dd} | Força de interação relativa |

SUMÁRIO

| | | |
|-------|--|----|
| 1 | INTRODUÇÃO | 14 |
| 2 | ABORDAGEM VARIACIONAL À CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN | 19 |
| 2.1 | Princípio da mínima ação para a teoria de Gross-Pitaevskii | 19 |
| 2.1.1 | <i>Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo</i> | 19 |
| 2.1.2 | <i>Equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo</i> | 20 |
| 2.2 | Condensados ideais | 22 |
| 2.3 | Condensados com interação de contato | 23 |
| 2.4 | Regime de Thomas-Fermi | 26 |
| 3 | CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN DIPOLAR | 29 |
| 3.1 | Potencial de interação de dipolo-dipolo | 29 |
| 3.2 | Energia dipolar para um ansatz gaussiano | 31 |
| 3.3 | Aplicação do princípio da mínima ação | 34 |
| 4 | GOTÍCULAS QUÂNTICAS DIPOLARES | 38 |
| 4.1 | A descoberta de uma nova fase da matéria | 38 |
| 4.2 | Correção quântica da energia | 39 |
| 4.3 | Princípio da mínima ação | 43 |
| 5 | CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS | 45 |
| | APÊNDICES | 47 |
| | APÊNDICE A – Transformada de Fourier do potencial de dipolo-dipolo . | 47 |
| | REFERÊNCIAS | 49 |

1 INTRODUÇÃO

No ano de 1995, teve início a uma das mais promissoras áreas de pesquisa na Física da atualidade, isso porque nesse ano, foram feitas as primeiras observações experimentais de um novo estado da matéria: condensado de Bose-Einstein (CBE) [1, 2, 3], previsto teoricamente 70 anos antes pelos físicos Satyendra Nath Bose e Albert Einstein.

Em 1924, o físico indiano Bose apresentou uma dedução alternativa à estatística de um gás de fótons [4] e a fórmula do espectro de radiação do corpo negro, deduzida previamente pelo físico alemão Max Planck. Tendo seu trabalho sido recusado para publicação pela *Philosophical Magazine*, Bose buscou a ajuda do físico alemão Albert Einstein para que solicitasse a publicação no periódico *Zeitschrift für Physik*. Einstein, portanto, julgando a importância do trabalho, considera o pedido e efetua algumas considerações finais. O modelo estatístico foi estendido por Einstein de forma a incluir sistemas com o número de partículas conservado [5], associando ondas à matéria, ideia recente de de Broglie, sendo os bósons as partículas que obedecem a essa estatística. O número de ocupação média dessas partículas em um determinado estado i é escrita como,

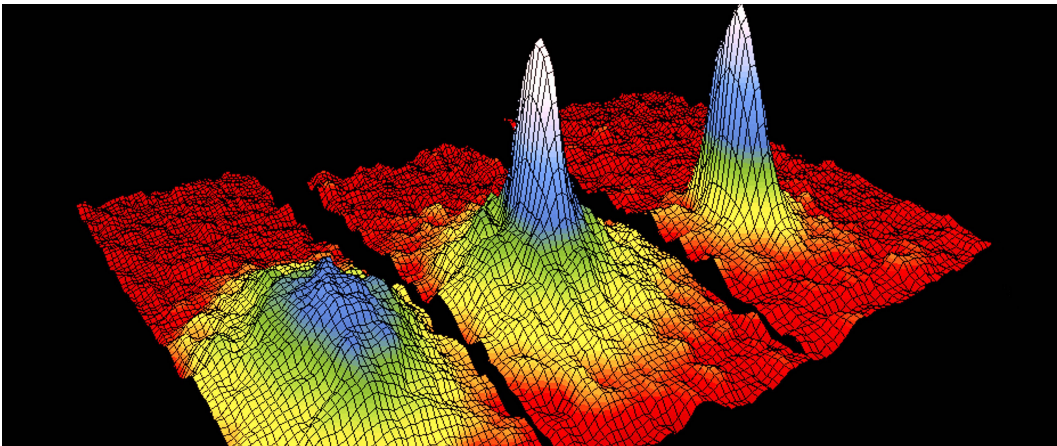
$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}, \quad (1.1)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura, ϵ_i a energia de uma partícula no estado i e μ o potencial químico. Einstein previu que abaixo de uma certa temperatura, o número de ocupação de partículas no estado fundamental do gás aumentaria rapidamente conforme a temperatura tendesse a zero, de modo que em $T = 0$, todas as partículas constituintes do gás se condensariam nesse estado. Na perspectiva da mecânica quântica, esse estado condensado é visto como uma onda de matéria coerente proveniente da superposição das ondas de de Broglie, semelhante ao que ocorre em um laser [6].

Os experimentos iniciais para a obtenção dos primeiros condensados foram realizados pelo grupo do *Joint Institute for Laboratory Astrophysics* (JILA), onde estavam a frente os físicos norte-americanos Eric Allin Cornell e Carl Wieman, com cerca de 2.5×10^{12} átomos/ cm^3 de rubídio ^{87}Rb , aprisionados em uma armadilha magnética e resfriados, por técnicas a laser e evaporativamente, até a casa dos 170 nano Kelvins ($\sim 10^{-9} K$) [1], onde o sistema passou a ter um caráter macroscópico, podendo ser considerado como um "átomo gigante". Alguns meses depois, o grupo do *Massachusetts Institute of Technology* (MIT), liderado pelo físico alemão Wolfgang Ketterle, obteve a condensação de átomos de sódio ^{23}Na , na qual tinha uma densidade

da ordem de 10^{14} átomos/ cm^3 na temperatura de 2×10^{-6} K [3]. A assinatura da condensação foi obtida por meio de uma imagem de absorção gerada após a liberação dos átomos da armadilha. Essa imagem representa o perfil de densidade da nuvem de átomos.

Figura 1 – Imagens em cores falsas que exibem a distribuição de velocidades em uma nuvem de átomos de ^{87}Rb . A primeira imagem representa a nuvem pouco antes da condensação. A segunda imagem, o exato momento da condensação, e a última, o momento após a evaporação, onde obtém-se um condensado quase puro.



Fonte: Retirada de [7]

Na Fig. 1, vemos na distribuição mostrada a esquerda da imagem que acima de uma certa temperatura, a nuvem se torna esférica depois de um tempo suficientemente longo. Isso se deve ao fato da distribuição do momento isotrópico de um gás ser governado pela distribuição clássica de Boltzmann. Abaixo dessa temperatura crítica, é observado uma mudança nas imagens, onde é visto um pico emergir. Na distribuição intermediária da imagem mostrada na Fig. 1, é possível perceber que esse pico é mais estreito que a nuvem térmica, pois ele caracteriza a contribuição dos átomos condensados no estado fundamental do potencial confinador. Uma fração macroscópica dos átomos se condensa, onde esses átomos condensados passam a ser descritos pela função de onda de partícula única. Conforme será visto na seção 2.2, na ausência de interações, essa função de onda é o estado fundamental da armadilha.

Para um gás uniforme de partículas livres, as quantidades relevantes são a massa M da partícula, o número de partículas por unidade de volume n , e a constante de Planck $h = 2\pi\hbar$. Uma estimativa da temperatura de condensação é dada por

$$T_c = C \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{M k_B}, \quad (1.2)$$

onde C é um fator numérico que depende do tipo de armadilha utilizada para o confinamento. Quando avaliamos a Eq.(1.2) em termos da massa e densidade apropriada ao Hélio ^4He à pressão

de vapor saturado, obtemos uma temperatura de transição de aproximadamente $3,13K$, que é próxima a temperatura abaixo da qual os fenômenos da superfluidade são observados, o chamado ponto lambda ($T_\lambda = 2,17K$). Com essa propriedade superflúida, observamos um escoamento em que não há perda de energia por viscosidade. Ainda hoje, esse fenômeno mexe com a curiosidade dos cientistas, muito embora tenhamos evidências da relação desse fenômeno com CBE [8].

Alguns obstáculos são encontrados ao querer relacionar teoria com a prática experimental, um desses obstáculos, no que diz respeito ao fenômeno de condensação, aparece quando as interações entre os átomos exercem um papel não desprezível [9], fazendo com que a distribuição de Bose-Einstein não retrate com exata precisão o que é observado experimentalmente. Para contornar esse problema, conforme temos uma grande parte das partículas encontrando-se no estado fundamental, desprezamos os efeitos da parcela não condensada de partículas, mantendo uma teoria exata da fração condensada. A teoria utilizada para isso sintetiza a chamada equação de Gross-Pitaevskii (eGP), obtida em 1961, por E. P. Gross [10] e L. Pitaevskii [11]. Essa é uma das principais equações no estudo de CBE.

A eGP foi obtida via aproximação de campo médio, e possui uma certa semelhança com a equação de Schrödinger, diferenciando-se por um termo não linear, que aparece devido a interação entre os átomos. Ela é utilizada para o estudo das propriedades estáticas e dinâmicas da função de onda que descreve um CBE. Alguns procedimentos numéricos [12, 13, 14, 15, 16] e métodos analíticos [17] de aproximação são utilizados para a resolução da eGP.

Além dos átomos alcalinos, é possível criar condensados de Bose-Einstein com átomos de grande momento de dipolo magnético. O primeiro condensado constituído de átomos dessa natureza foi realizado com átomos de Cromo ^{52}Cr [18]. Ao passo que os átomos de Rubídio possuem um momento de dipolo magnético de $1\mu_B$, os átomos de Cromo possuem um momento de dipolo magnético de $6\mu_B$. Dessa forma, para os condensados envolvendo átomos de Rubídio, as interações entre os dipolos magnéticos podem ser negligenciadas, ao contrário dos realizados com Cromo, em que essas interações desempenham um papel significativo. O condensado de Cromo possibilitou uma interessante pesquisa sobre os efeitos da interação de longo alcance e anisotrópica. Posteriormente, constatou-se que condensados de Érbio ^{168}Er [19] e disprósio ^{164}Dy [20] mostram caráter dipolar com momentos dipolares ainda maiores de $7\mu_B$ e $10\mu_B$, respectivamente. Este tipo de condensado é geralmente chamado de condensado dipolar [21], e para uma descrição teórica, as interações dipolo-dipolo devem ser levadas em consideração na equação de Gross-Pitaevskii.

Em 2016, foi observado em um CBE dipolar de disprósio ^{164}Dy a formação de um sistema autoligado, que foi então chamada de gotícula quântica dipolar [22, 23], e seu caráter autoligado se deve ao fato desse sistema persistir estável mesmo após o desligamento da armadilha [24, 25]. Uma teoria desenvolvida para explicar a formação dessas gotículas parte do conceito das flutuações quânticas, presente no contexto da teoria além de campo médio, uma vez que a bem consolidada teoria de campo médio previa um colapso da nuvem condensada quando submetida ao regime do experimento [23, 24]. Esse novo estado da matéria é o produto da energia atrativa de campo médio balanceada pela energia repulsiva fornecida pelo efeito da flutuação quântica [23, 25, 26, 27].

Este trabalho

Nesta monografia, apresentamos um estudo fundamentado no estado de menor energia de um condensado, mais precisamente, no **Cap. 2** fazemos um estudo inicial sobre a teoria de Gross-Pitaevskii, onde a partir de um princípio de ação mínima, deduzimos uma das principais equações no estudo de CBEs, a equação de Gross-Pitaevskii. Assim, investigamos a energia do estado fundamental de um CBE a partir de um funcional de energia utilizando um *ansatz*¹ gaussiano para a função de onda do condensado. Ao final fazemos uma breve investigação no regime de Thomas-Fermi e fazemos um comparativo entre a energia obtida via *ansatz* gaussiano e a obtida pela aproximação de Thomas-Fermi.

No **Cap. 3**, passamos a tratar condensados de gases dipolares, em que as interações dipolares passam a ter um papel significativo no condensado e apresentam interessantes efeitos por sua natureza anisotrópica e de longo alcance. Consideramos em nossas investigações, os dipolos orientados ao longo da direção z da armadilha de confinamento e calculamos a energia dipolar para um *ansatz* gaussiano. Logo após, aplicamos o princípio de ação mínima e obtemos as equações de movimento para os comprimentos σ_i do condensado.

Investigamos, no **Cap. 4**, a formação de gotículas quânticas dipolares observadas em um condensado fortemente dipolar de disprósio no ano de 2016 pelo grupo de Tilman Pfau, em Stuttgart, Alemanha. Estudamos a presença das flutuações quânticas, mecanismo que explica o surgimento dessas estruturas autoligadas proveniente da correção de primeira ordem da energia de campo médio. A partir de uma aproximação gaussiana, utilizamos um procedimento variacional para as gotículas quânticas dipolares e obtemos a contribuição da energia devido as

¹ Uma função de teste.

flutuações quânticas. Ao final, fazemos mais uma vez o uso do princípio de ação mínima para calcular as equações de movimento, onde é levada em conta o termo referente as essas flutuações quânticas.

Finalmente, no **Cap. 5**, apresentamos as nossas conclusões deste trabalho e manifestamos nosso interesse em trabalharmos com gotículas quânticas orientadas arbitrariamente. Outra perspectiva de trabalho referente as gotículas quânticas é estudá-las na presença de vórtices quantizados.

2 ABORDAGEM VARIACIONAL À CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN

Nesse capítulo, fazemos o uso do método variacional para o estudo da teoria de Gross-Pitaevskii. Deduzimos a partir do princípio da mínima ação, a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo. Usamos um *ansatz* gaussiano para a forma da nossa função de onda e a utilizamos para chegar a um resultado já bem conhecido na literatura para a energia de um CBE ideal. Após isso, usamos o *ansatz* considerando a estrutura de um estado condensado na presença de interações. Ao final, fazemos um estudo da solução de Thomas-Fermi e comparamos com o resultado obtido por meio do *ansatz* gaussiano.

2.1 Princípio da mínima ação para a teoria de Gross-Pitaevskii

A teoria de Gross-Pitaevskii é uma teoria de campo clássico para o parâmetro de ordem $\Psi(\mathbf{r}, t)$ e, por esse motivo, pode ser derivado a partir de um princípio de ação, utilizando uma lagrangeana adequada para sistemas dependentes do tempo, contendo um termo de fluxo da função de onda.

2.1.1 Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo

A eGP dependente do tempo é utilizada para o estudo de dinâmica em condensados de Bose-Einstein, uma vez que, como veremos na próxima seção, a equação independente de tempo só nos rende informações sobre o estado fundamental de sua energia.

Para derivar a equação de movimento para a função de onda do condensado $\Psi(\mathbf{r}, t)$, consideremos o princípio da mínima ação¹

$$\delta\mathcal{A}[\Psi, \Psi^*] = 0, \quad (2.1)$$

em que a ação $\mathcal{A}[\Psi, \Psi^*]$ tem a forma

$$\mathcal{A}[\Psi, \Psi^*] = \int d^3r \int_{t_1}^{t_2} dt \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.2)$$

O Hamiltoniano $H(\mathbf{r}, t)$ é decomposto da forma

$$H(\mathbf{r}, t) = H_0(\mathbf{r}, t) + H_{\text{int}}(\mathbf{r}, t), \quad (2.3)$$

¹ Para um melhor entendimento da notação, ver a referência [28].

onde no primeiro termo a direita da igualdade está incluso a energia de uma partícula, correspondente as energias cinética e de aprisionamento devido a um potencial externo

$$H_0(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

em que M é a massa do sistema estudado. E a interação entre duas partículas é dado pelo Hamiltoniano

$$H_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}', t) V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t), \quad (2.5)$$

com uma interação geral V_{int} entre dois bósons com coordenada relativa \mathbf{r} .

Sendo o lagrangeano (\mathcal{L}) o integrando da ação (2.2), a função $\Psi \rightarrow 0$ quando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ ao integrarmos \mathcal{L} , e satisfazendo a condição $\delta\Psi(\mathbf{r}', t_1) = \delta\Psi(\mathbf{r}', t_2)$ para qualquer ponto \mathbf{r} no espaço, obtemos a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Psi^*} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} = 0, \quad (2.6)$$

em que o Lagrangeano tem a forma, considerando os Hamiltonianos expressos pelas equações (2.3)-(2.5) e denotando $\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \Psi^*$, $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi$ por simplicidade

$$\mathcal{L} = i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla \Psi^* \nabla \Psi - \Psi^* V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \Psi - \Psi^* H_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) \Psi. \quad (2.7)$$

Assim, das equações (2.6)-(2.7) obtemos a eGP dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}', t) V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.8)$$

Esta equação se tornou a principal ferramenta para o estudo da teoria de condensado de Bose-Einstein por descrever com grande eficiência fenômenos observados nesses sistemas. Foi derivada independentemente por E. P. Gross [10] e L.P. Pitaevskii [11] em 1961 e utilizada pela primeira vez para estudar a presença de vórtices em condensados de Bose-Einstein fracamente interagentes.

2.1.2 Equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo

Para se obter as informações sobre o estado fundamental e estudar as propriedades estáticas de um CBE, usamos a versão independente do tempo da eGP (2.8). Aplicando o método de separação de variáveis a partir de um *ansatz*,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (2.9)$$

onde o termo exponencial caracteriza a liberdade para que a fase evolua livremente com o tempo, de forma uniforme através do sistema, enquanto a densidade $n(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ não é afetada. Inserindo (2.9) na equação (2.8), obtemos a eGP independente do tempo

$$\mu\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r' \psi^*(\mathbf{r}')V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \right] \psi(\mathbf{r}) \quad (2.10)$$

em que μ representa o potencial químico e $\psi(\mathbf{r})$ é uma função real que é normalizada pelo número de partículas N no estado fundamental de um condensado no regime inteiramente condensado

$$N = \int d^3r \psi(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Soluções independentes da eGP independente do tempo são soluções estacionárias do sistema, e a menor solução de energia caracteriza o estado fundamental do CBE.

Em experimentos típicos, o primeiro termo do lado direito da Eq.(2.10) pode ser negligenciado em problemas estáticos e dinâmicos se a interação for suficientemente forte [29, 30]. Na ausência de interações, retomamos a equação de Schrödinger independente do tempo. De forma mais geral, o potencial químico é definido como [7]

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}. \quad (2.12)$$

No próximo capítulo, estaremos estudando CBE em que há tanto a interação de curto alcance isotrópica devido ao contato entre os bósons quanto a de longo alcance anisotrópica devido a interação dipolo-dipolo. Nesse capítulo, no entanto, nos restringimos ao caso em que há apenas a interação de contato entre os átomos, que para este, como estamos lidando com efeitos de interação entre duas partículas em baixas temperaturas em gases atômicos diluídos ($n|a_s|^3 \ll 1$), um pseudo-potencial foi construído para baixas energias na qual é dado por [31, 32]

$$V_\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.13)$$

em que

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M}, \quad (2.14)$$

e a_s é o comprimento de espalhamento. De fato, a interação de contato funciona como um modelo efetivo para potencial de van der Waals. Se o potencial de van der Waals é aproximado por uma esfera com diâmetro a_s , a Eq.(2.13) é o pseudo-potencial que reproduz o comprimento

real da dispersão da onda s a baixas temperaturas. Temos então, sob a suposição que só temos interação de contato entre os átomos, que

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.15)$$

e a partir dessa equação, podemos reescrever a eGP (2.10) como

$$\mu\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\psi(\mathbf{r})|^2 \right] \psi(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

Podemos fazer uma investigação da energia do estado fundamental do condensado a partir do funcional de energia para a eGP

$$E[\psi] = \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2M} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{g}{2} |\psi(\mathbf{r})|^4 \right]. \quad (2.17)$$

onde a primeira parcela do lado direito da igualdade corresponde a energia cinética do condensado, a segunda parcela nos fornece a energia de aprisionamento e a última parcela é referente a energia de interação entre as partículas. As soluções da eGP correspondem ao mínimo local do funcional de energia (2.17).

2.2 Condensados ideais

Nesta seção, começamos estudando a energia do estado fundamental para um gás aprisionado em um potencial. Uma propriedade importante que caracteriza uma armadilha magnética disponível para átomos alcalinos é o fato que esse potencial de confinamento pode ser seguramente aproximado a forma quadrática. Portanto, vamos considerar um potencial harmônico tridimensional anisotrópico, que é dado por [33]

$$V_{\text{ext}}(x, y, z) = \frac{M}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (2.18)$$

Muitas das armadilhas utilizadas em laboratório são produzidas por meio de um campo magnético externo [17] e possuem alguma simetria de eixos, mas aqui estamos fazendo o caso geral onde as três frequências do oscilador ω_i ($i = x, y, z$) podem ser diferentes.

O Hamiltoniano de muitos corpos é o somatório dos Hamiltonianos de uma partícula única cujo os autovalores tem a forma, nesse caso

$$\epsilon_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_z \quad (2.19)$$

em que $\{n_x, n_y, n_z\}$ são inteiros não negativos. O estado fundamental $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ de N bósons não interagentes confinado por um potencial (2.18) é obtido colocando todas as partículas no estado mais baixo de partícula única, isto é, $n_x = n_y = n_z = 0$.

Vamos, portanto, estudar a solução da eGP para bósons em uma armadilha harmônica [17], de modo que para um potencial V_{ext} dado pela Eq.(2.18), podemos minimizar a energia $E[\psi]$ a partir de uma abordagem variacional baseado em um *ansatz* gaussiano [34]

Então temos que, na ausência de interações entre partículas, o estado mais baixo de uma partícula única tem uma função de onda familiar

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4}(a_x a_y a_z)^{1/2}} e^{-x^2/2a_x^2} e^{-y^2/2a_y^2} e^{-z^2/2a_z^2} \quad (2.20)$$

em que a_i ($i = x, y, z$) representa o comprimento do oscilador, dado por $a_i = \sqrt{\hbar/m\omega_i}$. As interações entre as partículas causam uma mudança na estrutura da nuvem, e empregamos nosso *ansatz* para ψ de natureza igual a Eq.(2.20)

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{N^{1/2}}{\pi^{3/4}(\sigma_x \sigma_y \sigma_z)^{1/2}} e^{-x^2/2\sigma_x^2} e^{-y^2/2\sigma_y^2} e^{-z^2/2\sigma_z^2}, \quad (2.21)$$

onde os comprimentos σ_i são os parâmetros variacionais. Esse *ansatz* obedece a condição de normalização imposta na Eq.(2.11). Substituindo a Eq.(2.21) no funcional de Gross-Piatevskii da Eq.(2.17), obtemos para um condensado ideal, isto é, levando em consideração o fato de estarmos tratando de um caso onde não há interação interatômica ($g = 0$), a energia do sistema, onde

$$E_{\text{cin}} = \int d^3r \frac{\hbar^2}{2M} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 = N \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar\omega_i}{4} \frac{a_i^2}{\sigma_i^2}, \quad (2.22)$$

é o termo referente a contribuição da energia cinética para a energia total. E,

$$E_{\text{arm}} = \int d^3r V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 = N \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar\omega_i}{4} \frac{\sigma_i^2}{a_i^2}, \quad (2.23)$$

é a parcela da contribuição da energia devido ao potencial oscilador que aprisiona o gás. Dessa forma, temos que a energia total para um condensado na ausência de interações é,

$$E = N \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar\omega_i}{4} \left(\frac{a_i^2}{\sigma_i^2} + \frac{\sigma_i^2}{a_i^2} \right) \quad (2.24)$$

onde o mínimo da soma das energias cinéticas e de aprisionamento é obtido para $\sigma_i = a_i$. Neste limite, obtemos a expressão bem conhecida para a função de onda do estado fundamental de um oscilador harmônico.

2.3 Condensados com interação de contato

Vamos agora considerar o efeito de interação entre os átomos, aprisionados em um potencial dado pela Eq.(2.18). Assim como fizemos para o condensado ideal, introduzindo a

Eq.(2.21) no funcional de energia dado na Eq.(2.17), em que agora $g \neq 0$, onde agora temos a contribuição da energia de contato dado por

$$E_\delta = \frac{g}{2} \int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^4 = \frac{N^2 g}{2(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sigma_x \sigma_y \sigma_z} \quad (2.25)$$

de forma que a energia total em termos dos parâmetros variacionais é

$$E(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) = N \sum_{i=x,y,z} \frac{\hbar\omega_i}{4} \left(\frac{a_i^2}{\sigma_i^2} + \frac{\sigma_i^2}{a_i^2} \right) + \frac{N^2 g}{2(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sigma_x \sigma_y \sigma_z}. \quad (2.26)$$

Se fizermos os valores de $\sigma_i = a_i$, teremos que

$$E \simeq N \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2} + \frac{N^2 g}{2(2\pi)^{3/2} a_x a_y a_z} \quad (2.27)$$

onde,

$$\frac{g}{(2\pi)^{3/2} a_x a_y a_z} = g \int d^3r |\varphi_0(\mathbf{r})|^4 \quad (2.28)$$

corresponde a energia de interação para duas partículas no estado fundamental do oscilador. Se as magnitudes das três frequências do oscilador são comparáveis ($\omega_i \sim \omega_{osc}$), a ordem de grandeza da energia de interação em comparação com as energias cinética e de aprisionamento para $\sigma_i = a_i$ é determinado pelo parâmetro adimensional:

$$\chi = \frac{N a_s}{a_{osc}}, \quad (2.29)$$

sendo N o número de partículas. Se $\chi \ll 1$, podemos ignorar as interações. No entanto, se $\chi \gg 1$, descrito como limite de Thomas-Fermi, último termo da Eq.(2.26) exerce um importante papel, e nesse caso é preciso determinar o novo valor de σ_i que minimiza a energia total. Para $a_s > 0$, as interações efetivas são repulsivas e o tamanho da nuvem condensada expande com o número de átomos condensados, e o *ansatz* gaussiano passa a ser mais estendido, equivalendo a grandes valores do comprimento σ_i . Dessa forma, introduzimos o comprimento adimensional definido por

$$\beta_i = \frac{\sigma_i}{a_i} \quad (2.30)$$

Minimizando E com respeito aos parâmetros variacionais β_i , temos para $i = x, y, z$

$$\frac{dE}{d\beta_i} = \frac{\hbar\omega_i}{2} \left(\beta_i^2 - \frac{1}{\beta_i^2} \right) - \frac{1}{2(2\pi)^{3/2}} \frac{Ng}{\bar{a}^3} \frac{1}{\beta_x \beta_y \beta_z} = 0 \quad (2.31)$$

onde \bar{a}

$$\bar{a} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\bar{\omega}}} \quad (2.32)$$

é o comprimento característico para um oscilador de frequência

$$\bar{\omega} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3} \quad (2.33)$$

que é a geometria média da frequência de um oscilador tridimensional. Podemos, de forma geral obter os parâmetros variacionais otimizados para nosso *ansatz* gaussiano resolvendo esse conjunto de equações acopladas. No entanto, vamos considerar o caso onde o número de partículas é suficientemente grande de modo que a energia de interação por partícula é grande quando comparado com $\hbar\omega_i$ para qualquer ω_i . Assim, podemos negligenciar os termos referentes a energia cinética, proporcionais a $1/\beta_i^2$. Resolvendo para um β_i qualquer, obtemos

$$\beta_i^5 = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{Na_s}{\bar{a}} \left(\frac{\bar{\omega}}{\omega_i}\right)^{5/2} \quad (2.34)$$

ou

$$\sigma_i = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/10} \left(\frac{Na_s}{\bar{a}}\right)^{1/5} \frac{\bar{\omega}}{\omega_i} \bar{a} \quad (2.35)$$

e substituindo σ_i na Eq.(2.26), encontramos a energia por partícula aproximada

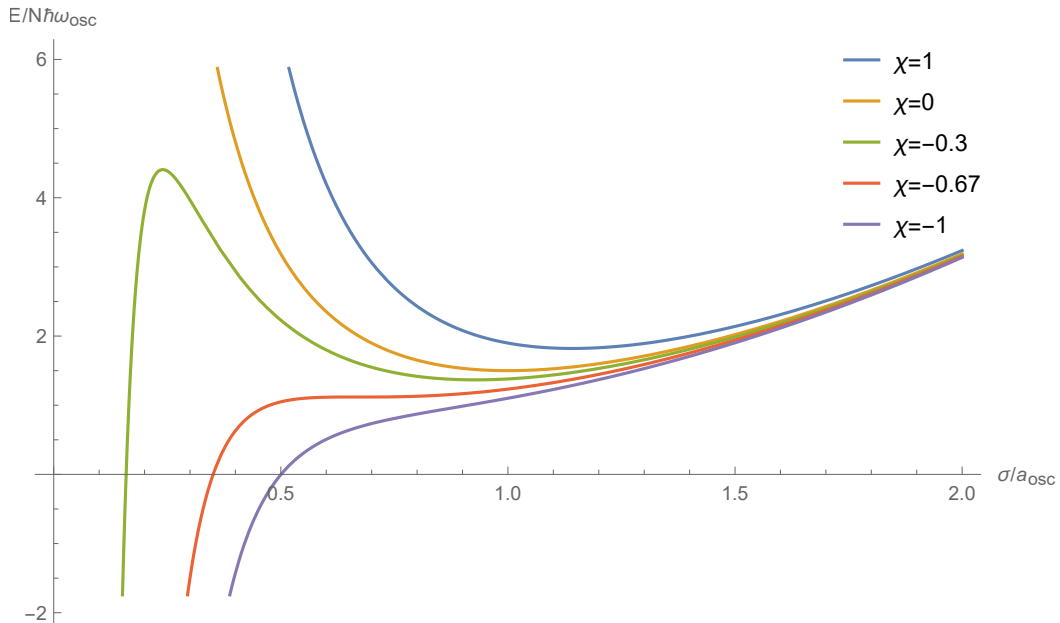
$$\frac{E}{N} = \frac{5}{4} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/5} \left(\frac{Na_s}{\bar{a}}\right)^{2/5} \hbar\bar{\omega}. \quad (2.36)$$

Por essa estimativa variacional (2.36) vemos que no limite que a energia cinética é negligenciada, a energia por partícula é proporcional a $N^{2/5}$ e é da ordem $(Na_s/\bar{a})^{2/5}$ vezes maior que a energia na ausência de interações.

Na Figura 2 temos a ilustração para um oscilador harmônico isotrópico ($\omega_i \sim \omega_{\text{osc}}$) a dependência de $E/N\hbar\omega_{\text{osc}}$ sobre o parâmetro variacional β ($= \beta_x = \beta_y = \beta_z$) para diferentes valores do parâmetro adimensional Na_s/a_{osc} definido na equação (2.29). As curvas são plotadas para interações atrativas, correspondendo a valores negativos do comprimento de espalhamento a_s . Como podemos ver na Figura 2, existe um mínimo local para valores negativos do comprimento de espalhamento, para o caso em que o número de partículas N seja menor que um número crítico N_{cr} . Para valores maiores de N a nuvem colapsa. Podemos encontrar um valor crítico para esse número de partículas pela condição de que a primeira e a segunda derivada de $E[\beta]$ com respeito a β sejam iguais a zero, na qual resulta [35]

$$\frac{N_{\text{cr}}|a_s|}{a_{\text{osc}}} \approx 0.67. \quad (2.37)$$

Figura 2 – Energia por partícula, em unidades de $N\hbar\omega_{\text{osc}}$ para um oscilador harmônico isotrópico como uma função do parâmetro variacional β , para diferentes valores do parâmetro adimensional $\chi = Na_s/a_{\text{osc}}$. A nuvem passa a ser instável no valor crítico de aproximadamente -0.67 .



Fonte: Produzida pelo autor.

2.4 Regime de Thomas-Fermi

Para um número suficientemente grande de bósons em um estado condensado, a energia cinética dessas partículas passa a ser desprezível quando comparada com a energia de interação entre elas e da armadilha. Dessa forma, uma solução analítica é encontrada negligenciando o termo de energia cinética na eGP; isto é conhecido como a aproximação de Thomas-Fermi. Então, para um número de átomos grande e $a_s > 0$ (interações são repulsivas), obtemos ao desprezar o termo referente a energia cinética da eGP (2.16)

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + g|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}) \quad (2.38)$$

onde μ representa o potencial químico. Sendo a densidade

$$n(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.39)$$

a solução é

$$n(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{g}[\mu - V_{\text{ext}}(\mathbf{r})] \quad (2.40)$$

começando em μ/g e como a densidade não pode ser negativa, assumimos que $n(\mathbf{r}) = 0$ se $r \geq R_i$

$$R_i = \sqrt{2\mu/M\omega_i^2} \quad (2.41)$$

em que a extensão da nuvem nas três direções é dada pelos três semieixos R_i , obtido levando em consideração o limite da nuvem que é dado por

$$\mu = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \quad (2.42)$$

onde $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ é dado pela Eq.(2.18). Esta equação significa que a energia para adicionar uma partícula em qualquer ponto da nuvem é o mesmo em qualquer lugar.

A condição de normalização imposta na Eq.(2.11) produz uma relação entre o potencial químico μ e o número total de partículas N . Assim, para um potencial harmônico, encontramos

$$N = \frac{8\pi}{15} \left(\frac{2\mu}{m\bar{\omega}^2} \right)^{3/2} \frac{\mu}{g} \quad (2.43)$$

o que resulta em uma relação útil para o potencial químico em termos do número de átomos N , dada por

$$\mu(N) = \frac{15^{2/5}}{2} \left(\frac{Na_s}{\bar{a}} \right)^{2/5} \hbar\bar{\omega}. \quad (2.44)$$

E a energia por partícula, desde que $\mu = \partial E / \partial N$ e $\mu \propto N^{2/5}$, pela Eq.(2.44) é

$$\frac{E}{N} = \frac{5}{7}\mu. \quad (2.45)$$

Este é o resultado exato da principal contribuição para a energia quando estamos lidando com um grande número N de partículas, e é menor do que o obtido pela estimativa variacional dada na Eq.(2.36) por um fator numérico ≈ 0.92 (ver Figura 3).

Podemos escrever, portanto, com base nas Eqs. (2.38-2.42) que

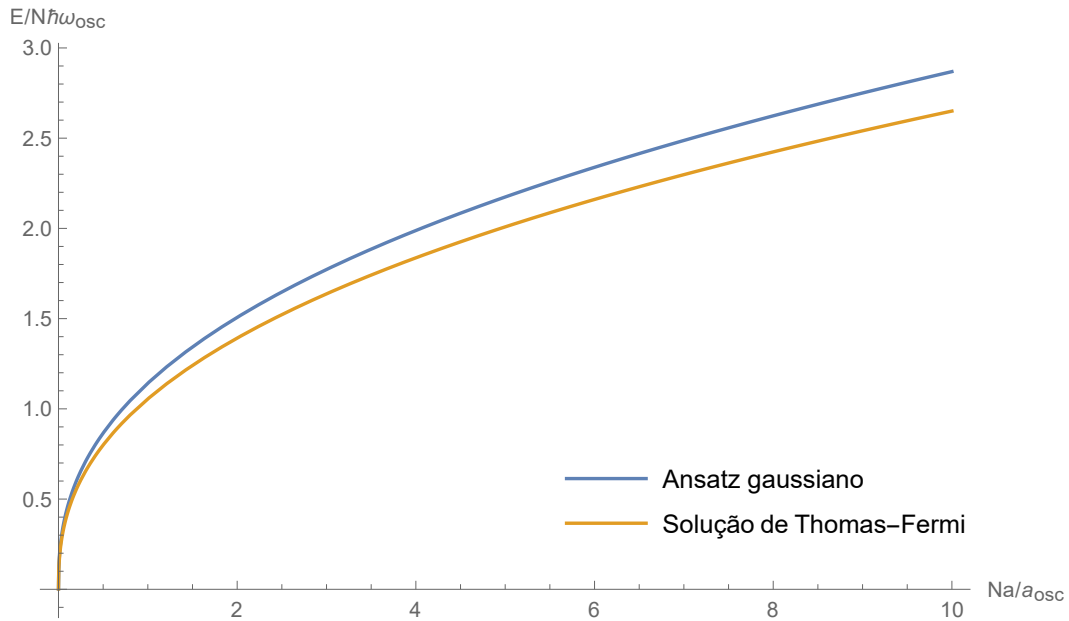
$$n(\mathbf{r}) = \begin{cases} n_0 \left(1 - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} - \frac{z^2}{R_z^2} \right) & ; 1 - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} - \frac{z^2}{R_z^2} \geq 0 \\ 0 & ; \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.46)$$

onde $n(0) = n_0 = \mu/g$ é a densidade central da nuvem. Introduzindo essa última equação no funcional de energia de Gross-Pitaevskii dado na Eq.(2.17) e, negligenciando o termo referente a energia cinética, podemos analisar como a energia total se distribui entre as energias potencial e de interação. Definindo

$$\mathbf{u} = \left(\frac{x}{R_x}, \frac{y}{R_y}, \frac{z}{R_z} \right), \quad (2.47)$$

tornamos o problema relativamente mais fácil, pois tanto o potencial V_{ext} quanto a solução de Thomas-Fermi (2.46) passam a ser simetricamente esféricas nessa nova variável. A relação entre

Figura 3 – Representação da energia por partícula obtido pelo *ansatz* gaussiano e pela solução de Thomas-Fermi para um potencial hamônico isotrópico em função dos parâmetros adimensionais Na_s/a_{osc} .



Fonte: Produzida pelo autor.

a energia de interação de contato E_δ e a energia do potencial de armadilhamento E_{arm} passa a ser, então

$$\frac{E_\delta}{E_{\text{arm}}} = \frac{\int_0^1 du u^2(1-u^2)^2/2}{\int_0^1 du u^4(1-u^2)^2} = \frac{2}{3}. \quad (2.48)$$

A energia de interação de contato é, portanto, igual a $2/5$ vezes a energia total. Assim, como a energia total por partícula é $5\mu/7$, chegamos que a energia de interação por partícula e o potencial químico relacionam-se por

$$\frac{E_\delta}{N} = \frac{2}{7}\mu. \quad (2.49)$$

A aproximação de Thomas-Fermi fornece bons resultados no estudo das propriedades da nuvem condensada para um largo número de átomos. No entanto, em outros problemas importantes, a energia cinética desempenha um papel importante e não pode ser negligenciada.

3 CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN DIPOLAR

Nesse capítulo, consideramos os efeitos da interação dipolar entre os átomos do condensado. Investigamos as propriedades que aparecem devido um potencial de interação de longo alcance e anisotrópico resultante da interação dipolo-dipolo. Calculamos a contribuição da parcela da energia proveniente dessa interação por meio de um procedimento variacional, onde adotamos uma função de onda com perfil gaussiano e, ao final, deduzimos as equações de movimento para os parâmetros variacionais relacionados com o comprimento da nuvem condensada.

3.1 Potencial de interação de dipolo-dipolo

Empregaremos o nome de condensado dipolar a todo CBE em que a interação dipolo-dipolo desempenha um papel mensurável. Diferentemente das interações de contato, as interações entre dipolos são de longo alcance e possuem caráter anisotrópico. Nos últimos anos, desencadeou-se um profundo interesse em se estudar interações dipolo-dipolo, principalmente no contexto dos gases quânticos degenerados, de forma que, através da motivação teórica, muitos foram os esforços experimentais relacionados a gases quânticos degenerados com uma forte interação entre os dipolos. Boa parte dos experimentos tratam de moléculas polares, onde essas possuem uma forte interação dipolo-dipolo proveniente do grande momento de dipolo elétrico. Mas outra possibilidade se encontra em trabalhar com átomos com grande momento de dipolo magnético, como é o caso do Cromo ^{52}Cr .

Em um condensado de Cromo, as interações dipolo-dipolo são comparáveis às interações de contato e possíveis de serem medidas em laboratório, já que no estado eletrônico fundamental, os átomos de Cromo têm momentos de dipolos magnéticos da ordem de $6\mu_B$. Condensado com Cromo foi primeiramente realizado pelo grupo do Pfau em Stuttgart em 2005 [18].

Para a interação dipolo-dipolo, um pseudo potencial foi construído [36, 37, 38]. Para momentos de dipolo magnético μ_m , por exemplo, temos

$$V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{i,j} \frac{\mu_0 \mu_{m_i} \mu_{m_j}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \left[\delta_{i,j} - \frac{3x_i x_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \right]. \quad (3.1)$$

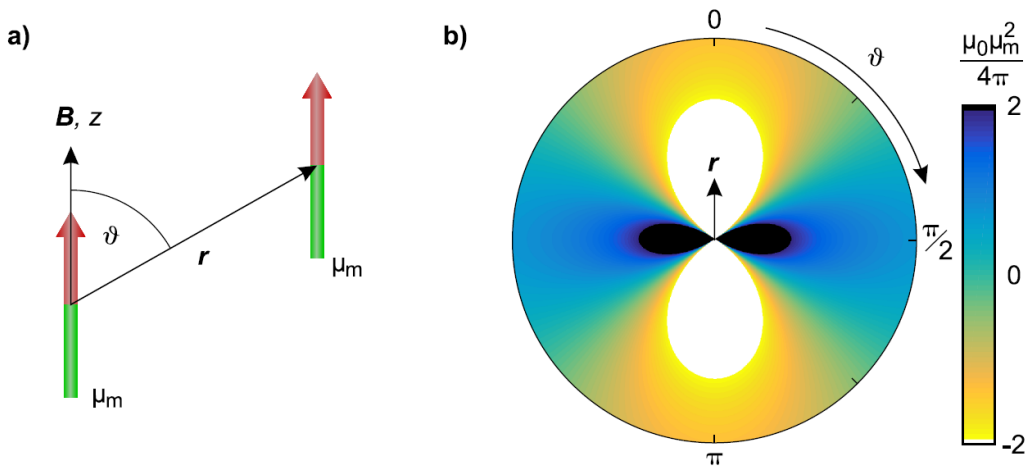
Nesse trabalho estaremos considerando que os dipolos são polarizados ao longo de um dos eixos da armadilha. No caso, consideramos os dipolos orientados ao longo da direção z ,

de modo que o potencial de interação dipolo-dipolo é escrito como

$$V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{C_{dd}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} (1 - 3 \cos^2 \vartheta), \quad (3.2)$$

onde para momentos de dipolo magnético μ_m , a interação dipolo-dipolo é descrita por $C_{dd} = \mu_0\mu_m^2$, com μ_0 sendo a permeabilidade magnética no vácuo, enquanto que para momentos de dipolo elétrico, a força de interação é $C_{dd} = 4\pi d^2$, em que d é o momento de dipolo elétrico expresso em unidades de Debye (D). O caráter anisotrópico da interação dipolo-dipolo é mostrado na Fig 4, onde vemos que dependendo do valor de ϑ a interação passa de repulsiva para atrativa.

Figura 4 – Interação dipolo-dipolo. a) Ilustração esquemática da interação dipolo-dipolo entre dois dipolos com momento dipolar μ_m alinhados por um campo magnético externo \mathbf{B} ao longo da direção z . b) O caráter da interação é indicada em forma de cores, onde representa interações atrativas as cores claras brilhantes, enquanto que as interações repulsivas são representadas pelas cores escuras. A força de interação dipolar é dado em unidades de $\mu_0\mu_m^2/4\pi$.



Fonte: Retirada de [39].

Como observado na Fig. 4, a anisotropia desse potencial vista a partir da sua dependência com o ângulo ϑ , leva a uma força de interação puramente atrativa para $\vartheta = 0$, e a uma força puramente repulsiva para $\vartheta = \pi/2$. O caráter de longo alcance da interação provém de sua dependência r^{-3} , não podendo, portanto, ser utilizado um potencial mais trivial do tipo Dirac [21].

No estudo desses gases, é adequado introduzirmos parâmetros para avaliar a força de interação dipolar, dessa forma, analogamente ao caso das interações de contato, onde trabalhamos com o conceito de comprimento de espalhamento a_s , definimos o comprimento dipolar como

$$a_{dd} = \frac{\mu_0\mu_m^2 M}{12\pi\hbar^2} \quad (3.3)$$

e a força de acoplamento dipolar

$$g_{\text{dd}} = \frac{4\pi\hbar^2}{M} = \frac{\mu_0\mu_m^2}{3}. \quad (3.4)$$

As definições realizadas nas Eqs.(3.3) e (3.4) foram feitas de modo que um CBE homogêneo e tridimensional seja instável quando $a_{\text{dd}} > a_s$. Assim, para comparar a interação de contato e a interação dipolar, definimos a força de interação relativa,

$$\epsilon_{\text{dd}} = \frac{g_{\text{dd}}}{g} = \frac{C_{\text{dd}}}{3g}. \quad (3.5)$$

Na próxima seção, vamos estudar, portanto, sistemas em que as interações de contato e de dipolo-dipolo sejam ambas significativas. Dessa forma, o potencial de interação total se escreve como

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.6)$$

3.2 Energia dipolar para um ansatz gaussiano

No capítulo anterior, obtemos substituindo um *ansatz* (2.21) na forma funcional da energia de Gross-Pitaevskii (2.17), a energia do estado fundamental para um CBE em que foi considerado a presença de interações de curto alcance e isotrópica entre os átomos. Agora, vamos considerar uma interação total (3.6) em que é levado em conta que entre o átomos existe tanto a interação de contato já comentada, quanto a interação dipolo-dipolo (3.2), de forma que calcularemos, a partir de um *ansatz* gaussiano (2.21), a contribuição da energia devido a interação dipolo-dipolo E_{dd} .

A parcela da energia total referente a energia de interação dipolo-dipolo é dado por

$$E_{\text{dd}}[\psi] = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' |\psi(\mathbf{r}')|^2 V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad (3.7)$$

em que por conveniência, reescrevemos o *ansatz*

$$n(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = \frac{N}{\pi^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} e^{-\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right)}. \quad (3.8)$$

A energia dipolar (3.7) pode ser calculada com a ajuda da transformada de Fourier da interação dipolo-dipolo (ver apêndice A) e da densidade (3.8), na qual é dada por

$$\tilde{n}(\mathbf{k}) = \int d^3r n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = N e^{-\frac{1}{4}(k_x^2\sigma_x^2 + k_y^2\sigma_y^2 + k_z^2\sigma_z^2)}, \quad (3.9)$$

enquanto que o potencial de interação dipolo-dipolo (3.2) pode ser reescrito como

$$V_{\text{dd}}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3(\boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{r})^2 - \mu_m^2 r^2}{|\mathbf{r}|^5} \right), \quad (3.10)$$

tem a sua transformada de Fourier com mesma simetria, dada por [40]

$$\tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k}) = \int d^3r V_{\text{dd}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{\mu_0 \mu_m^2}{3} (3 \cos^2 \alpha - 1), \quad (3.11)$$

em que α é o ângulo entre o vetor \mathbf{k} e a direção de polarização. Ou ainda, sendo $\cos \alpha = \boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{k} / \mu_m k$, chegamos a expressão

$$\tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k}) = \frac{\mu_0}{3} \left(3 \frac{(\boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{k})^2}{k^2} - \mu_m^2 \right). \quad (3.12)$$

Dessa forma, podemos calcular a contribuição da energia dipolo-dipolo E_{dd} por meio do auxílio da transformada de Fourier, em que

$$\begin{aligned} E_{\text{dd}} &= \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' n(\mathbf{r}') V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{n}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \tilde{n}(\mathbf{k}'') e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Depois de algumas manipulações e levando em consideração a propriedade da delta de Dirac, obtemos

$$E_{\text{dd}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{n}(\mathbf{k}) \tilde{V}_{\text{dd}}(-\mathbf{k}) \tilde{n}(-\mathbf{k}), \quad (3.14)$$

em que $\tilde{n}(\mathbf{k})$ e $\tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k})$ são dadas nas equações (3.9) e (3.12). Observemos também a paridade dessas equações, onde temos que $\tilde{n}(-\mathbf{k}) = \tilde{n}(\mathbf{k})$ e $\tilde{V}_{\text{dd}}(-\mathbf{k}) = \tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k})$. Assim, substituindo os valores de $\tilde{n}(\mathbf{k})$ e $\tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k})$ na Eq.(3.14), obtemos

$$E_{\text{dd}} = \frac{N^2 C_{\text{dd}}}{6(2\pi)^3} \int d^3k \left(\frac{3k_z^2}{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} - 1 \right) e^{-\frac{1}{2}(k_x^2 \sigma_x^2 + k_y^2 \sigma_y^2 + k_z^2 \sigma_z^2)}, \quad (3.15)$$

em quem nessa última equação substituímos $\cos \alpha = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$, sendo $\mathbf{k} = k\hat{z}$. Fazendo a substituição para um sistema de coordenadas adequado

$$\begin{pmatrix} k_x \sigma_x \\ k_y \sigma_y \\ k_z \sigma_z \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \phi \\ \sin \vartheta \sin \phi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

e subsequentemente, resolvendo a integral radial $\int_0^\infty dr r^2 e^{-\frac{1}{2}r^2} = \sqrt{\pi/2}$, obtemos para a expressão da energia dipolo-dipolo,

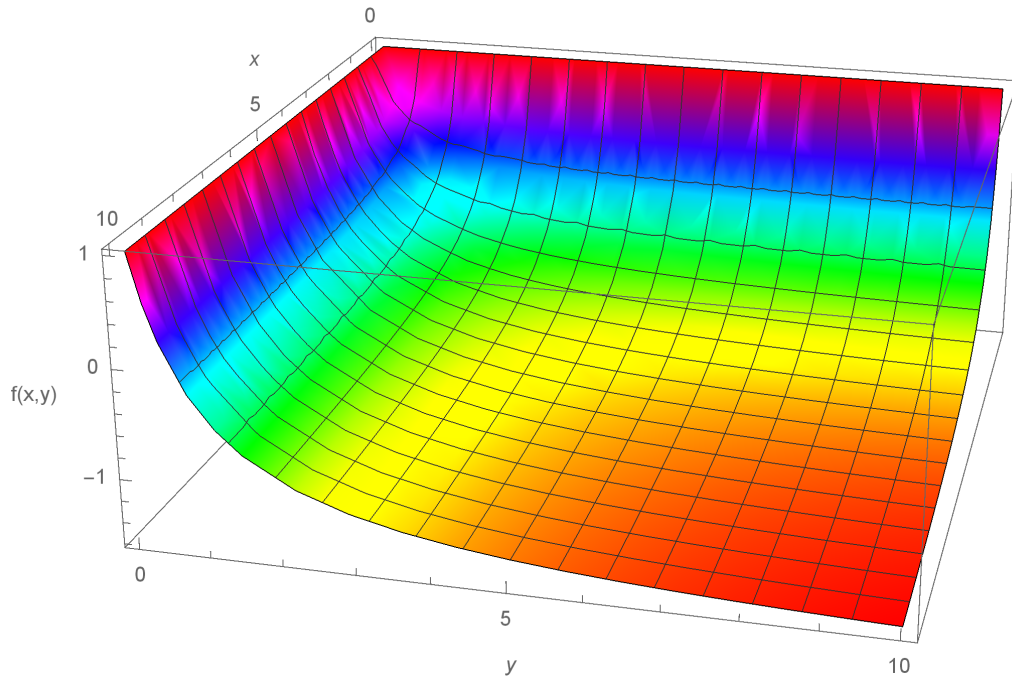
$$E_{\text{dd}} \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_y \\ \sigma_z & \sigma_z \end{pmatrix} = -\frac{N^2 C_{\text{dd}}}{6(2\pi)^{3/2}} \frac{f \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z} \right)}{\sigma_x \sigma_y \sigma_z}, \quad (3.17)$$

onde inserimos a função de anisotropia, definindo $x = \sigma x/\sigma_z$ e $y = \sigma y/\sigma_z$

$$f(x, y) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \left[\frac{x^2 y^2 3 \cos^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta (y^2 \cos^2 \phi + x^2 \sin^2 \phi) + x^2 y^2 \cos^2 \vartheta} - 1 \right]. \quad (3.18)$$

Na qual $f(x, y)$ descreve o caráter anisotrópico da interação, mostrando as propriedades geométricas que governam a interação dipolo-dipolo.

Figura 5 – Função de anisotropia $f(x, y)$ correspondente a equação (3.18). A função está limitada entre os valores 1 para pequenos valores de x ou y e -2 para grandes valores de x e y .



Fonte: Produzida pelo autor.

Na Fig. (5), observamos que a função está limitada entre 1, para $x \ll 1$ ou $y \ll 1$, e -2 , passando em 0 em $x = y = 1$. Isso corresponde ao fato que a interação dipolo-dipolo é parcialmente atrativa ou parcialmente repulsiva. Em um sistema com simetria cilíndrica (Fig. 6), cuja a polarização está ao longo do eixo de simetria, a interação é, portanto, predominantemente atrativa em sistemas com geometria prolata (em forma de charuto), e repulsiva em sistema com geometria oblata (em forma de panqueca). A função de anisotropia $f(x, y)$ com o eixo z sendo o eixo de simetria pode ser definida como

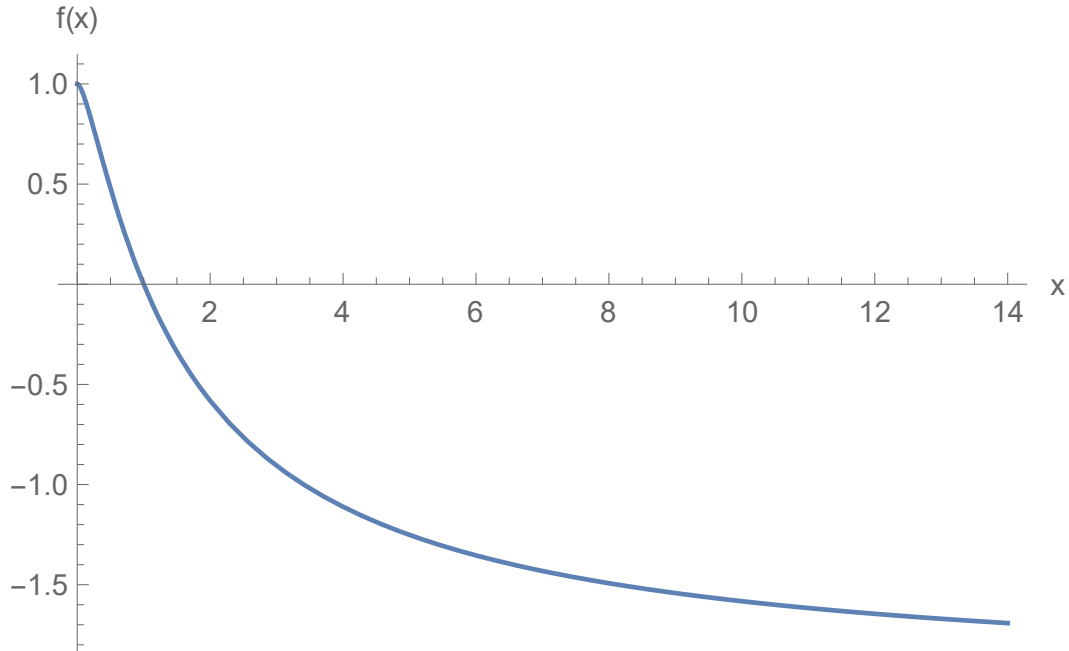
$$f(x, x) = f_s(x), \quad (3.19)$$

onde

$$f_s(x) = -\frac{1}{2} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \left(\frac{3x^2 \cos^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta + x^2 \cos^2 \vartheta} - 1 \right) \quad (3.20)$$

válido para todo x .

Figura 6 – Gráfico da função de anisotropia em simetria cilíndrica $f_s(x)$ como função de x . Em $x = 1$ $f_s(x)$ muda seu sinal, mostrando sua dependência com a geometria do sistema.



Fonte: Produzida pelo autor.

3.3 Aplicação do princípio da mínima ação

Nesta seção, estudamos condensados dipolares a partir de uma abordagem variacional. Fazendo o uso da densidade gaussiana e determinando a fase da função de onda do condensado, podemos derivar as equações de movimento para os parâmetros variacionais σ_i do condensado dipolar.

Para tal estudo, partimos do princípio da mínima ação (2.1) com a ação (2.2)-(2.5). Para derivar a equação de movimento, adotamos o *ansatz* fatoração

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{iM\eta(\mathbf{r}, t)/\hbar} \Psi_0(\mathbf{r}, t), \quad (3.21)$$

que pode ser feito para uma função complexa geral com $\eta(\mathbf{r}, t)$ e $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ sendo funções reais. Substituindo o *ansatz* (3.21) na equações (2.2)-(2.5) e impondo que o número total de partículas seja conservado, obtemos, após uma integração parcial

$$\mathcal{A}[\Psi_0, \eta] = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \Psi_0(\mathbf{r}, t) \left[M \left(\dot{\eta}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \nabla\eta(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla\eta(\mathbf{r}, t) \right) + H_0(\mathbf{r}, t) \right] \Psi_0(\mathbf{r}, t), \quad (3.22)$$

com o hamiltoniano H_0 sendo

$$H_0(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}g|\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{1}{2} \int d^3 r' \Psi_0(\mathbf{r}', t) V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_0(\mathbf{r}', t). \quad (3.23)$$

Assumimos um *ansatz* gaussiano para $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ similar ao da Eq.(2.21), dado por

$$\Psi_0(\mathbf{r}, t) = \frac{N^{1/2}}{\pi^{3/4} [\sigma_x(t)\sigma_y(t)\sigma_z(t)]^{1/2}} e^{-x^2/2\sigma_x^2(t)} e^{-y^2/2\sigma_y^2(t)} e^{-z^2/2\sigma_z^2(t)}, \quad (3.24)$$

na qual os comprimentos $\sigma_i(t)$ são os parâmetros variacionais que são, em geral, dependentes do tempo. Utilizamos ainda, um *ansatz* explícito para a fase do condensado

$$\eta(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2}\alpha_x(t)x^2 + \frac{1}{2}\alpha_y(t)y^2 + \frac{1}{2}\alpha_z(t)z^2, \quad (3.25)$$

em que os $\alpha_i(t)$ são parâmetros variacionais responsáveis pela dinâmica do sistema.

Vamos agora, avaliar cada termo da ação dada na Eq.(3.22) como funções dos parâmetros variacionais. O primeiro termo pode ser calculada, de forma que resulta em

$$-M \int d^3 r |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \dot{\eta}(\mathbf{r}, t) = -\frac{MN}{4} [\dot{\alpha}_x(t)\sigma_x^2(t) + \dot{\alpha}_y(t)\sigma_y^2(t) + \dot{\alpha}_z(t)\sigma_z^2(t)]. \quad (3.26)$$

A contribuição para a energia cinética resultante da fase é,

$$E_{\text{fluxo}}(t) = \frac{M}{2} \int d^3 r |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \nabla \eta(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla \eta(\mathbf{r}, t), \quad (3.27)$$

na qual é a energia cinética associada com a corrente de partículas [34]. Então, substituindo o *ansatz* (3.25) em (3.27), a energia de fluxo é dada por

$$E_{\text{fluxo}}(t) = \frac{MN}{4} [\alpha_x^2(t)\sigma_x^2(t) + \alpha_y^2(t)\sigma_y^2(t) + \alpha_z^2(t)\sigma_z^2(t)]. \quad (3.28)$$

É importante, antes de discutirmos a ação (3.22), avaliarmos separadamente a contribuição de cada energia. Dessa forma, é conveniente definir a densidade de energia de campo médio, definida como

$$E_{\text{CM}}(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{1}{2} \int d^3 r' |\Psi_0(\mathbf{r}', t)|^2 V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \Psi_0(\mathbf{r}, t) \quad (3.29)$$

de forma que a energia do campo médio correspondente se escreve como

$$E_{\text{CM}}(t) = \int d^3 r E_{\text{CM}}(\mathbf{r}, t) \quad (3.30)$$

Observamos que a energia de campo médio pode ser decomposta como

$$E_{\text{CM}}(t) = E_{\text{cin}}(t) + E_{\text{arm}}(t) + E_{\delta}(t) + E_{\text{dd}}(t) \quad (3.31)$$

onde os três primeiros termos do lado direito da igualdade são similares com os já encontrados no capítulo dois e o termo referente a contribuição da energia dipolo-dipolo E_{dd} é similar ao exposto na equação (3.17), no entanto, os parâmetros variacionais σ_i que dependem, geralmente, do tempo. A energia cinética é calculada, e se obtém

$$E_{\text{cin}}(t) = \int d^3r \Psi_0(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} \right) \Psi_0(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar^2 N}{4M} \left[\frac{1}{\sigma_x^2} + \frac{1}{\sigma_y^2} + \frac{1}{\sigma_z^2} \right] \quad (3.32)$$

Avaliando a energia de armadilhamento devido ao potencial externo, temos

$$E_{\text{arm}}(t) = \int |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \frac{MN}{4} [\omega_x^2 \sigma_x^2(t) + \omega_y^2 \sigma_y^2(t) + \omega_z^2 \sigma_z^2(t)] \quad (3.33)$$

onde $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ é dado na equação (2.18). Já a energia de contato $E_{\delta}(t)$ é dado por

$$\begin{aligned} E_{\delta}(t) &= \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' |\Psi_0(\mathbf{r}', t)|^2 g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \\ &= \frac{N^2 g}{2(2\pi)^{3/2} \sigma_x(t) \sigma_y(t) \sigma_z(t)} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Para a contribuição na energia devido a interação dipolo-dipolo, temos, como mostrado em (3.17),

$$E_{dd}(t) = -\frac{N^2 C_{dd}}{6(2\pi)^{3/2}} \frac{f\left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z}\right)}{\sigma_x(t) \sigma_y(t) \sigma_z(t)} \quad (3.35)$$

Com base nas equações (3.32)-(3.35), retomamos ao nosso estudo da ação (3.22), na qual agora podemos escrevê-la como função dos parâmetros variacionais

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, t) \quad (3.36)$$

onde a função lagrangiana \mathcal{L} é dada por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, t) = -\frac{MN}{4} \left\{ \sum_i \left[\sigma_i^2 (\dot{\alpha}_i + \alpha_i^2 + \omega_i^2) + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_i^2} \right] + \frac{2Ng/M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left[1 - \epsilon_{dd} f\left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z}\right) \right] \right\} \quad (3.37)$$

sendo ϵ_{dd} dado pela Eq.(3.5). As equações de movimento correspondentes da Eq.(3.36) são obtidas a partir das equações de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \quad (3.38)$$

onde a coordenada generalizada q é, para o caso, um dos parâmetros variacionais.

Para os parâmetros variacionais relacionados a fase do condensado, suas equações de movimentos são dados por

$$\dot{\alpha}_i(t) = \frac{\dot{\sigma}_i(t)}{\sigma_i(t)} \quad (3.39)$$

Essa última equação também serve como relação auxiliar para eliminar os parâmetros $\alpha_i(t)$ das equações de movimento para os comprimentos $\sigma_i(t)$ do condensado, onde as equações de movimento são obtidas por

$$\frac{MN}{4}\ddot{\sigma}_i(t) = -\frac{\partial}{\partial\sigma_i}E_{\text{CM}}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (3.40)$$

Escrevendo de forma explícita a equação (3.40), temos

$$\begin{aligned} \ddot{\sigma}_x &= -\omega_x^2\sigma_x + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_x^3} + \frac{Ng/M}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x^2\sigma_y\sigma_z} \left\{ 1 - \epsilon_{\text{dd}} [1 - \sigma_x\partial_{\sigma_x}] f\left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z}\right) \right\} \\ \ddot{\sigma}_y &= -\omega_y^2\sigma_y + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_y^3} + \frac{Ng/M}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y^2\sigma_z} \left\{ 1 - \epsilon_{\text{dd}} [1 - \sigma_y\partial_{\sigma_y}] f\left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z}\right) \right\} \\ \ddot{\sigma}_z &= -\omega_z^2\sigma_z + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_z^3} + \frac{Ng/M}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z^2} \left\{ 1 - \epsilon_{\text{dd}} [1 - \sigma_z\partial_{\sigma_z}] f\left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z}\right) \right\} \end{aligned} \quad (3.41)$$

A física do CBEs dipolares são descritas pelas Eqs. (3.41). Elas são semelhantes a obtidas em [41] por meio de um procedimento hidrodinâmico e são utilizadas para investigar a dinâmica do tempo de vôo¹ nesses sistemas no regime de Thomas-Fermi. No nosso caso, consideramos os efeitos da energia cinética no condensado dipolar. As propriedades estáticas podem ser investigadas fazendo $\ddot{\sigma}_i = 0$.

¹ Expansão do condensado após o desligamento da armadilha.

4 GOTÍCULAS QUÂNTICAS DIPOLARES

Nesse capítulo, nós apresentamos um novo estado da matéria, inteiramente incompatível com a teoria de campo médio. Este novo estado da matéria ficou conhecido como gotícula quântica e foi observado em 2016, em uma série de experimentos realizados em Stuttgart [24, 25]. Estudamos a correção da energia que aparece devido as flutuações quânticas, mecanismo utilizado para descrever a formação desse estado e efeito que elas causam nas equações de movimento obtidas no capítulo anterior.

4.1 A descoberta de uma nova fase da matéria

A formação de estruturas autoligadas é um fenômeno fundamental da natureza que determina as propriedades da matéria. É de grande interesse da comunidade científica a descoberta por fases exóticas da matéria, impulsionando grande parte das pesquisas fundamentais no campo da física da matéria condensada.

Os primeiros resultados experimentais relacionados com as chamadas gotículas quânticas foram obtidas a partir de um condensado dipolar que atua como um ferrofluido quântico [22]. Assim, um condensado foi realizado confinando átomos de ^{164}Dy em uma armadilha harmônica com um formato oblato, semelhante a uma panqueca, com *aspect ratio*

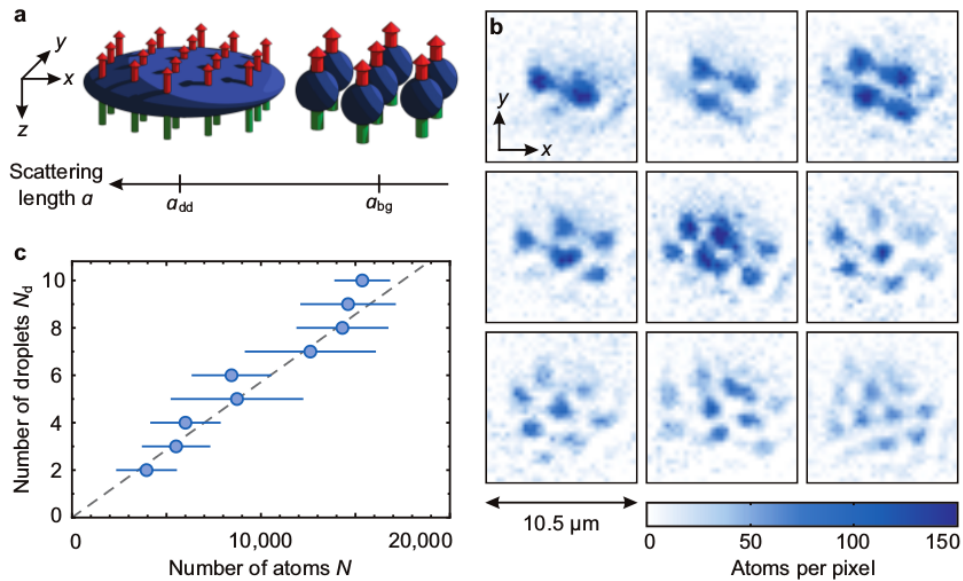
$$\frac{\omega_z}{\omega_\rho} \approx 3, \text{ onde } \omega_\rho \equiv \omega_x = \omega_y, \quad (4.1)$$

atuando sobre o sistema um campo magnético. Foi atingido um condensado com um número típico de 15.000 átomos e uma temperatura de 70 nK [22]. A configuração da armadilha e a direção do campo magnético determinam a estabilidade de um condensado dipolar. O formato oblato da armadilha, conforme (4.1), juntamente com um campo magnético externo polarizando os dipolos magnéticos a longo do eixo z da armadilha resultaram em um condensado estável, mesmo para um condensado fortemente dipolar $\varepsilon_{\text{dd}} > 1$. Isso se deve ao fato de que nessa configuração, os dipolos predominantemente se repelem, sendo responsáveis por essa estabilidade. Alguns conceitos básicos para realização de um condensado de disprósio podem ser acompanhadas em [34, 42, 43].

Conforme foi modulado o parâmetro a_s , para valores abaixo de um limite crítico a_{crit} [44], a teoria do campo médio previa uma instabilidade no condensado mediante a perda de átomos por conta da recombinação de três corpos [45, 46]. Entretanto, observou-se o

aparecimento (Figura 7) de um padrão triangular de pequenas estruturas (gotículas) ao invés da instabilidade [22].

Figura 7 – Crescimento de um cristal microscópico de gotículas. a) Representação esquemática do procedimento experimental. Modulação do comprimento de espalhamento a_s , induzindo uma instabilidade próxima de $a_s \approx a_{bg}$. b) Padrões de gotículas fotografadas *in situ* com o número de gotículas N_d em cada arranjo variando de dois a dez. c) Número médio de átomos N em função do número de gotículas N_d , onde as barras de erros indicam o desvio padrão e a linha tracejada indica a relação linear entre N e N_d .



Fonte: Retirada de [22].

Assim como ocorre em ferroflúidos clássicos mediante a instabilidade de Rosensweig [47], a transição observada em [22] em resposta a instabilidade decorre de uma perturbação periódica na densidade do condensado [48]. Ao observarmos a Figura 7.a), vemos que essa perturbação ocorre para valores do comprimento de espalhamento $a_s \approx a_{bg}$, sendo esse um valor do comprimento de espalhamento relativo ao ^{164}Dy na situação distante de sua ressonância de Feshbach. Nas Figuras 7.b) e c), podemos notar a dependência do número de gotículas N_d em função do número de átomos N . A linha tracejada na Figura 7.c) tem uma inclinação de 1.750 (com uma margem de erro de 300) gotículas por átomo, mostrando que o aumento do número de átomos resulta no crescimento do cristal microscópico das gotículas.

4.2 Correção quântica da energia

A teoria do campo médio de Gross-Pitaevskii é derivada para o caso de átomos em que todos eles estão no mesmo estado quântico, não prevendo a transição de fase para gotículas

quânticas. No entanto, em experimentos realizados em armadilhas oblatas [49, 50] e na ausência de armadilha [51], foi possível observar a formação dessas gotículas em misturas bosônicas alcalinas. O que acontece é que teoricamente, mesmo em temperatura zero, as excitações da eGP são ocupadas devido a flutuações quânticas¹, dando origem a chamada 'depleção quântica'. As correções devido as flutuações quânticas para um gás uniforme não dipolar foram calculadas primeiramente por Lee, Huang e Yang [52, 32], em que é dado por

$$E_{\text{LHY}} = \frac{64}{15}gn(\mathbf{r})^2\sqrt{\frac{n(\mathbf{r})a_s^3}{\pi}}. \quad (4.2)$$

Para sistemas com interações concorrentes, as flutuações quânticas podem estabilizar um sistema em colapso [53]. O equilíbrio proporcional entre a energia atrativa de campo médio e a energia repulsiva correspondente da correção de primeira ordem dessa energia nesses sistemas significa que eles compartilham propriedades com líquidos, embora sejam mais diluídos $na_s^3 \ll 1$. Dessa forma, embora muito sutis em condensados típicos, investigações experimentais realizadas demonstraram que as flutuações quânticas constituem um meio estabilizador das gotículas quânticas, confirmando a natureza quântica delas [23].

Para sistemas dipolares também foi proposto um modelo para explicar a formação das gotículas quânticas. Para isto, a teoria além do campo médio foi utilizada para explicar a formação dessas gotículas dipolares [26], similar ao proposto por [53], onde leva em consideração a formação de gotículas em misturas bosônicas. Assim, baseado na correção Lee, Huang e Yang para o estado fundamental do condensado, em 2011 uma correção na energia devido as flutuações quânticas foi estudada incluindo os efeitos da interação dipolar [54, 55].

$$\Delta E = \frac{64}{15}gn(\mathbf{r})^2\sqrt{\frac{n(\mathbf{r})a_s^3}{\pi}}Q_5(\varepsilon_{\text{dd}}), \quad (4.3)$$

diferenciando-se da correção de LHY (Eq.(4.2)) por um fator multiplicativo $Q_5(\varepsilon_{\text{dd}})$ dado por

$$Q_5(\varepsilon_{\text{dd}}) = (1 - \varepsilon_{\text{dd}})^{5/2} {}_2F_1\left(\frac{5}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2} \frac{3\varepsilon_{\text{dd}}}{\varepsilon_{\text{dd}} - 1}\right), \quad (4.4)$$

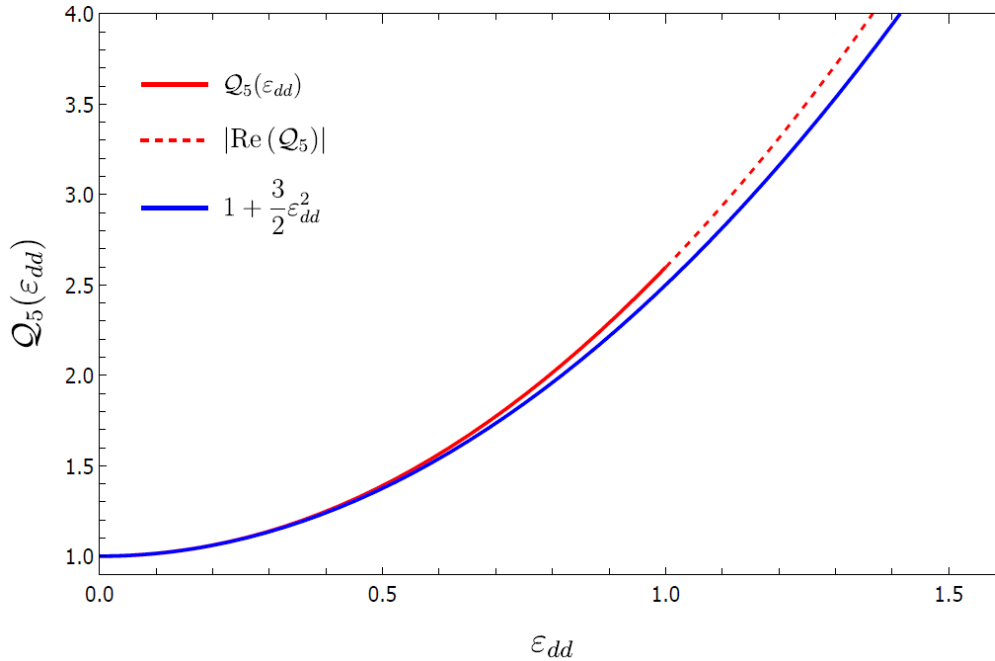
em que ${}_2F_1(a, b; c; d)$ é uma função hipergeométrica. Para $\varepsilon_{\text{dd}} \gtrsim 1$, podemos fazer uma boa aproximação

$$Q_5(\varepsilon_{\text{dd}}) = 1 + \frac{3\varepsilon_{\text{dd}}^2}{2} + \mathcal{O}(\varepsilon_{\text{dd}}) \approx 1 + \frac{3\varepsilon_{\text{dd}}^2}{2}. \quad (4.5)$$

A função $Q_5(\varepsilon_{\text{dd}})$ apresenta uma parte imaginária para $\varepsilon_{\text{dd}} > 1$ e é descontínua em $\varepsilon_{\text{dd}} = 1$. A aproximação 4.5 é uma forma de contornar esse problema sem afetar expressamente a parte real de Q_5 [56]. Na Figura 8 podemos acompanhar o comportamento de (4.4) e (4.5).

¹ Átomos preenchendo estados excitados.

Figura 8 – Gráfico da função Q_5 (linha vermelha) e da aproximação da Eq.(4.5) (linha azul). A linha tracejada representa a parte real de $|\text{Re}(Q_5)|$.



Fonte: Retirada de [57].

Podemos a partir dessa correção energética, implementar as equações de movimento (3.41) devido as flutuações quânticas, fazendo correções na teoria do campo médio por meio da equação de estado. Assim, prescrevemos a equação de estado corrigida variando a energia quântica total corrigida.

$$E_Q = E_{\text{CM}} + \Delta E \quad (4.6)$$

em relação a densidade. O potencial químico corrigido é escrito como

$$\Delta\mu = \frac{\partial \Delta E}{\partial N} = g_{\text{QF}} |\Psi(\mathbf{r})|^3, \quad (4.7)$$

onde fizemos a substituição (2.39) e definimos a abreviação

$$g_{\text{QF}} = \frac{32g}{3} \sqrt{\frac{a_s^3}{\pi}} Q_5(\varepsilon_{\text{dd}}), \quad (4.8)$$

sendo Ψ em (4.7) a função de onda do condensado no regime do campo médio.

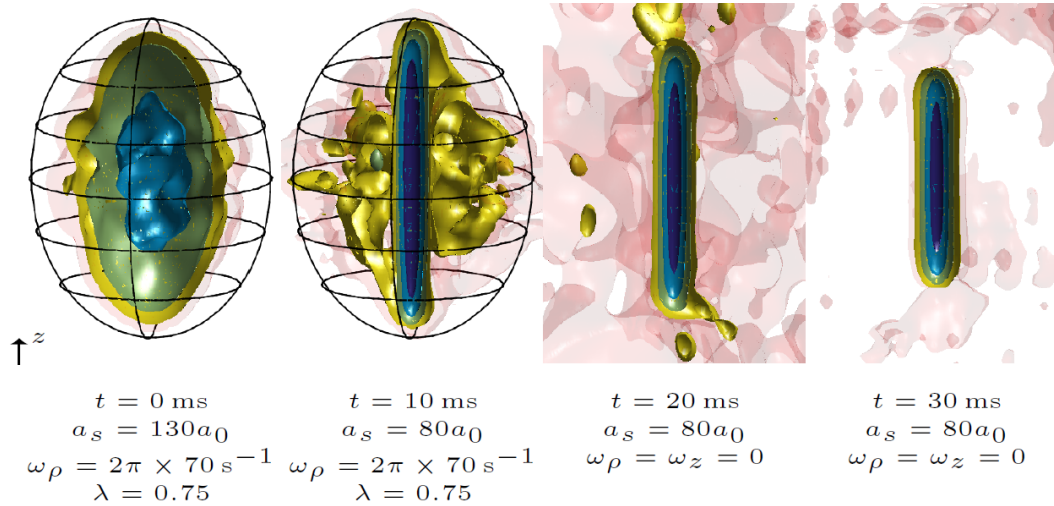
Introduzindo na eGP (2.8) essa correção devido a presença de flutuações quânticas, obtemos a chamada eGP estendida

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d^3 r' \Psi^*(\mathbf{r}', t) V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) + g_{\text{QF}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^3 \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.9)$$

onde V_{int} é dado pela Eq.(3.6). Com a Eq.(4.9), obtemos a descrição de condensados fortemente dipolares e a teoria para o estudo das gotículas quânticas.

Uma simulação numérica da eGP é mostrada na Fig. 9, em que temos $\omega_z/\omega_\rho < 1$. Para esse caso, apenas uma solução é encontrada, configurando um sistema de gotícula única.

Figura 9 – Simulação numérica do processo de preparação de uma gotícula auto-ligada a partir de um condensado de disprósio ^{164}Dy aprisionado em uma armadilha. As linhas pretas delimitam a armadilha harmônica e as cores indicam a densidade do condensado. Em $t = 10$ ms, é observado a formação da gotícula autoligada, em $t = 20$ ms a armadilha é desligada e, posteriormente, é possível observar a gotícula coesa.



Fonte: Retirada de [27].

Através de uma abordagem variacional [26, 27], estudamos funcional de energia de Gross-Pitaevskii, que corrigido nos fornece,

$$E[\psi] = \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2M} |\nabla\psi|^2 + V_{\text{ext}} |\psi|^2 + \frac{g}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2} \Phi_{\text{dd}} |\psi|^2 + \frac{2}{5} g_{\text{QF}} |\psi|^5 \right], \quad (4.10)$$

em que fizemos

$$\Phi_{\text{dd}} = \int d^3r' \psi^*(\mathbf{r}') V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (4.11)$$

O último termo da Eq.(4.10) representa a parcela da energia devido a presença das flutuações quânticas. Para calcular essa parcela, introduzimos o *ansatz* (2.21), de modo que obtemos

$$\Delta E(t) = \int d^3r \frac{2}{5} g_{\text{QF}} |\psi(\mathbf{r}, t)|^5 = \frac{N^{5/2}}{\pi^{9/4} (\sigma_x \sigma_y \sigma_z)^{3/2}} g_{\text{QF}} \left(\frac{2}{5} \right)^{5/2}. \quad (4.12)$$

No próximo capítulo, calculamos o papel dessa energia na equação de movimento dos parâmetros variacionais σ_i que geralmente dependem do tempo.

4.3 Princípio da mínima ação

A correção da energia no estado fundamental foi calculada considerando que o condensado conserva seu perfil gaussiano da Eq.(3.40), de modo que esses cálculos são fundamentados apenas no caso das interações presentes no gás forem predominantemente repulsivas e se as flutuações quânticas não forem tão fortes. Portanto, é justificável calcular as correções quânticas para uma perfil de densidade do campo médio desde que tratemos essa correção como sendo pequena.

Derivamos, portanto, as equações de movimento a partir de um princípio de ação mínima. Temos então, similar a Eq.(3.22),

$$\mathcal{A}[n_0, \eta] = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r n_0(\mathbf{r}, t) \left[M \left(\dot{\eta}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \nabla \eta(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla \eta(\mathbf{r}, t) \right) + E_Q[n_0] \right], \quad (4.13)$$

onde $n_0 = |\Psi_0|^2$. Aqui, a densidade de energia $E_Q[n_0]$ é composto pela energia do campo médio e a correção quântica, conforme vemos na Eq.(4.6).

No capítulo anterior, já avaliamos os termos referentes a energia do campo médio (Eq.(3.31)) em função dos parâmetros variacionais, e na Eq.(4.12), obtemos o termo proveniente da correção quântica da energia. Resgatando, portanto, os resultados (3.32)-(3.35), e levando agora em consideração o resultado obtido na Eq.(4.12), reescrevemos a ação (4.13) em termos dos parâmetros variacionais, assim como na Eq.(3.36),

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, t), \quad (4.14)$$

mas agora, a lagrangiana \mathcal{L} tem um termo a mais em comparação com a apresentada na Eq.(3.37).

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\alpha}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, t) &= -\frac{MN}{4} \left\{ \sum_i \left[\sigma_i^2 (\dot{\alpha}_i + \alpha_i^2 + \omega_i^2) + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_i^2} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{2Ng/M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left[1 - \epsilon_{\text{ddf}} \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z} \right) + \frac{2\gamma/3}{(\sigma_x \sigma_y \sigma_z)^{1/2}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde temos

$$\gamma = \frac{2^{3/2} N^{1/2}}{\pi^{5/4}} \left(\frac{2}{5} \right)^{3/2} \frac{64}{5} \sqrt{a_s^3} \mathcal{Q}_5 \quad (4.16)$$

Analogamente ao modo feito no capítulo anterior, as equações de movimento são obtidas a partir da equações de Euler-Lagrange (Eq.(3.38)), chegamos nas equações

$$\frac{MN}{4} \ddot{\sigma}_i(t) = -\frac{\partial}{\partial \sigma_i} E_Q(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z). \quad (4.17)$$

Explicitamente são escritas como,

$$\begin{aligned}
\ddot{\sigma}_x &= -\omega_x^2 \sigma_x + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_x^3} + \frac{Ng/M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x^2 \sigma_y \sigma_z} \left\{ 1 - \epsilon_{\text{dd}} [1 - \sigma_x \partial_{\sigma_x}] f \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z} \right) + \frac{\gamma}{(\sigma_x \sigma_y \sigma_z)^{1/2}} \right\}; \\
\ddot{\sigma}_y &= -\omega_y^2 \sigma_y + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_y^3} + \frac{Ng/M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y^2 \sigma_z} \left\{ 1 - \epsilon_{\text{dd}} [1 - \sigma_y \partial_{\sigma_y}] f \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z} \right) + \frac{\gamma}{(\sigma_x \sigma_y \sigma_z)^{1/2}} \right\}; \\
\ddot{\sigma}_z &= -\omega_z^2 \sigma_z + \frac{\hbar^2/M^2}{\sigma_z^3} + \frac{Ng/M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z^2} \left\{ 1 - \epsilon_{\text{dd}} [1 - \sigma_z \partial_{\sigma_z}] f \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_z}, \frac{\sigma_y}{\sigma_z} \right) + \frac{\gamma}{(\sigma_x \sigma_y \sigma_z)^{1/2}} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Essas equações incluem os efeitos além de campo médio e são, portanto, uma representação geral das Eqs. (3.41), podendo ser utilizada para o estudo das implicações das flutuações quânticas em um condensado dipolar em uma armadilha harmônica triaxial. Elas são, portanto, chamadas de equações de movimento além de campo médio.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

O trabalho apresentado nessa monografia tem como um de seus objetivos, servir como base para estudantes que estão começando o estudo de condensados de gases quânticos degenerados. Aqui, construímos uma base para o estudo do estado fundamental de sistemas de condensados de Bose-Einstein, utilizando uma aproximação gaussiana para o perfil da função de onda do condensado.

Utilizamos o princípio de ação mínima para o estudo da teoria de Gross-Pitaevskii e assim, derivamos a conhecida eGP dependente e independente do tempo, que se faz útil para uma investigação dinâmica e estática de CBEs. Estudamos CBEs tanto na ausência quanto na presença de interações interatômicas, onde foi possível observar os efeitos causados na energia do estado fundamental do CBE.

No que se refere as interações presentes em um CBE, estudamos sistemas em que a interação dipolo-dipolo, além da interação de contato, desempenha um papel significativo no condensado, e por meio de uma transformada de fourier do potencial de interação dipolo-dipolo, calculamos a contribuição fornecida por esta parcela na energia do estado fundamental de um CBE dipolar, e investigamos as propriedades fornecidas pela característica anisotrópica e de longo alcance dessas interações na energia e nas equações de movimento obtidas para os parâmetros variacionais que medem o comprimento da nuvem.

Estudamos também como as flutuações quânticas foram impostas como mecanismo que explica a existência de um estado novo da matéria, observado experimentalmente em 2016, chamado de gotículas quânticas dipolares. Calculamos a correção na energia que essas flutuações causam e obtemos as equações de movimento para os parâmetros referente ao comprimento da nuvem, onde levamos em consideração o novo termo calculado.

Nossas perspectivas se estendem agora, para uma abordagem variacional no estudo de vórtices quantizados em um sistema de gotícula quântica dipolar autoligada, utilizando uma aproximação gaussiana com um vórtice de carga l adequado [58], dado por

$$\psi_V^l(\rho, \phi, z) = \sqrt{N} \psi_V^l(\rho, \phi) \psi_V(z), \quad (5.1)$$

onde ,

$$\psi_V^l(\rho, \phi) = \frac{2}{\sqrt{l! \pi \sigma_\rho}} \left(\frac{2\rho}{\sigma_\rho} \right)^l e^{-2\rho^2/\sigma_\rho^2} e^{il\phi}, \quad (5.2)$$

e

$$\psi_V(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi^{1/2}\sigma_z}} e^{-2z^2/\sigma_z^2}. \quad (5.3)$$

Pretendemos reproduzir os cálculos realizados para encontrar a energia redimensionada para o caso de $l = 1$ [58], mas levando em consideração a presença da armadilha confinante.

APÊNDICE A – TRANSFORMADA DE FOURIER DO POTENCIAL DE DIPLO-DIPLO

Consideremos o potencial de interação $V_{dd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ que depende da diferença das coordenadas:

$$V_{dd}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{A.1})$$

Portanto, o potencial de interação tem a representação de Fourier,¹ dada por

$$V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3k}{(2\pi^3)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \tilde{V}_{dd}(\mathbf{k}) \quad (\text{A.2})$$

E temos a relação inversa,

$$\tilde{V}_{dd}(\mathbf{k}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} V_{dd}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.3})$$

Estamos considerando um problema na qual temos a interação entre momentos de dipolo magnético iguais. Dessa forma, o potencial de interação dipolo-dipolo é dado por

$$V_{dd}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3(\boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{r})^2 - \boldsymbol{\mu}_m^2 \mathbf{r}^2}{|\mathbf{r}|^5} \right) \quad (\text{A.4})$$

Assim, da Eq.(A.3), temos

$$\tilde{V}_{dd}(\mathbf{k}) = \int d^3r \left[-\frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3(\boldsymbol{\mu}_m \mathbf{r})^2 - \boldsymbol{\mu}_m^2 \mathbf{r}^2}{|\mathbf{r}|^5} \right) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right] \quad (\text{A.5})$$

Para calcular a transformada de Fourier da interação dipolo-dipolo (A.5), escolhemos um sistema de eixos adequado

$$\mathbf{k} = k \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = r \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \phi \\ \sin \vartheta \sin \phi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = m \begin{pmatrix} \sin \alpha \cos \beta \\ \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

E assim,

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{dd}^a(\mathbf{k}) &= -\frac{\mu_0 \mu_m^2}{4\pi} \int_a^\infty \frac{dr}{r} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{-ikr \cos \vartheta} \int_0^{2\pi} d\phi \\ &\times \{ 3 \sin^2 \alpha \sin^2 \vartheta [\cos^2 \beta \cos^2 \phi + 2 \sin \beta \cos \beta \sin \phi \cos \phi + \sin^2 \beta \sin^2 \phi] \\ &+ 3 \cos^2 \alpha \cos^2 \vartheta + 6 \sin \alpha \cos \alpha \sin \vartheta \cos \vartheta (\cos \beta \cos \alpha + \sin \beta \sin \phi) - 1 \} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

¹ Ver por exemplo o capítulo 15 da referência [59].

em que é introduzido um parâmetro de corte a no limite inferior da integral radial de forma a regularizar qualquer singularidade. Resolvendo a integral em ϑ , obtemos

$$\tilde{V}_{\text{dd}}^a(\mathbf{k}) = \frac{\mu_0 \mu_m^2}{4} (1 - 3 \cos^2 \alpha) \int_a^\infty \frac{dr}{r} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{-ikr \cos \vartheta} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \quad (\text{A.8})$$

Subsequentemente, ao integrar em ϑ , obtemos

$$\tilde{V}_{\text{dd}}^a(\mathbf{k}) = \mu_0 \mu_m^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha) \int_a^\infty \frac{dr}{r} \left\{ \frac{\sin kr}{kr} + 3 \frac{\cos kr}{(kr)^2} - 3 \frac{\sin kr}{(kr)^3} \right\} \quad (\text{A.9})$$

E finalmente, fazendo o uso de integração por partes, obtemos o resultado da integral radial

$$\tilde{V}_{\text{dd}}^a(\mathbf{k}) = \mu_0 \mu_m^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha) \left\{ \frac{\cos ka}{(ka)^2} - \frac{\sin ka}{(ka)^3} \right\} \quad (\text{A.10})$$

Podemos agora, para o parâmetro de corte a , realizar a transição limite $a \rightarrow 0^+$

$$\tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k}) = \lim_{a \rightarrow 0^+} \tilde{V}_{\text{dd}}^a(\mathbf{k}) = \frac{\mu_0 \mu_m^2}{3} (3 \cos^2 \alpha - 1) \quad (\text{A.11})$$

Sendo ainda $\cos \alpha = \boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{k} / \mu_m k$, chegamos finalmente a

$$\tilde{V}_{\text{dd}}(\mathbf{k}) = \frac{\mu_0}{3} \left(3 \frac{(\boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{k})^2}{k^2} - \mu_m^2 \right) \quad (\text{A.12})$$

Percebemos ainda que a transformada (A.12) possui a mesma forma de (A.4).

REFERÊNCIAS

- [1] ANDERSON, Mike H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. **science**, p. 198-201, 1995.
- [2] BRADLEY, Cl C. et al. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. **Physical review letters**, v. 75, n. 9, p. 1687, 1995.
- [3] DAVIS, Kendall B. et al. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. **Physical review letters**, v. 75, n. 22, p. 3969, 1995.
- [4] BOSE, Satyendra Nath. Planck's law and the hypothesis of light quanta. **Z. Phys**, v. 26, n. 178, p. 1.5, 1924.
- [5] EINSTEIN, Albert. Sitzber, Kgl preuss. **Akand. Wiss**, v. 261, 1924.
- [6] CHIOCCETTA, Alessio et al. Laser operation and Bose-Einstein condensation: analogies and differences. **Universal Themes of Bose-Einstein Condensation**, p. 409-423, 2017.
- [7] COHEN-TANNOUDJI, Claude et al. **Advances in atomic physics: an overview**. World Scientific, 2011.
- [8] LONDON, Fritz. The λ -phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy. **Nature**, v. 141, n. 3571, p. 643, 1938.
- [9] CORNELL, Eric A.; ENSHER, Jason R.; WIEMAN, Carl E. Experiments in dilute atomic Bose-Einstein condensation. **arXiv preprint cond-mat/9903109**, 1999.
- [10] GROSS, Eugene P. Structure of a quantized vortex in boson systems. **II Nuovo Cimento (1955-1965)**, v. 20, n. 3, p. 454-477, 1961.
- [11] PITAEVSKII, L. P. Vortex lines in an imperfect Bose gas. **Sov. Phys. JETP**, v. 13, n. 2, p. 451-454, 1961.
- [12] EDWARDS, Mark; BURNETT, K. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms. **Physical Review A**, v. 51, n. 2, p. 1382, 1995.
- [13] RUPRECHT, IPA et al. Time-dependent solution of the nonlinear Schrödinger equation for Bose-condensed trapped neutral atoms. **Physical Review A**, v. 51, n. 6, p. 4704, 1995.

- [14] EDWARDS, Mark et al. Properties of a Bose-Einstein condensate in an anisotropic harmonic potential. **Physical Review A**, v. 53, n. 4, p. R1950, 1996.
- [15] DALFOVO, Franco; STRINGARI, Sandro. Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices. **Physical Review A**, v. 53, n. 4, p. 2477, 1996.
- [16] DODD, R. J. et al. Role of attractive interactions on Bose-Einstein condensation. **Physical Review A**, v. 54, n. 1, p. 661, 1996.
- [17] BAYM, Gordon; PETHICK, C. J. Ground-state properties of magnetically trapped Bose-condensed rubidium gas. **Physical review letters**, v. 76, n. 1, p. 6, 1996.
- [18] GRIESMAIER, Axel et al. Bose-Einstein condensation of chromium. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 16, p. 160401, 2005.
- [19] AIKAWA, K. et al. Bose-Einstein condensation of erbium. **Physical review letters**, v. 108, n. 21, p. 210401, 2012.
- [20] LU, Mingwu et al. Strongly dipolar Bose-Einstein condensate of dysprosium. **Physical review letters**, v. 107, n. 19, p. 190401, 2011.
- [21] LAHAYE, Thierry et al. The physics of dipolar bosonic quantum gases. **Reports on Progress in Physics**, v. 72, n. 12, p. 126401, 2009.
- [22] KADAU, Holger et al. Observing the Rosensweig instability of a quantum ferrofluid. **Nature**, v. 530, n. 7589, p. 194, 2016.
- [23] FERRIER-BARBUT, Igor et al. Observation of quantum droplets in a strongly dipolar Bose gas. **Physical review letters**, v. 116, n. 21, p. 215301, 2016.
- [24] SCHMITT, Matthias et al. Self-bound droplets of a dilute magnetic quantum liquid. **Nature**, v. 539, n. 7628, p. 259, 2016.
- [25] FERRIER-BARBUT, Igor et al. Liquid quantum droplets of ultracold magnetic atoms. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, v. 49, n. 21, p. 214004, 2016.
- [26] WÄCHTLER, Falk; SANTOS, L. Quantum filaments in dipolar Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 93, n. 6, p. 061603, 2016.

- [27] BAILLIE, D. et al. Self-bound dipolar droplet: A localized matter wave in free space. **Physical Review A**, v. 94, n. 2, p. 021602, 2016.
- [28] MARION, Jerry B. **Classical dynamics of particles and systems**. Academic Press, 2013.
- [29] KAGAN, Yu; SURKOV, E. L.; SHLYAPNIKOV, G. V. Evolution of a Bose-condensed gas under variations of the confining potential. **Physical Review A**, v. 54, n. 3, p. R1753, 1996.
- [30] CASTIN, Y.; DUM, R. Bose-Einstein condensates in time dependent traps. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 27, p. 5315, 1996.
- [31] HUANG, Kerson; YANG, Chen Ning. Quantum-mechanical many-body problem with hard-sphere interaction. **Physical review**, v. 105, n. 3, p. 767, 1957.
- [32] LEE, Tsin D.; HUANG, Kerson; YANG, Chen N. Eigenvalues and eigenfunctions of a Bose system of hard spheres and its low-temperature properties. **Physical Review**, v. 106, n. 6, p. 1135, 1957.
- [33] GRIMM, Rudolf; WEIDEMÜLLER, Matthias; OVCHINNIKOV, Yurii B. Optical dipole traps for neutral atoms. In: **Advances in atomic, molecular, and optical physics**. Academic Press, 2000. p. 95-170.
- [34] PETHICK, Christopher J.; SMITH, Henrik. **Bose–Einstein condensation in dilute gases**. Cambridge university press, 2008.
- [35] FETTER, Alexander L. Ground state and excited states of a confined condensed Bose gas. **Physical Review A**, v. 53, n. 6, p. 4245, 1996.
- [36] MARINESCU, M.; YOU, L. Controlling atom-atom interaction at ultralow temperatures by dc electric fields. **Physical review letters**, v. 81, n. 21, p. 4596, 1998.
- [37] YI, S.; YOU, L. Trapped atomic condensates with anisotropic interactions. **Physical Review A**, v. 61, n. 4, p. 041604, 2000.
- [38] YI, S.; YOU, L. Trapped condensates of atoms with dipole interactions. **Physical Review A**, v. 63, n. 5, p. 053607, 2001.
- [39] SCHMITT0, Matthias. **A Self-bound Dilute Quantum Liquid of Dysprosium Atoms**. Verlag Dr. Hut, 2017.

- [40] GÓRAL, Krzysztof; RZAAŻEWSKI, Kazimierz; PFAU, Tilman. Bose-Einstein condensation with magnetic dipole-dipole forces. **Physical Review A**, v. 61, n. 5, p. 051601, 2000.
- [41] GIOVANAZZI, S. et al. Expansion dynamics of a dipolar Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 74, n. 1, p. 013621, 2006.
- [42] PHILLIPS, William D. Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms. **Reviews of Modern Physics**, v. 70, n. 3, p. 721, 1998.
- [43] FOOT, Christopher J. et al. **Atomic physics**. Oxford University Press, 2005.
- [44] KOCH, Tobias et al. Stabilization of a purely dipolar quantum gas against collapse. **Nature physics**, v. 4, n. 3, p. 218, 2008.
- [45] RONEN, Shai; BORTOLOTTI, Daniele CE; BOHN, John L. Radial and angular rotons in trapped dipolar gases. **Physical review letters**, v. 98, n. 3, p. 030406, 2007.
- [46] WILSON, Ryan M.; RONEN, Shai; BOHN, John L. Angular collapse of dipolar Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 80, n. 2, p. 023614, 2009.
- [47] COWLEY, M. D.; ROSENSWEIG, Ronald E. The interfacial stability of a ferromagnetic fluid. **Journal of Fluid mechanics**, v. 30, n. 4, p. 671-688, 1967.
- [48] SAITO, Hiroki; KAWAGUCHI, Yuki; UEDA, Masahito. Ferrofluidity in a two-component dipolar Bose-Einstein condensate. **Physical review letters**, v. 102, n. 23, p. 230403, 2009.
- [49] CABRERA, C. R. et al. Quantum liquid droplets in a mixture of Bose-Einstein condensates. **Science**, v. 359, n. 6373, p. 301-304, 2018.
- [50] CHEINEY, P. et al. Bright soliton to quantum droplet transition in a mixture of Bose-Einstein condensates. **Physical review letters**, v. 120, n. 13, p. 135301, 2018.
- [51] SEMEGHINI, G. et al. Self-bound quantum droplets of atomic mixtures in free space. **Physical review letters**, v. 120, n. 23, p. 235301, 2018.
- [52] LEE, T. D.; YANG, C. N. Many-body problem in quantum mechanics and quantum statistical mechanics. **Physical Review**, v. 105, n. 3, p. 1119, 1957.

- [53] PETROV, D. S. Quantum mechanical stabilization of a collapsing Bose-Bose mixture. **Physical review letters**, v. 115, n. 15, p. 155302, 2015.
- [54] LIMA, Aristeu RP; PELSTER, Axel. Quantum fluctuations in dipolar Bose gases. **Physical Review A**, v. 84, n. 4, p. 041604, 2011.
- [55] LIMA, Aristeu R. P.; PELSTER, Axel. Beyond mean-field low-lying excitations of dipolar Bose gases. **Physical Review A**, v. 86, n. 6, p. 063609, 2012.
- [56] SCHÜTZHOLD, Ralf et al. Mean-field expansion in Bose–Einstein condensates with finite-range interactions. **International Journal of Modern Physics B**, v. 20, n. 24, p. 3555-3565, 2006.
- [57] NETO, José Fernandes de Oliveira. **Gotículas quânticas dipolares com orientação arbitrária**. 2019. 84 f. Trabalho de conclusão de curso (Graduação)-Curso de física, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2019.
- [58] CIDRIM, André et al. Vortices in self-bound dipolar droplets. **Physical Review A**, v. 98, n. 2, p. 023618, 2018.
- [59] ARFKEN, George B.; WEBER, Hans J. *Mathematical methods for physicists*. 1999.