



UNILAB

UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA

AFRO-BRASILEIRA

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA

CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA

OSSAMY LIMA OKURA

**ESTADO FUNDAMENTAL E MODOS COLETIVOS DE UM CONDENSADO DE
BOSE-EINSTEIN DIPOLAR NA SUPERFÍCIE DE UMA ESFERA**

REDENÇÃO - CE

2025

OSSAMY LIMA OKURA

ESTADO FUNDAMENTAL E MODOS COLETIVOS DE UM CONDENSADO DE
BOSE-EINSTEIN DIPOLAR NA SUPERFÍCIE DE UMA ESFERA

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

Orientador: Prof. Dr. Aristeu Rosendo
Pontes Lima.

REDENÇÃO - CE

2025

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

Okura, Ossamy Lima.

041e

Estado fundamental e modos coletivos de um condensado de bose-einstein dipolar na superfície de uma esferaESTADO FUNDAMENTAL E MODOS COLETIVOS DE UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN DIPOLAR NA SUPERFÍCIE DE UMA ESFERA / Ossamy Lima Okura. - Redenção, 2025. 70f: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2025.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima.

1. Condensado de Bose-Einstein (BEC). 2. Interação dipolar. 3. Armadilha esférica. 4. Excitações coletivas. I. Título

CE/UF/BSCA

CDD 530.413

OSSAMY LIMA OKURA

ESTADO FUNDAMENTAL E MODOS COLETIVOS DE UM CONDENSADO DE
BOSE-EINSTEIN DIPOLAR NA SUPERFÍCIE DE UMA ESFERA

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

Aprovada em: 05 de Junho de 2025.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
 ARISTEU ROSENDO PONTES LIMA
Data: 10/06/2025 21:04:52-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima (Orientador)
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (Unilab)

Documento assinado digitalmente
 SILVIA HELENA ROBERTO DE SENA
Data: 11/06/2025 08:17:09-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

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

Documento assinado digitalmente
 FRANCISCO MATEUS ALVES GUIMARAES
Data: 10/06/2025 21:31:09-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Me. Francisco Mateus Alves Guimarães
Universidade Federal do Ceará (UFC)

À minha mãe, com todo o meu amor e gratidão
por tudo que fez e faz por mim.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar, em primeiro lugar, minha profunda gratidão à minha família. Agradeço especialmente à minha mãe, por sempre acreditar em mim e investir no meu futuro — não há palavras suficientes para expressar minha admiração e reconhecimento por tudo o que tem feito por mim. Ao meu pai, sou igualmente grato por todo o apoio constante ao longo desta jornada. Aos meus irmãos, que confiaram na minha escolha e, com carinho, me presentearam com meus primeiros livros de Física e Cálculo, deixo meu sincero agradecimento. À minha namorada, que há nove anos caminha ao meu lado, compartilhando os melhores momentos da vida, registro minha eterna gratidão.

Estendo meus agradecimentos a todos os professores que contribuíram para minha formação ao longo da graduação: Prof. Aristeu, Profa. Silvia, Prof. Philipe, Profa. Mylene, Prof. Aurélio, Prof. Michel, Prof. Levi e Profa. Cinthia. Com vocês aprendi muito mais do que Física. A citação de Richard Feynman — “A educação é, em geral, pouco eficaz, exceto nas felizes ocasiões em que ela é quase supérflua” — que abre o volume Lições de Física, passou a fazer pleno sentido após conviver com cada um de vocês.

Agradeço especialmente ao Prof. Aristeu, por ter me acolhido como aluno de iniciação científica, pela orientação dedicada e pelo apoio constante na realização deste trabalho. Estendo também meus sinceros agradecimentos ao Pedro, cuja ajuda foi absolutamente essencial — este trabalho só pôde ser realizado graças à sua generosidade e disposição em colaborar, mesmo sem termos nos conhecido pessoalmente. Como escrevi na carta de seleção para ser bolsista do Prof. Aristeu, reitero aqui as palavras de Isaac Newton: "Se enxerguei mais longe, foi por estar sobre ombros de gigantes."

Agradeço à CAPES, à UNILAB e a todos os colaboradores que compõem esta notável instituição. Minha formação só foi possível graças a esse conjunto excepcional de fatores, que me proporcionaram a oportunidade de estudar e fazer parte desta instituição.

"Ela respondeu: A pergunta não é se você vai amar, sofrer, sonhar e morrer. É o que você vai amar, por que vai sofrer, quando vai sonhar e como vai morrer. Isso é escolha sua. Você não pode escolher o destino, só o caminho."

(Brandon Sanderson)

RESUMO

Neste estudo, investigamos as propriedades do estado fundamental e as excitações de um condensado de Bose-Einstein com interações dipolares, aprisionados na superfície de uma esfera. A abordagem adotada combina um *ansatz* gaussiano com uma expansão em harmônicos esféricos, permitindo a construção de uma formulação variacional para a energia total do sistema. Analisamos como o condensado se comporta quando sujeito a interações de contato isotrópicas e também a forças dipolares anisotrópicas de longo alcance. No limite em que a casca se torna fina, identificamos padrões de densidade anisotrópicos característicos de interações fortemente dipolares. Para explorar os modos coletivos de excitação, aplicamos o método das *Sum Rules*, abrangendo modos como monopolo, dipolo e quadrupolo (em duas e três dimensões). As análises revelam diferenças expressivas em relação a sistemas sem interações dipolares.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein; Interação dipolar; Armadilha esférica; Excitações coletivas.

ABSTRACT

In this study, we investigate the properties of the ground state and the excitations of a Bose-Einstein condensate with dipolar interactions, trapped on the surface of a sphere. The approach adopted combines a Gaussian *ansatz* with an expansion in spherical harmonics, allowing us to construct a variational formulation for the total energy of the system. We analyze how the condensate behaves when subjected to isotropic contact interactions and also to long-range anisotropic dipole forces. In the limit where the shell becomes thin, we identify anisotropic density patterns characteristic of strongly dipolar interactions. To explore the collective modes of excitation, we applied the *Sum Rules* method, covering modes such as monopole, dipole and quadrupole (in two and three dimensions). The analyses reveal significant differences compared to systems without dipole interactions.

Keywords: Bose-Einstein condensate; Dipolar interaction; Spherical trap; Collective excitations.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Perfis de densidade de Thomas-Fermi para um condensado de ^{87}Rb em uma armadilha de bolha, com 10^5 átomos, raio externo de $20\mu\text{m}$ e espessura de $4\mu\text{m}$, sob gravidade nula (esquerda), $0,0014g$ (centro) e $0,007g$ (direita). As cores indicam a densidade normalizada por $n_M = 3,1 \times 10^{13}\text{cm}^{-3}$. A gravidade desloca a densidade para a base da camada condensada. 17
- Figura 2 – A figura ilustra o comportamento típico de um gás bosônico em função da temperatura: a) Em altas temperaturas, o gás segue a estatística clássica de Maxwell-Boltzmann; b) Ao reduzir a temperatura, surgem efeitos quânticos e ondulatórios, exigindo o uso da estatística de Bose-Einstein; c) No ponto de saturação, os estados excitados não podem mais acomodar partículas; d) Nesse ponto, as partículas começam a ocupar coletivamente o estado fundamental, descritas por uma única função de onda macroscópica; e–f) Para temperaturas muito abaixo da crítica ($T \ll T_c$), ocorre o condensado de Bose-Einstein, com todas as partículas no estado fundamental, formando um sistema coerente descrito por uma única função de onda. 21
- Figura 3 – Interação entre dois dipolos magnéticos separados por r , formando um ângulo θ entre a direção do momento dipolar e o vetor de separação. A interação é atrativa para $\theta = 0^\circ$ (alinhados) e repulsiva para $\theta = 90^\circ$ (lado a lado). . . . 23
- Figura 4 – Potencial harmônico (linha preta) e parte radial do ansatz (linha tracejada azul) para um sistema radialmente congelado no estado fundamental do oscilador harmônico, com r_0 representando a posição do mínimo do potencial. 28
- Figura 5 – Ilustração qualitativa do sistema, representando átomos dipolares distribuídos ao longo de uma casca esférica, com seus momentos de dipolo alinhados ao longo do eixo z 37
- Figura 6 – Energia em função de L_{max} 39
- Figura 7 – Distribuições espaciais dos harmônicos esféricos Y_l^0 para $l = 0, 2, 4, 6$ 40
- Figura 8 – Distribuição angular da densidade em função de θ para diferentes valores de ϵ_{dd} , onde valores pequenos de ϵ_{dd} correspondem ao regime de interação dipolar fraca, enquanto valores grandes indicam um regime fortemente dipolar. 41
- Figura 9 – A imagem mostra dipolos se repelindo nos polos da esfera e se atraindo na região equatorial, devido ao alinhamento dos dipolos na direção z 42

Figura 10 – Ilustração qualitativa do sistema, representando a esfera expandindo e contraindo em torno do estado fundamental.	45
Figura 11 – Frequência do modo monopolo para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$, onde ω_{mon} é a frequência do modo monopolo e ω_0 é a frequência da armadilha. O eixo horizontal representa os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical mostra a frequência normalizada $\omega_{\text{mon}}/\omega_0$	47
Figura 12 – Ilustração qualitativa do sistema, representando a casca esférica deslocando seu centro de massa em torno do estado fundamental.	48
Figura 13 – Frequências do modo de dipolo para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$. A curva vermelha representa a frequência nos eixos x e y ($\omega_{x,y}$), enquanto a curva azul corresponde à frequência no eixo z (ω_z). A curva preta indica o valor constante $\omega_0/\sqrt{3}$ para qual os valores das frequências $\omega_{x,y}$ e ω_z convergem no regime de ϵ_{dd} tendendo a 0. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta as frequências normalizadas por ω_0	50
Figura 14 – Ilustração qualitativa do sistema, representando a casca esférica oscilando em torno do estado fundamental com os eixos x e y fora de fase e o eixo z estático.	51
Figura 15 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0	52
Figura 16 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 10$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0	53
Figura 17 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 30$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0	54
Figura 18 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 35$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0	54

Figura 19 – Representação esquemática do modo quadrupolar 3D, caracterizado por oscilações fora de fase nos três eixos espaciais. As subfiguras ilustram: (a) o estado fundamental; (b) alongamento na direção y ; (c) retorno ao estado fundamental; (d) alongamento na direção x ; (e) retorno ao estado fundamental; e (f) alongamento na direção z 56

Figura 20 – Frequências do modo de quadrupolo 3D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad3D} , normalizada por ω_0 57

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CAL	<i>Cold Atom Lab</i>
CBE	Condensado de Bose-Einstein
EGP	Equação de Gross-Pitaevskii
ISS	Estação Espacial Internacional (<i>International Space Station</i>)

LISTA DE SÍMBOLOS

ε_{dd}	Parâmetro relativo de interação
λ_{dB}	Comprimento de onda térmico de de Broglie
μ	Potencial químico
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo
Ω	Ângulo sólido
ω_0	Frequência da armadilha
ω^{upper}	Limite superior para frequências de excitações
ω_{mon}	Frequência de excitação do modo monopolo
ω_{quad3D}	Frequência do modo quadrupolo 3D
$\omega_{x,y}$	Frequência de excitação do modo dipolo para o eixo x e y
ω_z	Frequência de excitação do modo dipolo para o eixo z
$\mathcal{A}$	Constante de normalização
$\hat{A}$	Operador de excitação
$a_{l,m}$	Coefficientes de expansão da função angular
E_{Bubble}	Energia de confinamento do tipo bolha
E_{dd}	Energia dipolo-dipolo
E_{δ}	Energia de contato
E_{int}	Energia de interação
E_{kin}	Energia cinética
E_{trapp}	Energia de confinamento
$\mathbb{F}$	Operador transformada de Fourier
M	Massa atômica
m_p	Momento de excitação
$\mathbf{m}_n$	Momento de dipolo magnético
N	Número de partículas
R_0	Raio médio da nuvem atômica

R_1	Espessura da nuvem atômica
r_0	Mínimo de potencial da armadilha
V_δ	Pseudo-potencial de contato
V_{Bubble}	Potencial de confinamento do tipo bolha
V_{dd}	Potencial de interação dipolo-dipolo
V_{int}	Potencial de interação entre duas partículas
Y_l^m	Harmônicos esféricos

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
1.1	Este trabalho	17
2	CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN	19
2.1	Estatística de Bose-Einstein	19
2.1.1	<i>Condensação em gases de Bose ideais</i>	20
2.2	Interações de contato e dipolar	22
2.3	Equação de Gross-Pitaevskii	24
3	ENERGIA TOTAL DO SISTEMA	27
3.1	Ansatz	27
3.2	Energia de Confinamento	30
3.3	Energia Cinética	30
3.4	Energia de contato	32
3.5	Energia de interação dipolar	33
3.5.1	<i>Cálculo de $n(\mathbf{k})$</i>	33
3.5.2	<i>Cálculo de $V_{dd}(\mathbf{k})$</i>	34
3.5.3	<i>Cálculo de E_{dd}</i>	35
4	RESULTADOS DO ESTADO FUNDAMENTAL	37
4.1	Parâmetros experimentais	37
4.2	Simetrias	38
4.3	Truncamento do ansatz	39
4.4	Distribuição angular da densidade	40
5	MODOS COLETIVOS	43
5.1	Descrição do método	43
5.2	Modo de Monopolo	45
5.3	Modo de Dipolo	48
5.4	Operador de Quadrupolo 2D ($ \mathbf{m} =2$)	50
5.5	Modo de Quadrupolo 3D($m=0$)	55
6	CONCLUSÃO	58
	REFERÊNCIAS	59

APÊNDICE A – CÁLCULO DA CONTRIBUIÇÃO DE QUARTA ORDEM DA DENSIDADE ANGULAR À ENERGIA DE CONTATO	62
APÊNDICE B – TRANSFORMADA DE FOURIER DO POTENCIAL COULOMBIANO	64
APÊNDICE C – CÁLCULO DAS INTEGRAIS RADIAIS DA ENERGIA DIPOLAR	65
APÊNDICE D – INTEGRAIS ENVOLVENDO AS DERIVADAS DA δ	67

1 INTRODUÇÃO

Tudo começou com os trabalhos de Satyendra Nath Bose [1], que, ao estudar a radiação do corpo negro, considerou que partículas quânticas idênticas são indistinguíveis, ou seja, não é possível diferenciá-las, mesmo em princípio. Essa ideia levou a uma nova forma de tratar sistemas quânticos.

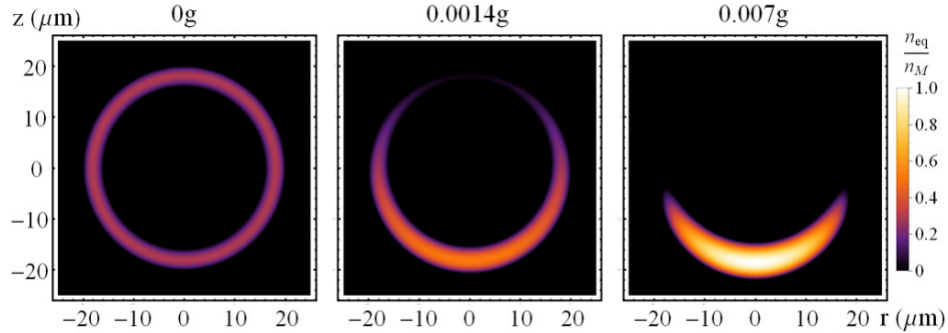
Seu trabalho, inicialmente rejeitado por uma revista científica, foi enviado diretamente a Albert Einstein, que reconheceu sua relevância e o traduziu para o alemão, submetendo-o à *Zeitschrift für Physik*. Inspirado por essa abordagem, Einstein percebeu que a proposta de Bose podia ser aplicada não apenas à luz, mas também a gases formados por partículas massivas. Em 1924 [2], publicou um artigo no qual previu que, ao resfriar um grupo de partículas chamadas bósons até temperaturas muito próximas do zero absoluto, elas tenderiam a ocupar o mesmo estado quântico, o de menor energia — o chamado estado fundamental. Esse fenômeno, previsto apenas com base na estatística quântica, deu origem ao que hoje chamamos de Condensado de Bose-Einstein (CBE).

Apesar de sua importância teórica, essa previsão permaneceu sem verificação experimental por sete décadas, principalmente devido à dificuldade em atingir temperaturas suficientemente baixas. O fenômeno voltou a ganhar atenção com o avanço das técnicas de resfriamento e aprisionamento atômico no final do século XX.

Embora o CBE tenha sido previsto teoricamente em 1925, sua realização experimental só ocorreu 70 anos depois, em 1995, pelos físicos Eric A. Cornell, Carl E. Wieman e Wolfgang Ketterle [3, 4], laureando-os com o Prêmio Nobel de Física em 2001. Desde então, os avanços nas técnicas de resfriamento e aprisionamento atômico têm possibilitado a observação de novos fenômenos quânticos, consolidando o CBE como um dos sistemas mais promissores para a investigação da física de gases quânticos em baixas temperaturas, tais como a superfluidez [5, 6] e a supercondutividade [7].

Com o avanço das técnicas experimentais, tornou-se possível investigar CBE em diversas configurações geométricas de aprisionamento. Uma dessas configurações é o aprisionamento de um gás quântico ultrafrio em uma casca esférica. No entanto, a realização de uma armadilha com formato de bolha em condições terrestres é inviável, uma vez que a gravidade faz com que os átomos se acumulem na parte inferior da armadilha [8], impedindo a formação de uma distribuição por toda a casca (Fig. 1).

Figura 1 – Perfis de densidade de Thomas-Fermi para um condensado de ^{87}Rb em uma armadilha de bolha, com 10^5 átomos, raio externo de $20\mu\text{m}$ e espessura de $4\mu\text{m}$, sob gravidade nula (esquerda), $0,0014g$ (centro) e $0,007g$ (direita). As cores indicam a densidade normalizada por $n_M = 3,1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. A gravidade desloca a densidade para a base da camada condensada.



Fonte: Sun, Padavić, Yang, Vishveshwara e Lannert (2018) [8].

Apesar das limitações impostas pela gravidade terrestre, um laboratório de átomos ultrafrios, o *Cold Atom Lab* (CAL), foi enviado à Estação Espacial Internacional (ISS), tornando possível a realização de experimentos com CBE em cascas esféricas [9]. O ambiente de microgravidade da ISS tem viabilizado a investigação de uma variedade de fenômenos quânticos antes inacessíveis em condições terrestres, abrindo novas fronteiras para o estudo de gases quânticos em topologias não triviais.

1.1 Este trabalho

Nesse contexto, a presente monografia visa contribuir para a compreensão teórica dos condensados de Bose-Einstein confinados em cascas esféricas, um tema de crescente interesse experimental e fundamental. Nosso principal objetivo é replicar e analisar os resultados apresentados no artigo científico *Ground state and collective excitations of a Dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap* [10]. Adotamos a mesma metodologia proposta pelos autores, na qual o CBE é estudado na superfície de uma esfera, assumindo o limite de uma casca suficientemente fina. O estado fundamental é obtido por meio do método variacional, enquanto os modos coletivos são investigados por meio da resposta linear do sistema a uma perturbação externa.

Dado o objetivo deste trabalho, no Capítulo 2 iniciaremos com uma discussão introdutória sobre gases bosônicos, abordando em seguida como as interações interatômicas de contato e dipolo-dipolo influenciam o comportamento do CBE. A partir desse panorama, apresentaremos as principais ferramentas teóricas utilizadas na descrição analítica de condensados de

Bose-Einstein, com ênfase no caso específico de um sistema confinado em uma casca esférica.

Dando continuidade, no Capítulo 3, será desenvolvido o cálculo da expressão da energia total do sistema. As passagens matemáticas mais detalhadas e não triviais serão apresentadas nessa etapa. No entanto, leitores que desejarem apenas compreender os resultados finais podem se concentrar na Seção 3.1, onde definimos a função de onda utilizada, e consultar diretamente as Equações 3.7, 3.13, 3.17 e 3.29, que expressam, respectivamente, as contribuições da energia de confinamento, cinética, de contato e dipolar.

No Capítulo 4, realizamos a minimização da energia total do sistema a fim de determinar suas propriedades no estado fundamental. Considerando que o sistema apresenta simetria azimutal, observamos que, em regimes fortemente dipolares, os átomos do condensado tendem a se concentrar predominantemente na região equatorial da casca esférica. Além disso, verificamos que, para determinados valores da interação dipolar, a largura da distribuição angular atinge uma saturação.

Por fim, no Capítulo 5, apresentamos o formalismo teórico utilizado para a obtenção dos modos coletivos excitados, incluindo os modos de monopolo, dipolo, quadrupolo 2D e 3D, seguidos da exposição de seus respectivos resultados. O capítulo subsequente é dedicado às conclusões deste trabalho, nas quais discutimos as principais contribuições obtidas e possíveis desdobramentos futuros.

2 CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN

Este capítulo não tem a pretensão de substituir as referências clássicas sobre o tema [11, 12, 13, 14, 15], mas busca fornecer uma apresentação concisa e didática dos conceitos fundamentais relacionados à estatística de Bose-Einstein.

Inicialmente, será abordado o formalismo aplicável aos gases de Bose ideais, servindo como base para a compreensão das propriedades coletivas desses sistemas. Em seguida, será discutido o caso mais realista de tais sistemas, nos quais as interações interatômicas desempenham um papel relevante. Por fim, será apresentada a equação de Gross-Pitaevskii (EGP), que é a principal equação utilizada no estudo de CBE.

2.1 Estatística de Bose-Einstein

As partículas podem ser classificadas em dois grupos: aquelas com spin inteiro, denominadas bósons, e aquelas com spin semi-inteiro, chamadas férmions [16]. Nosso interesse neste trabalho recai sobre as partículas que compõem o CBE, ou seja, os bósons.

Para dar início ao estudo de um gás composto por partículas bosônicas, consideramos, inicialmente, o caso ideal de um gás não interagente contendo N partículas idênticas. A função de onda que descreve o estado quântico coletivo do sistema é representada por:

$$\Psi \equiv \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (2.1)$$

em que $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ denota a posição da i -ésima partícula no espaço tridimensional. Por se tratar de partículas bosônicas, a função de onda deve ser simétrica em relação à troca de quaisquer duas partículas, isto é:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (2.2)$$

conforme discutido em [11]. Essa propriedade reflete a natureza indistinguível dos bósons.

Essa condição implica que um estado quântico do sistema é completamente especificado pelo conjunto de números $\{n_j\}$, em que o índice j indica o estado quântico associado a um determinado orbital, e n_j representa o número de partículas que o ocupam. No caso dos bósons, não há restrição quanto à ocupação de um mesmo estado j , sendo possível que qualquer número de partículas — de zero até o total presente no sistema — ocupe simultaneamente esse estado quântico.

A energia total do sistema é dada pela soma ponderada das energias dos estados pelos seus respectivos números de ocupação:

$$E = \sum_j n_j \varepsilon_j, \quad (2.3)$$

em que ε_j denota a energia do orbital j . Além disso, o número total de partículas N é definido pela soma dos números de ocupação:

$$N = \sum_j n_j. \quad (2.4)$$

No formalismo da mecânica estatística [11, 13], considerando o ensemble grande canônico, a função de partição do sistema pode ser expressa levando em conta o potencial químico μ_q , que representa a energia necessária para inserir uma partícula adicional ao sistema. Para os bósons, o somatório que define a função de partição varia o número de partículas ocupando cada estado de zero até o total N . A convergência dessa soma exige que a condição $\exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu_q)] < 1$ seja satisfeita para todos os estados j , o que implica que o potencial químico deve ser estritamente menor que o menor valor de energia do sistema (geralmente zero), ou seja, $\mu_q < 0$.

Sob essas condições, o número médio de partículas ocupando o estado j é descrito pela distribuição de Bose-Einstein, dada por:

$$\langle n_j \rangle_{BE} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j - \mu_q)} - 1}, \quad (2.5)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, com k_B sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Esta expressão garante que $\langle n_j \rangle_{BE}$ seja não negativa, respeitando as propriedades físicas do sistema. Para facilitar a análise do efeito do potencial químico, é comum utilizar a fugacidade, definida como

$$z = e^{\beta \mu_q}, \quad (2.6)$$

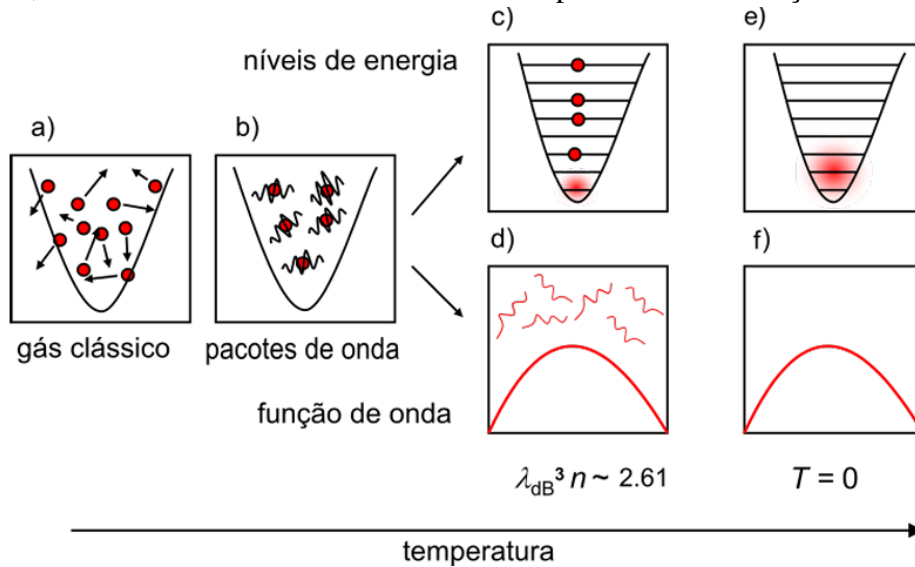
que permite reescrever a distribuição de maneira mais compacta e intuitiva [11, 17].

2.1.1 Condensação em gases de Bose ideais

Com a função de distribuição de Bose-Einstein em mãos, é possível analisar sua principal consequência: a condensação de Bose-Einstein (CBE). A partir da Eq. 2.5, Einstein

previu que, abaixo de uma determinada temperatura T_c (temperatura crítica), o número de partículas no estado fundamental do gás aumentaria devido unicamente à estatística quântica. No limite em que $T = 0$, todas as partículas se condensariam nesse estado. Do ponto de vista quântico, esse estado é interpretado como uma onda de matéria coerente, resultante da superposição das ondas de de Broglie associadas às partículas (Fig. 2)

Figura 2 – A figura ilustra o comportamento típico de um gás bosônico em função da temperatura: a) Em altas temperaturas, o gás segue a estatística clássica de Maxwell-Boltzmann; b) Ao reduzir a temperatura, surgem efeitos quânticos e ondulatórios, exigindo o uso da estatística de Bose-Einstein; c) No ponto de saturação, os estados excitados não podem mais acomodar partículas; d) Nesse ponto, as partículas começam a ocupar coletivamente o estado fundamental, descritas por uma única função de onda macroscópica; e–f) Para temperaturas muito abaixo da crítica ($T \ll T_c$), ocorre o condensado de Bose-Einstein, com todas as partículas no estado fundamental, formando um sistema coerente descrito por uma única função de onda.



Fonte: [17].

Além da Eq. 2.5, ao analisar o comprimento de onda térmico de de Broglie,

$$\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}}, \quad (2.7)$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck reduzida e M a massa atômica, observa-se que, na temperatura crítica $T = T_c$, a distância média entre os átomos se torna comparável a λ_{dB} . Essa condição favorece a sobreposição das ondas de de Broglie (Fig. 2d) e a ocupação macroscópica do estado fundamental (Fig. 2c), caracterizando o surgimento do condensado de Bose-Einstein.

2.2 Interações de contato e dipolar

Embora a distribuição de Bose-Einstein preveja o fenômeno da CBE, é importante destacar que ela não descreve com precisão os resultados experimentais. Isso ocorre porque o formalismo estatístico adotado desconsidera as interações entre as partículas, as quais desempenham um papel essencial em condensados reais [18]. Diante disso, passamos a tratar das interações que surgem na descrição de um gás quântico não ideal.

Iniciamos pelas interações de contato, caracterizadas por serem de curto alcance e isotrópicas. Tais interações correspondem essencialmente às forças de Van der Waals e, por meio da teoria de espalhamento, é possível demonstrar que o parâmetro mais relevante na descrição desse tipo de sistema quântico é o comprimento de espalhamento na onda- s , denotado por a_s .

O potencial comumente utilizado para descrever esse tipo de interação é dado por

$$V_\delta = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.8)$$

sendo conhecido como pseudo-potencial de contato. A presença da função delta de Dirac, $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, evidencia o caráter isotrópico e de curto alcance dessas interações. Além disso, o parâmetro a_s , que representa o comprimento de espalhamento na onda- s , pode ser controlado experimentalmente por meio da aplicação de campos magnéticos. Essa técnica, denominada ressonância de *Feshbach* [19, 20], é amplamente estabelecida e permite um controle preciso sobre as interações de contato, possibilitando a transição entre regimes repulsivos e atrativos, ou até mesmo a supressão efetiva da interação.

Dado que a interação de contato é a primeira a emergir em sistemas bosônicos não ideais e pode ser controlada ou mesmo suprimida experimentalmente, torna-se viável utilizar átomos com alto momento de dipolo magnético, como disprósio, érbio ou cromo. Nessas condições, ao eliminar-se a interação de contato, as interações dipolo-dipolo passam a dominar o comportamento do sistema. Tais interações são anisotrópicas e de longo alcance, exercendo um efeito coletivo marcante sobre o condensado, alterando sua estrutura e propriedades globais. Uma característica notável é que, sob confinamento harmônico, o gás dipolar tende a se alongar ao longo da direção de polarização, refletindo a natureza direcional da interação dipolar [21].

A interação entre dois dipolos magnéticos é descrita pelo seguinte potencial:

$$V_{dd} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\mathbf{m}_1 \cdot \hat{r})(\mathbf{m}_2 \cdot \hat{r}) - \mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2}{r^3}, \quad (2.9)$$

em que μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, $\mathbf{m}_1$ e $\mathbf{m}_2$ são os momentos de dipolo magnético, $\hat{r}$ é o vetor unitário que conecta os dois dipolos, e r é a distância entre eles. Adicionalmente,

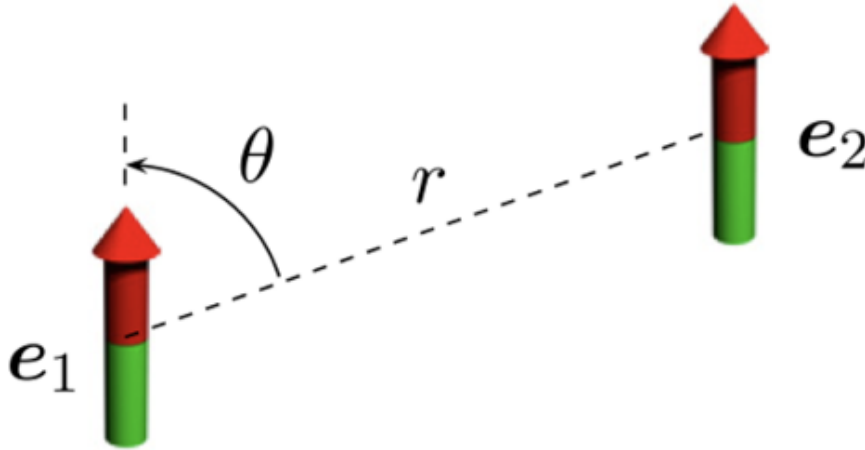
a anisotropia dessa interação se manifesta da seguinte forma: ela é repulsiva quando dois dipolos estão lado a lado e atrativa quando estão alinhados, um acima do outro.

Neste trabalho, consideramos um gás monoatômico no qual todos os átomos possuem o mesmo momento de dipolo magnético, ou seja, $\mathbf{m}_1 = \mathbf{m}_2 = \mu$, e estão alinhados ao longo da direção $\hat{z}$. Com essa suposição, o potencial de interação dipolar assume a forma simplificada:

$$V_{dd} = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \left(\frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3} \right), \quad (2.10)$$

onde θ é o ângulo entre a direção de polarização (eixo z) e o vetor $\mathbf{r}$ que conecta os dipolos como mostra a Fig. 3.

Figura 3 – Interação entre dois dipolos magnéticos separados por r , formando um ângulo θ entre a direção do momento dipolar e o vetor de separação. A interação é atrativa para $\theta = 0^\circ$ (alinhados) e repulsiva para $\theta = 90^\circ$ (lado a lado).



Fonte: [21] .

Por fim, para dar continuidade a este trabalho, é fundamental definir uma grandeza que quantifique a força relativa entre as interações de contato e dipolares. Inicialmente, definimos a intensidade da interação dipolar por meio do parâmetro

$$a_{dd} = \frac{C_{dd} m}{12\pi \hbar^2}, \quad (2.11)$$

onde $C_{dd} = \mu_0 \mu^2$. A partir disso, podemos estabelecer a seguinte razão, que expressa a força relativa entre as duas interações discutidas:

$$\epsilon_{dd} = \frac{a_{dd}}{a_s} = \frac{C_{dd}}{3g}, \quad (2.12)$$

Sendo a_s o comprimento de espalhamento de onda-s e g o parâmetro de acoplamento associado à interação de contato, que controla a intensidade dessa interação no sistema.

2.3 Equação de Gross-Pitaevskii

Como discutido, a maior parte das partículas no condensado de Bose-Einstein encontra-se no estado fundamental. Dessa forma, uma descrição precisa do sistema pode ser obtida ao focar exclusivamente nesse estado. As teorias desenvolvidas para esse propósito culminam em uma única equação fundamental: a equação de Gross-Pitaevskii. Essa equação, derivada independentemente por E. Gross [22] e L. Pitaevskii [23], é análoga à equação de Schrödinger, porém apresenta um termo não linear que incorpora o efeito do potencial de interação entre os átomos.

Para dar início a essa discussão, consideramos o formalismo da segunda quantização, que descreve a física de muitos corpos [24]. O principal objeto nesse formalismo são os operadores de campo $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$ (operador de destruição) e seu conjugado hermitiano $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ (operador de criação).

Ao se assumir a presença de um condensado de Bose-Einstein, é razoável considerar que os operadores de campo se aproximem de seus valores médios [25], ou seja:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) + \Delta\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \quad (2.13)$$

onde

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (2.14)$$

Nesse contexto, $\Delta\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$ representa uma pequena flutuação em torno do valor médio e pode ser desprezada. Assim, obtemos:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{e} \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (2.15)$$

Dessa forma, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ passa a representar a função de onda do sistema. Sendo assim, é natural que a integral de seu módulo quadrado sobre todo o espaço corresponda ao número total de partículas N , o que nos leva à seguinte condição de normalização:

$$N = \int \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}, \quad (2.16)$$

a qual é, de fato, verificada na prática.

As demais grandezas físicas também passam a ser expressas em termos de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ e $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$. Por exemplo, a energia cinética do sistema, considerando partículas de massa M , é dada por:

$$E_{\text{kin}} = \frac{\hbar^2}{2M} \int |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r, \quad (2.17)$$

enquanto a energia associada a um potencial externo de confinamento $V(\mathbf{r}, t)$ é expressa por:

$$E_{\text{trapp}} = \int \Psi(\mathbf{r}, t) V(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d^3 r. \quad (2.18)$$

Já a energia correspondente à interação entre as partículas envolve mais do que apenas a função de onda e sua conjugada. Para uma interação do tipo par, essa energia é descrita por:

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, t) \Psi^*(\mathbf{r}_2, t) V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \Psi(\mathbf{r}_1, t) \Psi(\mathbf{r}_2, t) d^3 r_1 d^3 r_2, \quad (2.19)$$

em que V_{int} é o potencial de interação entre as duas partículas.

Dessa forma, para determinarmos o estado fundamental do sistema, fazemos uso da relação

$$E_0 = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle,$$

em que $\hat{H}$ representa a Hamiltoniana do sistema. Neste contexto, assumimos que a função de onda não depende explicitamente do tempo, ou seja, $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi_0(\mathbf{r})$. Tal suposição é válida pois, no estado fundamental, o sistema se encontra em equilíbrio estático, e portanto não evolui temporalmente. Assim, a energia total do sistema é expressa por:

$$E_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \int |\nabla \Psi_0(\mathbf{r})|^2 d^3 r + \int |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 V(\mathbf{r}) d^3 r + \frac{1}{2} \int |\Psi_0(\mathbf{r}_1)|^2 V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\Psi_0(\mathbf{r}_2)|^2 d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (2.20)$$

Para determinarmos a energia E_0 , é necessário propor um *ansatz* adequado para Ψ_0 , de modo que a função de onda incorpore todos os parâmetros relevantes do sistema em estudo. A partir desse *ansatz*, podemos calcular explicitamente a energia total utilizando a Eq. (2.20). Após fixar os parâmetros determinados pelas condições físicas do problema, restam alguns parâmetros livres, que podem ser ajustados por meio do método variacional. Esse método consiste em minimizar a energia E_0 em relação a esses parâmetros livres, permitindo encontrar uma aproximação para o estado fundamental do sistema.

O resultado dessa minimização é a chamada equação de Gross-Pitaevskii, a equação fundamental no estudo do CBE:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_{\text{trap}} + V_{\text{eff}} - \mu_q \right) \Psi_0 = 0, \quad (2.21)$$

onde μ_q é o potencial químico, que surge como um multiplicador de Lagrange associado à condição de normalização da função de onda e $V_{\text{eff}} = \int V_{\text{int}} |\Psi_0|^2 d^3 r$ [17, 26].

Neste trabalho, consideramos um potencial harmônico do tipo bolha, conhecido como *bubble trap*:

$$V_{\text{Bubble}} = \frac{1}{2}M\omega_0^2(r - r_0)^2, \quad (2.22)$$

Trata-se de um potencial esfericamente simétrico cujo mínimo está deslocado de uma distância r_0 , a qual define o raio médio do condensado. O parâmetro ω_0 , que representa a frequência da armadilha, controla a espessura da casca esférica formada pelo condensado.

3 ENERGIA TOTAL DO SISTEMA

Neste capítulo, a fim de utilizarmos o método variacional na obtenção do estado fundamental, obteremos a expressão analítica da energia do sistema. Para isso, definimos a função de onda e, como primeiro passo, realizamos sua normalização. Em seguida, calculamos as contribuições da energia de aprisionamento, da energia cinética, da energia de contato e da energia de interação dipolar.

3.1 Ansatz

Assumimos um ansatz da forma:

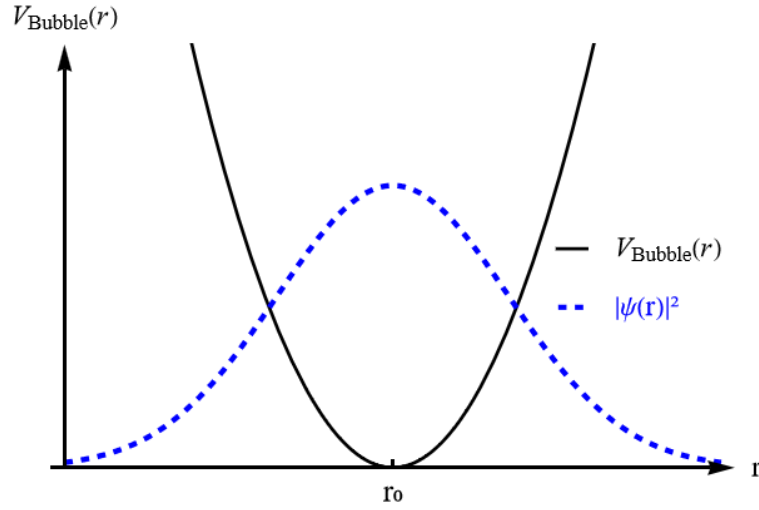
$$\Psi(\mathbf{r}) = \mathcal{A} \mathcal{F} \left(\frac{r - R_0}{R_1} \right) \times h(\theta, \phi),$$

em que R_0 é o raio médio da nuvem atômica, R_1 sua espessura, $\mathcal{A}$ é uma constante de normalização, e $h(\theta, \phi)$ representa a parte angular da função de onda. Nosso interesse é no limite de casca fina, caso em que $R_0 \gg R_1$. Isso faz com que a energia cinética seja consideravelmente maior que as demais. Por este motivo, utilizaremos um ansatz gaussiano adequado para tal regime [8, 27], de forma que $\mathcal{F}(x) = \exp\left(\frac{-x^2}{2}\right)$. Tal ansatz, nos fornece um sistema radialmente congelado no estado fundamental de um oscilador harmônico (Figura 4) e que no limite de casca fina, possui a propriedade de se reduzir à distribuição delta de Dirac:

$$\lim_{\frac{R_1}{R_0} \rightarrow 0} \frac{R_0}{R_1 \sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2} (u - 1)^2 \right] = \frac{R_0}{R_1 \sqrt{\pi}} \mathcal{F}^2 \left[-\frac{R_0}{R_1} (u - 1) \right] = \delta(u - 1), \quad (3.1)$$

sendo $u = \frac{r}{R_0}$.

Figura 4 – Potencial harmônico (linha preta) e parte radial do ansatz (linha tracejada azul) para um sistema radialmente congelado no estado fundamental do oscilador harmônico, com r_0 representando a posição do mínimo do potencial.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tendo definido a parte radial da função de onda, podemos agora determinar a forma de sua dependência angular. Para simplificar essa dependência, utilizaremos os harmônicos esféricos. Essa escolha é especialmente conveniente, pois os harmônicos esféricos são as autofunções do operador momento angular ao quadrado, sendo a forma mais prática de descrever a dependência angular na superfície de uma esfera. Assim, h é escrito da seguinte maneira

$$h(\theta, \phi) = \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi), \quad (3.2)$$

cujos coeficientes $a_{l,m}$ respeitam a condição de normalização

$$\sum_{l,m} a_{l,m}^* a_{l,m} = 1. \quad (3.3)$$

A soma de tais coeficientes é uma forma de quantificar a contribuição de cada componente (l, m) na expansão da função em termos dos harmônicos esféricos. Essa expansão é comum em sistemas com simetria esférica, onde a função considerada, como uma função de onda, é decomposta em uma base ortonormal de funções angulares. Cada coeficiente $a_{l,m}$ representa o peso da contribuição do modo (l, m) , e o produto $a_{l,m}^* a_{l,m} = |a_{l,m}|^2$ corresponde à intensidade (ou densidade) associada a esse modo específico.

É importante destacar que os coeficientes $a_{l,m}$ determinam completamente a distribuição angular da função de onda. Portanto, para a obtenção do estado fundamental, o objetivo é encontrar os valores desses coeficientes que minimizam a energia total do sistema. Uma vez especificados os parâmetros físicos, como a espécie atômica, a frequência da armadilha e o

número de átomos, a energia passa a depender exclusivamente desses coeficientes. Em outras palavras, $a_{l,m}$ atuam como parâmetros do método variacional aplicado ao problema.

A etapa final para determinar a nossa função de onda é calcular a constante de normalização $\mathcal{A}$, que será obtida por meio da condição (Eq. 2.16):

$$N = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}).$$

Nesta equação, N representa o número de átomos no condensado, conforme discutido no Capítulo 2. Além disso, todas as integrais a partir deste ponto serão expressas em coordenadas esféricas. Dessa forma, a equação acima pode ser reescrita como:

$$N = \mathcal{A}^2 \sum_{l,m} \sum_{l',m'} a_{l',m'}^* a_{l,m} \int_{\mathbb{R}^+} r^2 \mathcal{F}^2 \left[\frac{r-R_0}{R_1} \right] dr \int_{\Omega} \left(Y_{l'}^{m'} \right)^* Y_l^m d\Omega,$$

sendo $\mathbb{R}^+$ o conjunto dos números reais positivos e Ω o ângulo sólido total delimitado pela superfície esférica. Ademais, a convenção utilizada para a normalização dos harmônicos esféricos será

$$\int_{\Omega} \left(Y_{l'}^{m'} \right)^* Y_l^m d\Omega = \delta_{l',m'} \delta_{l,m}. \quad (3.4)$$

Dessa forma, utilizando as Eqs. 3.3 e 3.4, verifica-se que,

$$N = \mathcal{A}^2 \int_{\mathbb{R}^+} r^2 \mathcal{F}^2 \left[\frac{r-R_0}{R_1} \right] dr.$$

Para resolver esta integral, basta utilizarmos a forma funcional de $\mathcal{F}$, aplicarmos a mudança de variável $r = R_0 u$ e, em seguida, utilizamos a propriedade da Eq. 3.1, obtendo assim a constante de normalização no limite de casca fina:

$$\mathcal{A} = \frac{\sqrt{N}}{R_0 \sqrt{R_1} \pi^{1/4}}. \quad (3.5)$$

Por fim, a função de onda do nosso sistema, válida apenas no regime de casca fina, pode ser expressa como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{N}}{R_0 \sqrt{R_1} \pi^{1/4}} \exp \left[-\frac{R_0^2}{2R_1^2} (u-1)^2 \right] \times \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi). \quad (3.6)$$

Com a função de onda em mãos podemos prosseguir com o cálculo da energia total do sistema.

3.2 Energia de Confinamento

Iniciaremos o cálculo da energia total pela contribuição mais simples de ser determinada: a energia de confinamento. O procedimento é análogo ao realizado na normalização da função de onda. Isso ocorre devido ao potencial de aprisionamento ser isotrópico, assim como a parte radial da função de onda do sistema, que depende exclusivamente de r . A energia associada à armadilha é expressa por:

$$E_{Bubble} = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) V_{Bubble}.$$

Ao substituirmos as expressões do potencial V_{Bubble} e da função de onda, conforme definidos nas Eqs. 2.22 e 3.6, na equação anterior, reconhecemos que as integrais sobre as variáveis angulares resultam, mais uma vez, trivialmente em um e assim como no caso da normalização, substituímos a forma funcional de $\mathcal{F}$, realizamos a mudança de variável $r = uR_0$ e aplicamos o limite de casca fina (Eq. 3.1). Dessa forma, obtemos a seguinte expressão:

$$E_{Bubble} = \frac{1}{2} \mathcal{A}^2 M \omega_0^2 R_0^4 R_1 \sqrt{\pi} \left(1 - \frac{r_0}{R_0}\right)^2.$$

Substituindo a Eq.3.5 na expressão acima, obtemos a energia de confinamento no limite de casca fina:

$$E_{Bubble} = \frac{NM\omega_0^2 R_0^2}{2} \left(1 - \frac{r_0}{R_0}\right)^2. \quad (3.7)$$

É importante destacar a diferença entre r_0 e R_0 : r_0 representa o mínimo do potencial da armadilha, enquanto R_0 , como mencionado anteriormente, corresponde ao raio médio da nuvem atômica.

3.3 Energia Cinética

A energia cinética, por sua vez, é dada pela seguinte expressão (Eq. 2.17):

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2M} \int ||\nabla \Psi(\mathbf{r})||^2 d^3x,$$

onde $||\nabla \Psi(r)||^2$, será escrito em coordenadas esféricas. No entanto, no cálculo da energia cinética, surgem naturalmente três integrais, cada uma correspondente a uma derivada parcial da função de onda, ficamos então com:

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2M} \left(\int d^3x \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right|^2 + \int d^3x \frac{1}{r^2} \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \theta} \right|^2 + \int d^3x \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \phi} \right|^2 \right). \quad (3.8)$$

Observando a Eq.3.8, identificamos a presença de três integrais a serem resolvidas. Começaremos pelo cálculo da primeira integral, correspondente à parte radial. O primeiro passo consiste em derivar a expressão, elevar o resultado ao quadrado e realizar a substituição $r = uR_0$. Além disso, observa-se que a parte angular, mais uma vez, é trivialmente igual a um:

$$\int d^3x \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right|^2 = \frac{N}{\sqrt{\pi}} \frac{R_0^3}{R_1^5} \int_{\mathbb{R}^+} u^2 (u-1)^2 \exp \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2} (u-1)^2 \right] du. \quad (3.9)$$

para resolver a integral da expressão acima, vamos obter sua expressão analítica utilizando o *software Wolfram Mathematica*, definimos $\alpha = \frac{R_0}{R_1}$ e, ao rearranjar a expressão acima e aplicar o limite de casca fina, no qual $R_0 \gg R_1$ (ou seja, $\alpha \gg 1$), obtemos:

$$\frac{N}{\sqrt{\pi}} \frac{R_0^3}{R_1^5} \left[\frac{1}{8\alpha^5} \left(\underbrace{\sqrt{\pi}\alpha^2(2+3/\alpha^2)}_{=0} \underbrace{(\text{erf}(\alpha)+1)}_{=1} + \underbrace{2e^{-\alpha^2}\alpha}_{=0} \right) \right] = \frac{N}{2R_1^2}, \quad (3.10)$$

tal valor corresponde ao resultado da primeira integral presente na expressão da energia cinética.

Agora, iremos tratar o segundo termo da Eq. 3.8, que corresponde à derivada na direção polar:

$$\int \frac{1}{r^2} \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \theta} \right|^2 d^3x = \mathcal{A}^2 R_0 \int_{\mathbb{R}^+} \exp \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2} (u-1)^2 \right] du \times \int_{\Omega} \left| \frac{\partial}{\partial \theta} [h(\theta, \phi)] \right|^2 d\Omega, \quad (3.11)$$

observe que a parte radial da Eq. 3.11 já foi expressa com a substituição $r = uR_0$. A partir deste ponto, essa substituição será considerada de forma implícita sempre que necessária, sem menções adicionais. Para resolver a integral radial em questão, utilizaremos novamente o *software Wolfram Mathematica*, com o objetivo de obter uma expressão analítica e, em seguida, aplicar o limite de casca fina. Logo,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^+} \exp \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2} (u-1)^2 \right] du &= \frac{\sqrt{\pi} R_1}{2R_0} \left(1 + \underbrace{\text{erf}[R_0/R_1]}_{=1} \right) \\ &\approx \frac{\sqrt{\pi} R_1}{R_0}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Antes de calcular a integral angular da Eq. 3.11, é importante observar que a última integral da Eq. 3.8 segue o mesmo procedimento, já que a dependência radial é idêntica à da expressão previamente calculada. Assim, com base nas Eqs. 3.8, 3.10, 3.11 e 3.12, podemos expressar um resultado preliminar para a energia cinética como:

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{N}{R_0^2} \left\{ \frac{R_0^2}{2R_1^2} + \int_{\Omega} \left[\left| \frac{\partial}{\partial \theta} [h(\theta, \phi)] \right|^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left| \frac{\partial}{\partial \phi} [h(\theta, \phi)] \right|^2 \right] d\Omega \right\},$$

Para resolver a integral angular, substituímos $h(\theta, \phi)$ por sua forma explícita e retiramos os coeficientes $a_{l',m'}^*$ e $a_{l,m}$ das integrais. O que resta é o operador momento angular atuando sobre sua autofunção Y_l^m , resultando na expressão final para a energia cinética:

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{N}{R_0^2} \left\{ \frac{R_0^2}{2R_1^2} + \sum_{l,m} a_{l,m}^* a_{l,m} l(l+1) \right\}. \quad (3.13)$$

3.4 Energia de contato

Por sua vez, a energia de contato é expressa por

$$E_{\delta} = \frac{g}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{x})|^4 d^3x, \quad (3.14)$$

substituímos o nosso ansatz na equação acima e a reescrevemos em coordenadas esféricas, obtendo assim:

$$E_{\delta} = \frac{g \mathcal{A}^4 R_0^3}{2} \int_{\mathbb{R}^+} u^2 \exp \left[-2 \frac{R_0^2}{R_1^2} (u-1)^2 \right] du \times \int_{\Omega} \left| \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \right|^4 d\Omega, \quad (3.15)$$

para determinar a expressão analítica da parte radial da Eq. 3.15, utilizaremos o *software Wolfram Mathematica*. Em seguida, aplicaremos o limite de casca fina para simplificar a expressão e obter um valor aproximado, ficamos então com:

$$\frac{R_1}{16R_0^3} \left[4R_0 R_1 \exp \left(-2 \frac{R_0^2}{R_1^2} \right) + \sqrt{2\pi} (4R_0^2 + R_1^2) \left(1 + \operatorname{erf} \left(\sqrt{2} \frac{R_0}{R_1} \right) \right) \right] \approx \frac{\sqrt{2\pi} R_1}{2R_0},$$

assim, a Eq.3.15 fica,

$$E_{\delta} = \frac{g N^2}{\sqrt{8\pi} R_0^2 R_1} \int_{\Omega} \left| \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \right|^4 d\Omega. \quad (3.16)$$

O passo seguinte é a resolução da integral angular que é obtido em detalhes no Apêndice A. A energia de contato fica:

$$E_{\delta} = \frac{g N^2}{\sqrt{8\pi} R_0^2 R_1} \sum_{l_1, m_1} \sum_{l_2, m_2} \sum_{l_3, m_3} \sum_{l_4, m_4} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2} a_{l_3, m_3}^* a_{l_4, m_4}^* \Delta_{l_1, l_2, l_3, l_4}^{m_1, m_2, m_3, m_4}, \quad (3.17)$$

em que os números $\Delta_{l_1, l_2, l_3, l_4}^{m_1, m_2, m_3, m_4}$ é dado pela Eq. A.5.

3.5 Energia de interação dipolar

Dedicaremos esta seção para o cálculo da energia de interação dipolar que é fornecida pela seguinte expressão:

$$E_{dd} = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{x}) V_{dd}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') n(\mathbf{x}') d^3x d^3x', \quad (3.18)$$

em que $n(\mathbf{x}) = |\Psi(\mathbf{x})|^2$ e V_{dd} é dado pela Eq. 2.9 que nos fornece o comportamento da interação dipolar. Observe que temos duas integrais a serem resolvidas, contudo, sendo $V_{dd}(\mathbf{k})$ a transformada de Fourier de $V_{dd}(\mathbf{x})$, em que, $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$, obtemos uma simplificação para E_{dd} :

$$E_{dd} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{k}) V_{dd}(\mathbf{k}) n(-\mathbf{k}) d^3k. \quad (3.19)$$

Cabe observar que adotamos a convenção em que o fator 2π aparece apenas na transformada direta. Além disso, $n(\mathbf{k})$ corresponde à transformada de Fourier de $n(\mathbf{x})$. Destaca-se que, agora, em vez de duas integrais, temos apenas uma a ser resolvida; contudo, torna-se necessário calcular $V_{dd}(\mathbf{k})$ e $n(\mathbf{k})$ diretamente.

3.5.1 Cálculo de $n(\mathbf{k})$

Na transformada de Fourier, surge o termo $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$, o qual pode ser reescrito por meio da seguinte identidade:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = 4\pi \sum_{l,m} i^l j_l(\mathbf{k}r) Y_l^{m*}(\Omega) Y_l^m(\Omega_k),$$

em que, $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ representa a propagação de uma onda plana na direção z , i^l é uma fase complexa que surge na expansão da onda plana em harmônicos esféricos, $j_l(\mathbf{k}r)$ é a parte radial da função de onda e por fim temos os harmônicos esféricos em que Ω representa os ângulos (θ, ϕ) e Ω_k os ângulos (θ_k, ϕ_k) .

Assim, quando substituirmos $n(\mathbf{x})$ pela sua forma explícita e utilizarmos a identidade acima, teremos um somatório que terá os índices (m_1, m_2, l_1, l_2) , que surgem da função de onda, e os índices (m_3, l_3) que estão presentes na expansão de $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$. De forma a simplificar a notação do somatório de tais coeficientes, utilizaremos a seguinte simplificação $\{m_i, l_i\} = (m_1, m_2, m_3, l_1, l_2, l_3)$. Logo, podemos escrever $n(\mathbf{k})$ da seguinte forma:

$$n(\mathbf{k}) = 4\pi \mathcal{A}^2 \sum_{\{m_i, l_i\}} i^{l_3} a_{l_1 m_1} a_{m_2, l_2}^* Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) \times \left(\int_{\mathbb{R}^+} r^2 j_{l_3}(kr) \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right] dr \right) \left(\int_{\Omega} Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2*}(\Omega) Y_{l_3}^{m_3*}(\Omega) d\Omega \right), \quad (3.20)$$

a integral radial será denotada por $\mathcal{J}_l(k)$ e não será calculada no momento. Já a integral angular será denotada por $\Lambda_{l_1, l_2, l_3}^{m_1, m_2, m_3}$, e o seu cálculo é facilmente feito quando aplicado a propriedade A.2 para os dois últimos harmônicos esféricos da integral angular, assim, nos restará somente o produto de dois harmônicos esféricos que resultará em uma delta de Dirac, nos fornecendo o seguinte resultado para a integral angular:

$$\Lambda_{l_1, l_2, l_3}^{m_1, m_2, m_3} = (-1)^{m_2+m_3} \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^3 (2l_i + 1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ -(m_2+m_3) & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \delta_{m_1, m_2+m_3}. \quad (3.21)$$

A Eq. 3.20 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$n(\mathbf{k}) = 4\pi \mathcal{A}^2 \sum_{\{m_i, l_i\}} i^{l_3} a_{l_1 m_1} a_{m_2, l_2}^* \Lambda_{l_1, l_2, l_3}^{m_1, m_2, m_3} \mathcal{J}_{l_3}(k) Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k),$$

em que $\Lambda_{l_1, l_2, l_3}^{m_1, m_2, m_3}$ é dado pela Eq. 3.21. Vale destacar que, o cálculo $n(-\mathbf{k})$ é idêntico ao cálculo feito para $n(\mathbf{k})$ com a diferença de que os coeficientes serão $(m_4, m_5, m_6, l_4, l_5, l_6)$. Consequentemente, o produto de $n(\mathbf{k})$ e $n(-\mathbf{k})$ é:

$$n(\mathbf{k})n(-\mathbf{k}) = 16\pi^2 \mathcal{A}^4 \sum_{\{l_k, m_k\}} i^{l_3} (-i^{l_6}) \mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} \mathcal{J}_{l_3}(k) \mathcal{J}_{l_6}(k) Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) Y_{l_6}^{m_6}(\Omega_k), \quad (3.22)$$

no qual,

$$\mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} = a_{l_1 m_1} a_{m_2, l_2}^* a_{l_4 m_4} a_{m_5, l_5}^* \Lambda_{l_1, l_2, l_3}^{m_1, m_2, m_3} \Lambda_{l_4, l_5, l_6}^{m_4, m_5, m_6}. \quad (3.23)$$

3.5.2 Cálculo de $V_{dd}(\mathbf{k})$

A interação dipolo dipolo é comumente expressa como:

$$V_{dd} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2}{r^3} - \frac{3(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5} \right],$$

considerando a contribuição das componentes dos dipolos ao longo do vetor de separação $\mathbf{r}$, fazemos uso da seguinte identidade:

$$-\frac{\partial^2}{\partial_i \partial_j} \left(\frac{1}{4\pi\mathbf{x}} \right) = \frac{\delta_{ij} - 3\hat{x}_i \hat{x}_j}{4\pi x^3} + \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}), \quad (3.24)$$

O primeiro termo representa a função de Green do operador laplaciano em três dimensões, utilizada para descrever os potenciais gerados por uma distribuição de carga. O segundo termo descreve a interação das componentes dos dipolos $\mathbf{d}_1$ e $\mathbf{d}_2$ ao longo do vetor de separação $\mathbf{r}$. O

último termo garante que a expressão seja válida para todas as posições no espaço. Isto é, temos que a identidade acima relaciona de forma completamente matemática o potencial de Coulomb e o potencial de interação de dipolo-dipolo.

Aplicando o operador transformada de Fourier na Eq. 3.24 e restringindo o alinhamento dos dipolos na direção $\hat{z}$, teremos:

$$\mathbb{F} \left[\frac{\delta_{ij} - 3\hat{x}_z\hat{x}_z}{4\pi x^3} \right] = k_z^2 \mathbb{F} \left[\frac{1}{4\pi x} \right] - \frac{1}{3},$$

Observe que o lado esquerdo da equação acima corresponde a $V(\mathbf{k})$, enquanto o lado direito, ao ser multiplicado por C_{dd} , fornece a expressão desejada. Resta, portanto, calcular a transformada de Fourier do potencial Coulombiano, apresentada no Apêndice B, a qual nos fornece:

$$V(\mathbf{k}) = C_{dd} \left(k_z^2 \mathbb{F} \left[\frac{1}{4\pi x} \right] - \frac{1}{3} \right) = \frac{C_{dd}}{3} \left(\frac{3k_z^2}{\mathbf{k}^2} - 1 \right), \quad (3.25)$$

observe que a Eq. 3.25 já está praticamente completa. O próximo passo consiste em reescrevê-la em coordenadas esféricas, o que nos permitirá expressar o resultado em termos dos harmônicos esféricos. Assim, temos:

$$V(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{16\pi}{45}} C_{dd} Y_2^0(\theta_k, \phi_k). \quad (3.26)$$

3.5.3 Cálculo de E_{dd}

Por fim, retornemos ao cálculo da Eq. 3.19, para isso, utilizaremos as Eq.s 3.22 e 3.26, que nos fornecerá o seguinte resultado:

$$E_{dd} = \frac{C_{dd} N^2}{\pi^2 R_0^4 R_1^2} \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{\{l_k, m_k\}} i^{l_3} (-i)^{l_6} \mathcal{C}_{l_k, m_k} \int_{\mathbb{R}^+} k^2 \mathcal{J}_{l_3}(k) \mathcal{J}_{l_6}(k) dk \times \int_{\Omega} Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) Y_{l_6}^{m_6}(\Omega_k) Y_{l_2}^{m_0}(\Omega_k) d\Omega, \quad (3.27)$$

vamos iniciar pela integral angular, em que Y_2^0 representa simetria azimutal, e que tal integral nos fornecerá $\Lambda_{l_3, l_6, 2}^{m_3, m_6, 0}$ que é definido pela Eq. 3.21. Tal resultado quando aplicado às propriedades dos símbolos de Wigner (Apêndice B) nos fornece imediatamente:

$$\Lambda_{l_3, l_6, 2}^{m_3, m_6, 0} = \Lambda_{l_3, l_6, 2}^{m_3, m_6, 0} (\delta_{l_3, l_6} + \delta_{l_3+2, l_6} + \delta_{l_3-2, l_6}),$$

utilizando a seguinte igualdade:

$$i^{l_3} (-i)^{l_6} = \begin{cases} 1, & \text{se } l_3 = l_6 \\ -1, & \text{se } l_3 = l_6 \pm 2 \end{cases},$$

a Eq. 3.27, vai ficar da seguinte forma:

$$E_{dd} = \frac{C_{dd}N^2}{\pi^2 R_0^4 R_1^2} \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{\{l_k, m_k\}} \mathcal{C}_{l_k, m_k} \Lambda_{l_3, l_6, 2}^{m_3, m_6, 0} \times \left(\int_{\mathbb{R}^+} k^2 \mathcal{J}_{l_3}(k) \mathcal{J}_{l_6}(k) dk \right) (\delta_{l_3, l_6} - \delta_{l_3+2, l_6} - \delta_{l_3-2, l_6}), \quad (3.28)$$

O passo final consiste em resolver as integrais radiais, que se dividem em três casos correspondentes aos valores distintos das deltas de Kronecker diferentes de zero, ou seja, quando $l_6 = l_3$ e $l_6 = l_3 \pm 2$. Como a resolução dessas integrais é bastante extensa, seus resultados encontram-se no Apêndice C. Logo, no limite de casca fina a expressão da energia dipolar é:

$$E_{dd} = \frac{2N^2 C_{dd}}{3\sqrt{10} R_0^2 R_1} \sum_{l_k, m_k} C_{(l_k, m_k)} \Lambda_{l_3 l_6 2}^{m_3 m_6 0} \times \left[\delta_{l_3 l_6} + \left(1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{R_1}{R_0} (2l+3) \right) \delta_{l_3+2, l_6} + \left(1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{R_1}{R_0} (2l-1) \right) \delta_{l_3-2, l_6} \right]. \quad (3.29)$$

Com isso, finalizamos o cálculo das expressões que compõem a energia total do sistema, as quais são dadas pelas Eqs. 3.7, 3.13, 3.17 e 3.29:

$$E_{total} = E_{bubble} + E_{kin} + E_{\delta} + E_{dd}.$$

Dessa forma, como a energia total é um polinômio de quarto grau nos coeficientes $a_{l,m}$, sua minimização numérica torna-se relativamente simples.

4 RESULTADOS DO ESTADO FUNDAMENTAL

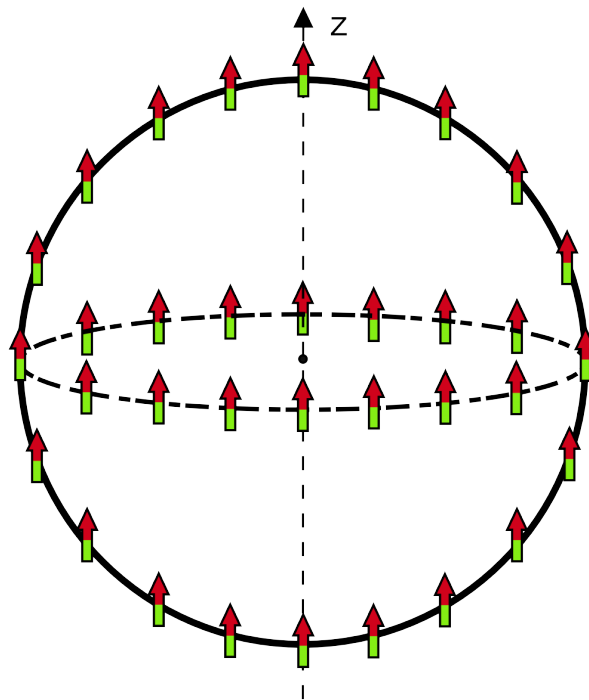
O objetivo deste capítulo é determinar, por meio do método variacional, a energia do sistema. Para isso, utilizaremos uma função teste previamente definida no Capítulo 3, contendo parâmetros ajustáveis. A partir dela, calcularemos a energia total e a minimizaremos numericamente, de modo a obter as propriedades do estado fundamental. Esse procedimento será conduzido em três etapas principais: a escolha dos parâmetros variacionais, a análise das simetrias do sistema e o truncamento do *ansatz*.

4.1 Parâmetros experimentais

Antes de apresentar o estado fundamental, é necessário fazer a análise das interações e simetrias do sistema, pois elas desempenham um papel essencial na simplificação da expressão analítica da energia total, reduzindo o custo computacional no momento da minimização e facilitando a interpretação dos resultados.

Assim, assumiremos que todos os dipolos na esfera estão alinhados ao longo da direção z , conforme ilustrado na Figura 5.

Figura 5 – Ilustração qualitativa do sistema, representando átomos dipolares distribuídos ao longo de uma casca esférica, com seus momentos de dipolo alinhados ao longo do eixo z .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Além disso, é fundamental definir os parâmetros experimentais de modo que os coeficientes $a_{l,m}$ sejam os únicos parâmetros variacionais do sistema. Os parâmetros experimentais adotados para a determinação do estado fundamental são os seguintes:

- Massa atômica do diprósio: $M \approx 2,5 \times 10^{-25} \text{ kg}$;
- frequência de armadilhamento: $\omega_0 = 200 \times 2\pi \text{ Hz} \approx 1,2 \text{ kHz}$;
- Espessura da casca: $R_1 = a_{osc} \approx 5,7 \times 10^{-7} \text{ m}$;
- Mínimo de potencial de armadilha: $R_0 = r_0 = 20R_1 \approx 1,1 \times 10^{-5} \text{ m}$;
- Número de átomos: $N = 10^4$.

4.2 Simetrias

A interação de contato e a armadilha do sistema exibem um caráter isotrópico, o que leva à expectativa de que as distribuições associadas sejam igualmente isotrópicas. No entanto, a interação dipolar destaca-se por apresentar um comportamento anisotrópico. Por essa razão, é precisamente nessa interação que se pode antecipar uma simplificação na energia total do sistema. Ademais, essa anisotropia deve influenciar diretamente a distribuição angular do condensado no estado fundamental, refletindo-se em sua configuração espacial.

Essa influência da anisotropia pode ser melhor compreendida ao analisar as simetrias presentes no sistema. Em particular, no nosso sistema, há duas simetrias principais. A primeira e mais evidente é que V_{dd} não depende de ϕ , ou seja, possui simetria azimutal. Dessa forma, como a distribuição angular é uma combinação linear de harmônicos esféricos, é natural que essa combinação reflita a simetria de V_{dd} . Consequentemente, os coeficientes $a_{l,m}$ com $m \neq 0$ devem ser nulos:

$$a_{l,m} = 0, \forall m \neq 0. \quad (4.1)$$

A interação dipolo-dipolo, resultante do alinhamento dos dipolos ao longo do eixo z , preserva a simetria azimutal e é invariante sob a reflexão $z \rightarrow -z$. Essa é a segunda simetria relevante do sistema. Como os harmônicos esféricos $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ possuem paridade bem definida, apenas termos com l par contribuem para a função de onda, assegurando que a densidade $|\Psi|^2$ mantenha-se simétrica em relação ao plano $z = 0$. Consequentemente, os coeficientes $a_{2l+1,m}$ devem se anular, uma vez que funções ímpares violariam essa simetria. Assim,

$$a_{2l+1,m} = 0, \forall l \in \mathbb{N}. \quad (4.2)$$

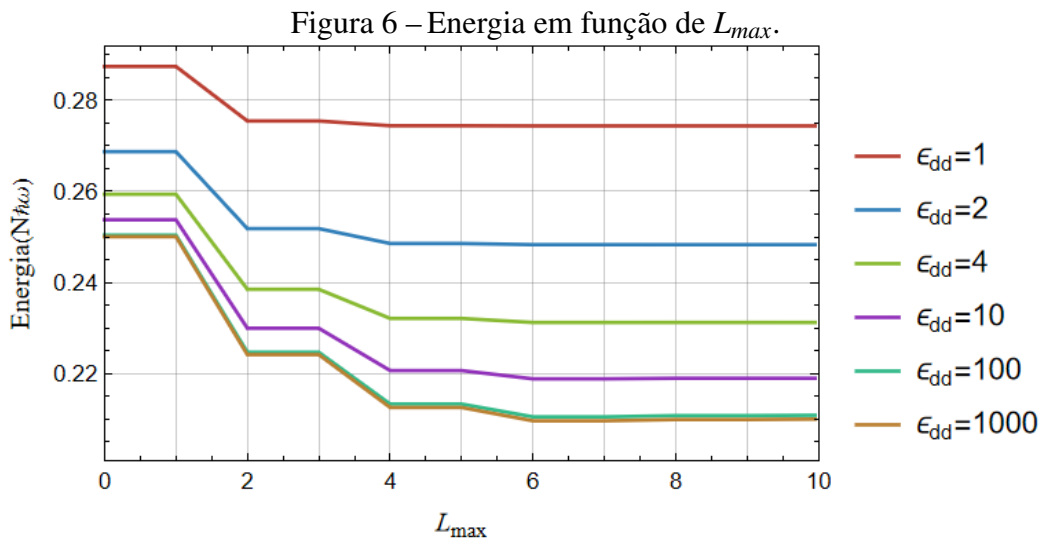
Ambas as hipóteses foram testadas. Para isso, minimizamos a energia sem impor restrições aos valores de l e m , utilizando $l \leq 4$. Observou-se que, de fato, todos os coeficientes $a_{l,m}$ com $m \neq 0$ e coeficientes l ímpares são nulos, conforme esperado. Além disso, com o objetivo de reduzir o custo computacional, optamos por calcular apenas os coeficientes $a_{l,0}$ associados aos valores pares de l .

4.3 Truncamento do ansatz

Agora, realizaremos uma aproximação essencial para viabilizar a obtenção numérica da minimização da energia. É importante observar que todas as somas presentes na expressão da energia total do sistema correspondem a séries. No entanto, como não é possível somar um número infinito de termos, torna-se necessário adotar um valor apropriado para l , que será denominado L_{max} . Essa escolha deve garantir um equilíbrio entre a precisão dos resultados e a eficiência computacional, de modo que a distribuição angular possa ser adequadamente representada por:

$$h(\theta, \phi) \approx \sum_{l=0}^{L_{max}} a_{l,0} Y_l^0(\theta, \phi), \quad (4.3)$$

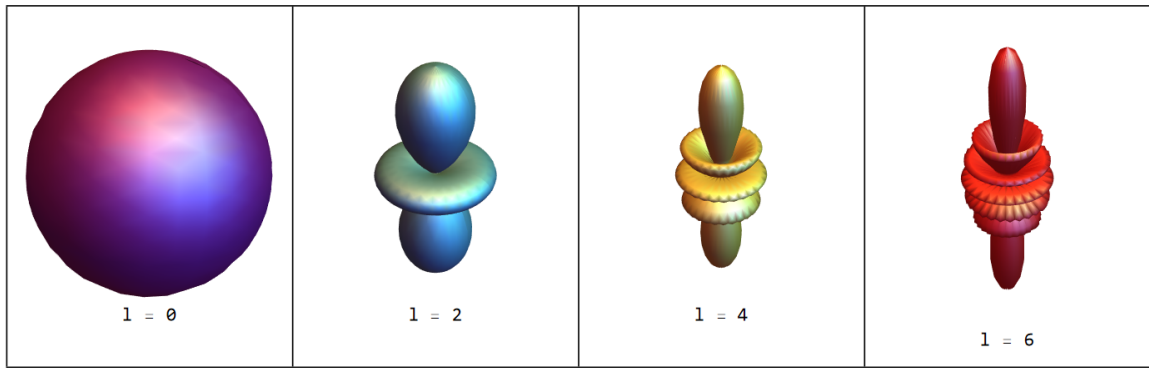
Assim, o critério adotado para determinar o valor de L_{max} foi a análise de um gráfico da energia minimizada em função de L_{max} para diferentes valores de ϵ_{dd} . O valor ideal de L_{max} é aquele a partir do qual a energia se estabiliza, deixando de apresentar variações significativas. A seguir, apresentamos esse gráfico:



Fonte: Elaborada pelo autor.

Vale destacar três características relevantes observadas no gráfico. A primeira é o comportamento decrescente da energia em função de $L_{\max}$, o que sugere que, à medida que se permite maior liberdade para o sistema (com o aumento do número de modos harmônicos considerados), as interações entre as partículas se tornam menos significativas, resultando em uma redução da energia total. Essa tendência pode ser interpretada considerando-se que a energia é expressa em termos dos harmônicos esféricos: à medida que l varia de 0 a 6, diferentes distribuições espaciais da densidade de probabilidade são exploradas como mostrado na Fig. 7.

Figura 7 – Distribuições espaciais dos harmônicos esféricos Y_l^0 para $l = 0, 2, 4, 6$.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A segunda característica refere-se à diminuição da energia com o aumento de ε_{dd} . Esse comportamento pode estar relacionado ao fato de que, em regimes altamente dipolares, as partículas tendem a se organizar de forma mais restrita na casca esférica, o que limita sua liberdade e reduz a energia total do sistema.

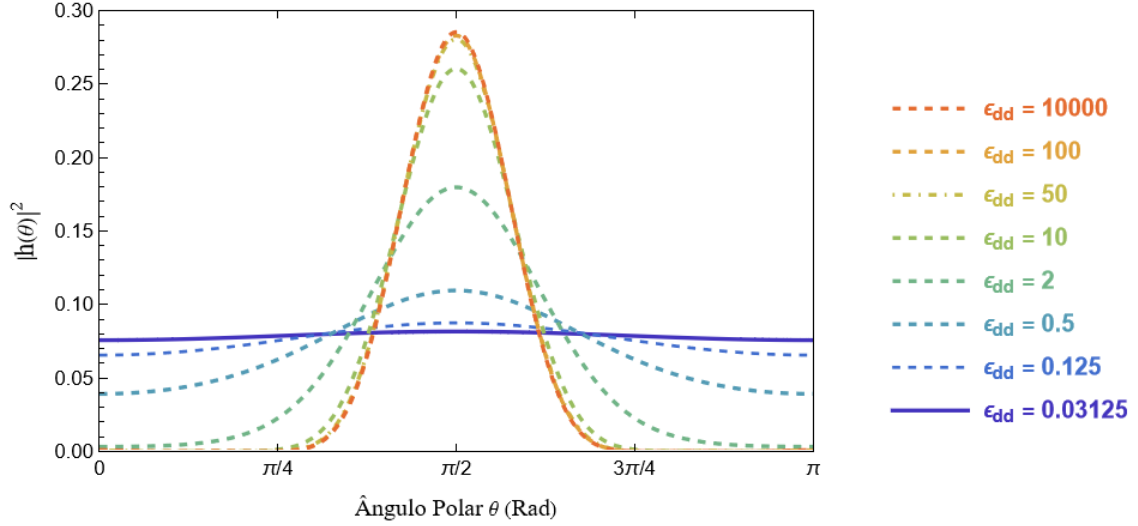
A terceira característica observada diz respeito ao comportamento da energia em função do parâmetro $L_{\max}$. A análise do gráfico indica que valores superiores a $L_{\max} = 6$ podem ser desprezados para qualquer $\varepsilon_{dd} > 0$, uma vez que a energia total permanece praticamente inalterada a partir desse ponto. Além disso, verifica-se que os termos mais relevantes para a energia estão associados a $l = 0$ e $l = 2$, pois apenas as componentes esféricas Y_0^0 e Y_2^0 contribuem de maneira significativa para o resultado final.

4.4 Distribuição angular da densidade

Agora podemos, de fato, analisar o estado fundamental do nosso condensado. Adotamos $L_{\max} = 6$, considerando ainda que o *ansatz* gaussiano está centrado em R_0 e que a distribuição azimutal é homogênea. Dessa forma, a avaliação do estado fundamental é realizada ao longo do

ângulo θ para diferentes regimes de ϵ_{dd} .

Figura 8 – Distribuição angular da densidade em função de θ para diferentes valores de ϵ_{dd} , onde valores pequenos de ϵ_{dd} correspondem ao regime de interação dipolar fraca, enquanto valores grandes indicam um regime fortemente dipolar.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A principal característica observada no gráfico acima é que, à medida que ϵ_{dd} se aproxima de zero, ou seja, conforme a interação dipolar se torna menos relevante no sistema, a densidade do condensado se distribui de maneira mais homogênea. Isso confirma a suposição de que, na ausência da interação dipolar, quando apenas os potenciais isotrópicos estão presentes, a distribuição angular também seria isotrópica.

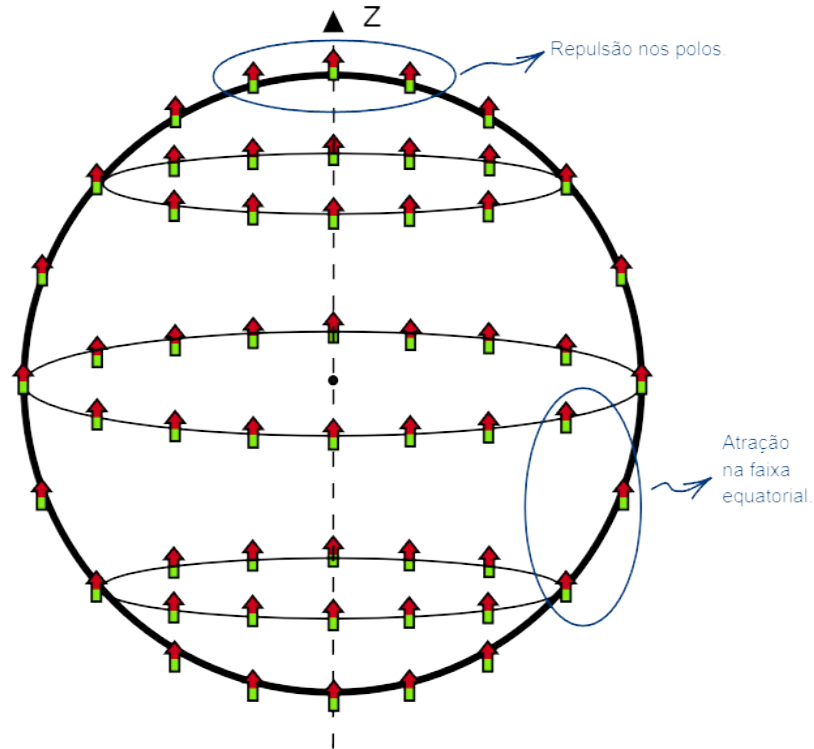
O motivo desse comportamento é simples: a interação dipolo-dipolo é repulsiva quando os dipolos estão lado a lado e atrativa quando estão alinhados. Como todos os dipolos estão alinhados na direção z , em regimes altamente dipolares, os átomos se concentram no equador ($\theta = \frac{\pi}{2}$) da casca esférica. Nos polos, os dipolos estão dispostos lado a lado, o que resulta em interação repulsiva. Já na região equatorial, os dipolos ficam alinhados e mais afastados lateralmente, o que favorece a atração entre eles (Fig.9).

Vale destacar que esse comportamento de agrupamento na região equatorial do condensado no estado fundamental não é típico. Em condensados esféricos cheios, o condensado tende a se alongar na direção da polarização [21], o que evidencia a importância de se estudar diferentes geometrias para os CBE.

A segunda característica importante do estado fundamental refere-se à saturação da largura da distribuição angular para regimes dipolares com $\epsilon_{dd} \geq 50$. A partir de $\epsilon_{dd} = 50$, torna-se energeticamente desfavorável realizar experimentos em regimes altamente dipolares,

pois os resultados tornam-se praticamente idênticos. Isso pode ser observado, por exemplo, ao comparar as curvas para $\epsilon_{dd} = 100$ e $\epsilon_{dd} = 10000$.

Figura 9 – A imagem mostra dipolos se repelindo nos polos da esfera e se atraindo na região equatorial, devido ao alinhamento dos dipolos na direção z



Fonte: Elaborada pelo autor.

5 MODOS COLETIVOS

Neste capítulo, apresentamos o formalismo adotado para a obtenção dos modos coletivos do sistema, com base nas *sum rules*. Por meio desse método, calculamos os principais modos de interesse: monopolo, dipolo, quadrupolo bidimensional e quadrupolo tridimensional. Por fim, apresentamos os resultados correspondentes a cada modo. O modo monopolo será tratado em detalhes, enquanto os demais serão apenas enunciados, com a apresentação dos respectivos valores de frequência, uma vez que o procedimento de cálculo é análogo e repetitivo.

5.1 Descrição do método

Os modos coletivos do condensado serão estudados por meio da resposta linear do sistema (*Linear Response Function*) a uma perturbação aplicada ao seu estado fundamental [28, 29], abordagem apropriada especialmente no regime de baixas frequências. Na prática, tal perturbação é induzida por um potencial oscilante e é representada nos cálculos por um operador $\hat{A}$, cujo formato específico depende do modo coletivo que se deseja investigar.

A equação de autovalores do sistema é dada por:

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad \text{com } E_n \leq E_{n+1}, \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

em que $|n\rangle$ são os autoestados do sistema, e $|0\rangle$ representa o estado fundamental. Assim, a frequência de transição entre o estado fundamental e um estado excitado $|n\rangle$ para um potencial harmônico é definida como:

$$\omega_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar},$$

com $\omega_{10} \leq \omega_{20} \leq \omega_{30} \leq \dots$, por construção. No entanto, surge aqui uma dificuldade: para determinar essas frequências de excitação, é necessário conhecer não apenas o estado fundamental $|0\rangle$, mas também os estados excitados $|n\rangle$. Esse requisito impõe uma limitação prática, uma vez que, na maioria dos casos, o conhecimento completo do espectro de excitações não está prontamente disponível.

Para contornar essa dificuldade, adotamos a abordagem das *sum rules*, que permite estimar a frequência de excitação a partir da seguinte razão [30, 31]:

$$\omega^{upper} = \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m_3}{m_1}}, \quad (5.1)$$

onde m_1 e m_3 são os momentos de excitação ponderados pela energia, definidos como:

$$m_p = \sum_n |\langle 0 | \hat{A} | n \rangle|^2 (\hbar \omega_{n0})^p. \quad (5.2)$$

A Eq. 5.1 fornece um limite superior para a frequência do modo coletivo associado ao operador $\hat{A}$. É importante destacar que ω^{upper} representa, na verdade, um limite superior para a energia de excitação E_{10} induzida pela perturbação. Embora essa frequência não corresponda exatamente à frequência real da excitação, ela apresenta excelente concordância com resultados obtidos por métodos hidrodinâmicos e com observações experimentais em gases quânticos aprisionados, com ou sem interações dipolo-dipolo em armadilhas harmônicas. Por essa razão, adotaremos ω^{upper} como uma boa estimativa da frequência real do modo coletivo.

Observe que, para calcular ω^{upper} , é necessário conhecer os momentos m_1 e m_3 , conforme definidos na Eq. 5.2. No entanto, essa definição envolve explicitamente os autoestados excitados $|n\rangle$, cuja obtenção nem sempre é viável. Felizmente, foi demonstrado em [28] que esses momentos podem ser reescritos em termos de comutadores envolvendo o operador de excitação $\hat{A}$ e o hamiltoniano $\hat{H}$, dispensando assim o conhecimento explícito dos estados excitados:

$$m_1 = \frac{1}{2} \langle 0 | [\hat{A}^\dagger, [\hat{H}, \hat{A}]] | 0 \rangle, \quad (5.3)$$

$$m_3 = \frac{1}{2} \langle 0 | [\hat{A}^\dagger, \hat{H}], [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]] | 0 \rangle, \quad (5.4)$$

o que torna conveniente escrever o Hamiltoniano da seguinte forma:

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_0^2 (r_i - r_0)^2 + \sum_{j < i} [g \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + V_{dd}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)] \right\}, \quad (5.5)$$

onde i denota o índice do i -ésimo átomo, $\mathbf{p}_i$ é o operador momento, $M \omega_0^2 (r_i - r_0)^2$ corresponde ao potencial de confinamento esférico, δ representa a interação de contato, e V_{dd} é o potencial de interação dipolo-dipolo.

Com base no que foi exposto, o procedimento para calcular as frequências dos modos coletivos segue os seguintes passos:

1. Calcula-se o comutador $[\hat{H}, \hat{A}]$;
2. Utiliza-se o resultado anterior para calcular o comutador $[\hat{A}^\dagger, [\hat{H}, \hat{A}]]$;
3. Aplica-se a Eq. 5.3, considerando o regime de casca fina nas médias;
4. Com o resultado do primeiro passo, calcula-se diretamente $[\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]]$;
5. Obtém-se $[\hat{A}^\dagger, \hat{H}]$ a partir do primeiro passo;

6. Calcula-se o comutador $[[\hat{A}^\dagger, \hat{H}], [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]]]$;
7. Aplica-se a Eq. 5.4, utilizando novamente o regime de casca fina nas médias;
8. Finalmente, determina-se a frequência ω do modo estudado por meio da Eq. 5.1.

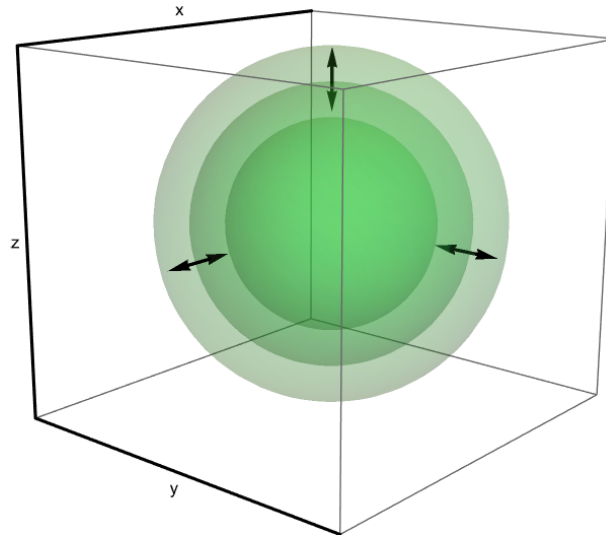
5.2 Modo de Monopolo

O modo monopolo representa o padrão mais simples de oscilação coletiva, caracterizado por expansões e contrações isotrópicas ao longo das três direções espaciais, como ilustrado na Fig. 10. Esse modo é comumente denominado *breathing mode*, em referência ao movimento de expansão e contração semelhante ao de um pulmão durante o processo de respiração. O operador hermitiano associado à excitação desse modo é dado por:

$$\hat{A} = \sum_i r_i^2, \quad (5.6)$$

Vale ressaltar que $r_i = |\mathbf{x}_i|$, onde o índice i se refere a cada partícula do condensado, e $\mathbf{x}_i$ representa sua posição no espaço.

Figura 10 – Ilustração qualitativa do sistema, representando a esfera expandindo e contraindo em torno do estado fundamental.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Iniciamos o cálculo do modo monopolo por meio do momento de ordem um, m_1 , a partir do comutador $[\hat{H}, \hat{A}]$. É importante notar que o operador $\hat{A}$ comuta com o potencial de confinamento, bem como com os termos de interação de contato e dipolar, restando, portanto,

apenas:

$$[\hat{H}, \hat{A}] = \frac{1}{2M} \sum_i [\mathbf{p}_i^2, r_i^2] = -\frac{2i\hbar}{M} \sum_i \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{p}_i + \frac{\hbar}{2i} \right),$$

utilizando a Eq. acima, calculamos $[\hat{A}^\dagger, [\hat{H}, \hat{A}]]$:

$$[\hat{A}^\dagger, [\hat{H}, \hat{A}]] = \frac{4\hbar^2}{M} \sum_i r_i^2,$$

utilizando a Eq. 5.3:

$$m_1 = \frac{4\hbar^2}{2M} \sum_i \langle r_i^2 \rangle = \frac{2\hbar^2}{M} N \langle r^2 \rangle,$$

que ao aplicar o limite de casca fina obtemos:

$$m_1 \approx \frac{2\hbar^2}{M} N r_0^2. \quad (5.7)$$

Uma vez calculado m_1 , passamos ao cálculo do momento de ordem três, m_3 . Como já obtivemos anteriormente o comutador $[\hat{H}, \hat{A}]$, podemos prosseguir diretamente para a avaliação do comutador duplo $[\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]]$:

$$[\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]] = \frac{2\hbar^2}{M} \left\{ -\frac{1}{M} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + M\omega_0^2 \sum_i (r_i^2 - r_i r_0) + g \sum_{i<j} \sum_k \mathbf{x}_k \cdot \nabla_k \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\}.$$

Para o comutador $[\hat{A}^\dagger, \hat{H}]$, pode-se verificar com facilidade, a partir do cálculo de $[\hat{H}, \hat{A}]$, que o resultado é:

$$[\hat{A}^\dagger, \hat{H}] = \frac{2i\hbar}{M} \sum_i \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{p}_i.$$

Assim,

$$\begin{aligned} [[\hat{A}^\dagger, \hat{H}], [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]]] &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \sum_i \left\{ \frac{2\mathbf{p}_i}{M} + M\omega_0^2 (2r_i^2 - \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_0) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i<j} [(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i ((\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j))] \right\} \end{aligned}$$

que utilizando a Eq. 5.4 nos leva a:

$$m_3 = \frac{2\hbar^4}{M^2} (4 \langle T \rangle + 2M\omega_0^2 N \langle r^2 \rangle - M\omega_0^2 r_0 \langle r \rangle + I),$$

em que I é dado por:

$$I = 9g \sum_{i<j} \int n^2(\mathbf{R}) d^3R = 9 \langle H_\delta \rangle,$$

onde $\mathbf{R} = 1/2(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$. As integrais envolvendo a derivadas de δ são obtidas no Apêndice D.

Dado que estamos com a expressão de m_3 calculada, basta aplicarmos o limite de casca fina aos valores esperados, de modo que

$$\langle r^n \rangle \approx r_0^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

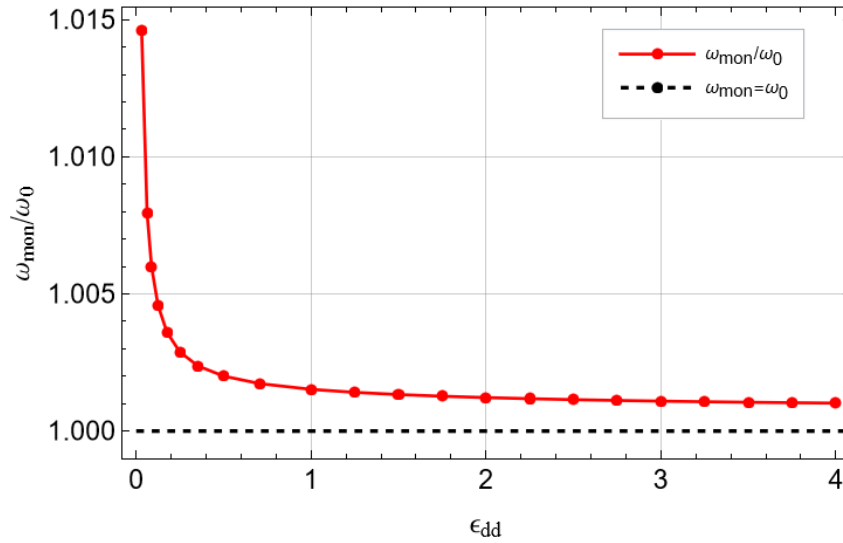
Além disso, o Hamiltoniano H_δ pode ser substituído por H_{int} , incorporando também o valor médio da interação dipolo-dipolo.

$$\omega_{\text{mon}} = \omega_0 \sqrt{\frac{4 \langle T \rangle + M \omega_0^2 N r_0^2 + 9 \langle H_{\text{int}} \rangle}{N M r_0^2 \omega_0^2}}. \quad (5.8)$$

Dessa forma, a frequência do modo monopolo em uma superfície esférica no limite de casca fina é dado pela Eq. 5.8.

O gráfico a seguir mostra o resultado para o modo de monopolo.

Figura 11 – Frequência do modo monopolo para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$, onde ω_{mon} é a frequência do modo monopolo e ω_0 é a frequência da armadilha. O eixo horizontal representa os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical mostra a frequência normalizada $\omega_{\text{mon}}/\omega_0$.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A frequência obtida para o modo monopolar é bastante próxima da frequência da armadilha, apresentando boa concordância com os resultados previstos pelas equações hidrodinâmicas no regime não dipolar [8]. No entanto, à medida que a interação dipolar é aumentada, observa-se uma leve diminuição na frequência, evidenciando uma sutil influência dessa interação. Vale destacar que esse comportamento difere do observado em gases quânticos dipolares confinados em armadilhas harmônicas, nos quais a frequência do modo monopolo tende a ser superior à da armadilha. Assim, esse modo não é o ideal para estudarmos regimes dipolares.

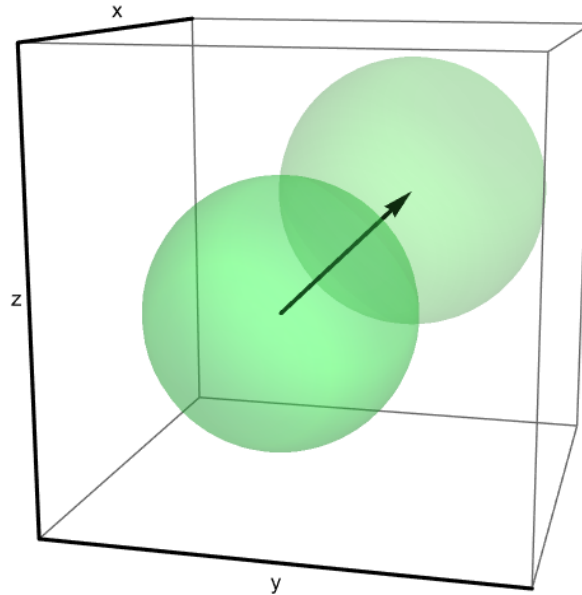
5.3 Modo de Dipolo

Esse modo é caracterizado por oscilações do centro de massa ao longo das três direções espaciais — x , y e z — conforme ilustrado na Fig. 12. O operador que representa esse modo coletivo consiste em três perturbações proporcionais às respectivas coordenadas cartesianas:

$$\hat{A}_{x_\alpha} \propto \sum_i (x_\alpha)_i, \quad (5.9)$$

em que $\alpha = x, y, z$.

Figura 12 – Ilustração qualitativa do sistema, representando a casca esférica deslocando seu centro de massa em torno do estado fundamental.



Fonte: Elaborada pelo autor.

De forma análoga ao cálculo do modo monopolar, o momento m_1 é independente das interações interatômicas, uma vez que envolve apenas operadores espaciais. Assim, é imediato verificar que m_1 resulta em:

$$m_1 = \frac{N\hbar^2}{2M}. \quad (5.10)$$

Assim como ocorre com m_1 , o momento m_3 também apresenta as contribuições das interações interatômicas comutando, de modo que:

$$[\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]] = \hbar^2 \omega_0^2 \left(1 - \frac{r_0}{r_i} \right) x_i,$$

segue então que,

$$[\hat{A}^\dagger, \hat{H}], [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]] = \frac{\hbar^4 \omega_0^2}{M} (N - J_x),$$

em que,

$$J_x \equiv r_0 \sum_i \frac{r_i^2 - x_i^2}{r_i^3} = r_0 \sum_i \frac{y_i^2 + z_i^2}{r_i^3}.$$

Generalizamos tal resultado para os demais eixos, y e z. Assim, reescrevemos a equação acima da seguinte forma:

$$J_\alpha \equiv r_0 \sum_i \frac{r_i^2 - (\mathbf{x}_i)_\alpha^2}{r_i^3}, \quad (5.11)$$

e o momento m_3 fica então:

$$m_3 = \frac{N \hbar^4 \omega_0^2}{2M} \left(1 - \frac{1}{N} \langle 0 | J_\alpha | 0 \rangle \right).$$

Por fim, obtemos a frequência do modo de dipolo:

$$\hbar^2 \omega_\alpha^2 = \frac{m_3}{m_1} \Rightarrow \omega_\alpha = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{1}{N} \langle 0 | J_\alpha | 0 \rangle}, \quad (5.12)$$

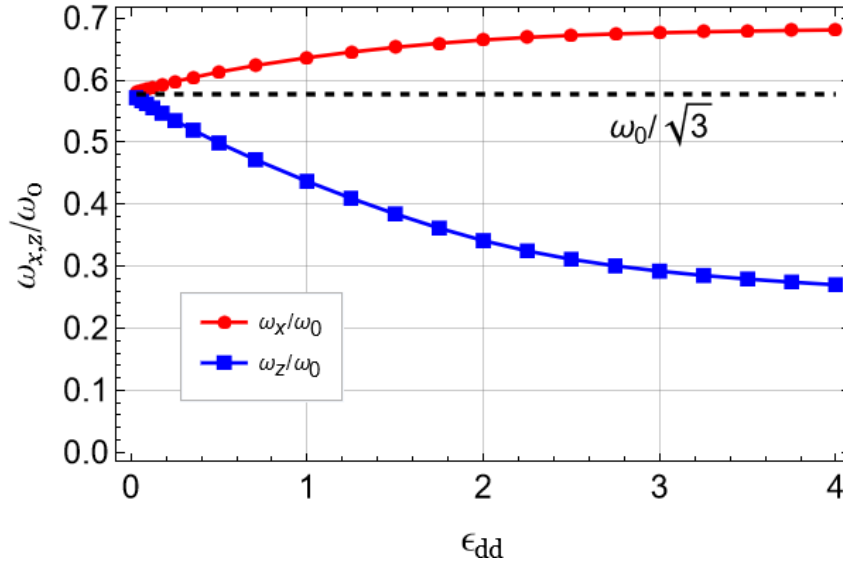
Observa-se que as frequências correspondentes a cada eixo são menores que a frequência da armadilha ω . Além disso, devido à simetria azimutal do estado fundamental discutida na Seção 4.2, temos $\omega_x = \omega_y$, sendo esperado que apenas ω_z apresente um valor distinto. Utilizando então a Eq. 5.12 obtemos

$$\omega_{x,y} = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{r_0}{N} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \frac{r_0}{N} \left\langle \frac{x^2}{r^3} \right\rangle}, \quad (5.13)$$

$$\omega_z = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{r_0}{N} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \frac{r_0}{N} \left\langle \frac{z^2}{r^3} \right\rangle}. \quad (5.14)$$

O gráfico que exprime os resultados das frequências do modo de dipolo é dado a seguir.

Figura 13 – Frequências do modo de dipolo para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$. A curva vermelha representa a frequência nos eixos x e y ($\omega_{x,y}$), enquanto a curva azul corresponde à frequência no eixo z (ω_z). A curva preta indica o valor constante $\omega_0/\sqrt{3}$ para qual os valores das frequências $\omega_{x,y}$ e ω_z convergem no regime de ϵ_{dd} tendendo a 0. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta as frequências normalizadas por ω_0 .



Fonte: Elaborada pelo autor.

As frequências obtidas para ω_x e ω_y diferem dos resultados apresentados na literatura [8], na qual, no regime $\epsilon_{dd} \rightarrow 0$, essas frequências tendem a zero. No entanto, os valores encontrados em nossos cálculos convergem para $\omega_0/\sqrt{3}$. Essa diferença, porém, não representa uma contradição, pois, como discutido na Seção 5.1, nossos resultados correspondem a um limite superior.

Por outro lado, à medida que ϵ_{dd} aumenta, a frequência associada ao eixo z diminui, enquanto a do eixo x aumenta. Esse comportamento é compatível com a forma dos operadores J_x e J_z , que dependem de $\langle x^2 \rangle$ e $\langle z^2 \rangle$, respectivamente. Como discutido anteriormente, em regimes fortemente dipolares, a densidade tende a se concentrar na região equatorial e a diminuir nos polos, o que resulta em um aumento de $\langle x^2 \rangle$ e uma redução de $\langle z^2 \rangle$.

5.4 Operador de Quadrupolo 2D ($|m|=2$)

Esse modo corresponde a uma excitação na qual a componente z permanece inalterada, enquanto as componentes x e y apresentam oscilações fora de fase, resultando em uma deformação quadrupolar no plano xy (como mostra a Fig. 14). Tal modo é identificado por $m = 2$, pois sua descrição em termos dos harmônicos esféricos Y_l^m é proporcional a $Y_2^2 + Y_2^{-2}$ [32]. Em conformidade com a nomenclatura adotada na principal referência utilizada neste estudo [10],

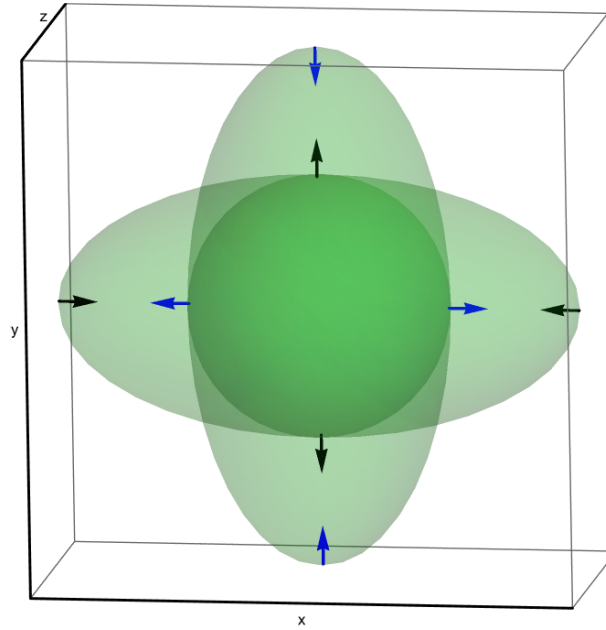
nomearemos este modo de forma equivalente. O operador associado a essa excitação é dado por:

$$\hat{A}_{|m|=2} = \sum_i \{[(\omega_0 + \delta\omega)^2 - \omega_0^2]x_i^2 + [(\omega_0 - \delta\omega)^2 - \omega_0^2]y_i^2\} \approx 2\omega_0\delta\omega \sum_i (x_i^2 - y_i^2),$$

as constantes multiplicativas irão se cancelar devido m_3/m_1 , dessa forma, o operador fica:

$$\hat{A}_{|m|=2} = \sum_i (x_i^2 - y_i^2). \quad (5.15)$$

Figura 14 – Ilustração qualitativa do sistema, representando a casca esférica oscilando em torno do estado fundamental com os eixos x e y fora de fase e o eixo z estático.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Iniciando o cálculo dos comutadores, temos:

$$[\hat{A}^\dagger, [\hat{H}, \hat{A}]] = \left[\hat{A}^\dagger, -\frac{2i\hbar}{M} \sum_i (x_i p_{x_i} - y_i p_{y_i}) \right] = \frac{4\hbar^2}{M} \sum_i (x_i^2 + y_i^2),$$

o momento m_1 fica então:

$$m_1 = \frac{2\hbar^2}{M} \langle \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \rangle,$$

que reconhecendo a simetria azimutal discutido na seção 4.2, obtem-se:

$$m_1 = \frac{4N\hbar^2}{M} \langle x^2 \rangle. \quad (5.16)$$

Verifica-se que:

$$\begin{aligned} [\hat{A}^\dagger, \hat{H}], [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]] &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left\{ \frac{2}{M} (p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2) + 2M\omega_0^2 \left[r_{i\perp}^2 \left(1 - \frac{r_0}{r_i} \right) + \frac{r_0}{2r_i^3} (x_i^2 - y_i^2)^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i < j} \left(X_{ij} \frac{\partial}{\partial X_{ij}} \left[X_{ij} \frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial X_{ij}}(\mathbf{X}_{ij}) + Y_{ij} \frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial Y_{ij}}(\mathbf{X}_{ij}) \right] - 2X_{ij}Y_{ij} \frac{\partial^2 V_{\text{int}}}{\partial X_{ij} \partial Y_{ij}}(\mathbf{X}_{ij}) \right) \right\}, \end{aligned}$$

em que $r_{i\perp}^2 = x_i^2 + y_i^2$ e $X \equiv x_i - x_j$. O termo, $\frac{r_0}{2r_i^3}(x_i^2 - y_i^2)^2$, não contribui ao valor médio, pois, devido à simetria azimutal do estado fundamental, sua média se anula. Além disso, os termos associados às interações interatômicas também se cancelam sob essa simetria. Assim, a expressão para m_3 reduz-se a:

$$m_3 = \frac{4\hbar^4}{M^2} \left\{ 4 \langle T_{\perp} \rangle + 2NM\omega_0^2 \langle r_{\perp}^2 \left(1 - \frac{r_0}{r} \right) \rangle \right\},$$

a qual, ao considerarmos o regime de casca fina, torna-se:

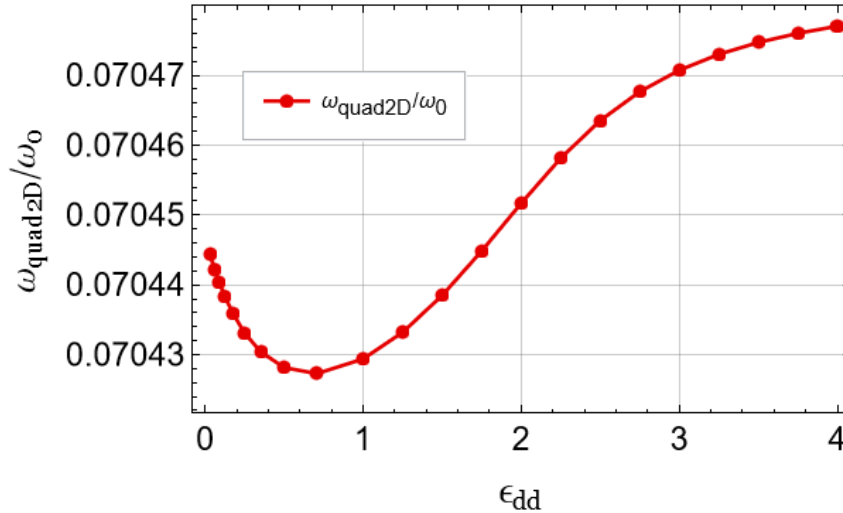
$$m_3 \approx \frac{16\hbar^4}{M^2} \langle T_{\perp} \rangle. \quad (5.17)$$

Por fim, utilizando as Eqs. 5.16, 5.17 e 5.1, obtém-se a frequência do modo quadrupolo bidimensional (2D):

$$\omega_{quad\ 2D} \approx 2 \sqrt{\frac{\langle T_{\perp} \rangle}{NM \langle x^2 \rangle}}. \quad (5.18)$$

O comportamento do modo de quadrupolo bidimensional (2D) para uma casca esférica com razão $c = R_0/R_1 = 20$ é apresentado na Figura 15.

Figura 15 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0 .



Fonte: Elaborada pelo autor.

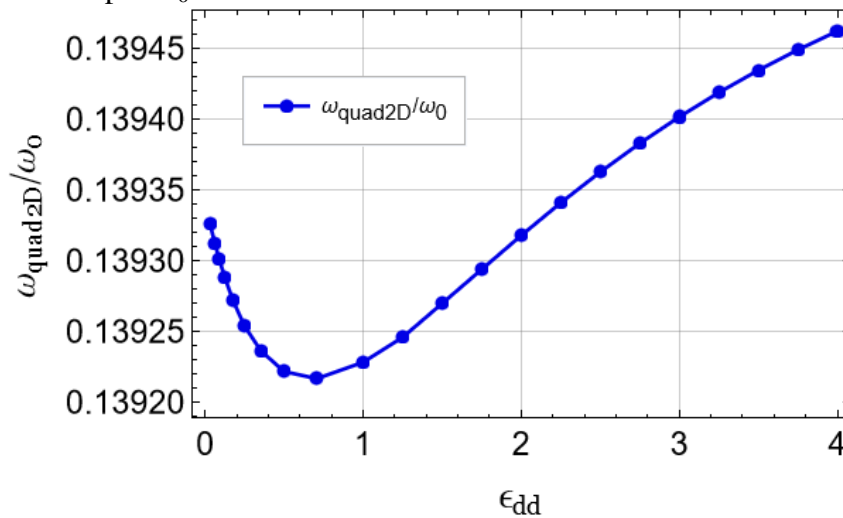
Observa-se que a frequência correspondente a esse modo permanece essencialmente inalterada com o aumento do parâmetro de interação dipolar ϵ_{dd} . De acordo com os resultados analíticos apresentados em [8], a frequência adimensional do modo de quadrupolo 2D é dada por

$$\frac{\omega_{quad2D}}{\omega_0} = \frac{1}{c} \sqrt{\frac{l(l+1)}{3}}, \quad (5.19)$$

onde $l = 2$ caracteriza o modo de quadrupolo bidimensional. Para $c = 20$, obtém-se o valor teórico $\omega_{\text{quad2D}}/\omega_0 \approx 0,0707$. Por sua vez, os resultados numéricos obtidos neste trabalho indicam $\omega_{\text{quad2D}}/\omega_0 \approx 0,0704$, o que corresponde a um erro percentual de aproximadamente 0,42%, evidenciando uma excelente concordância entre os resultados.

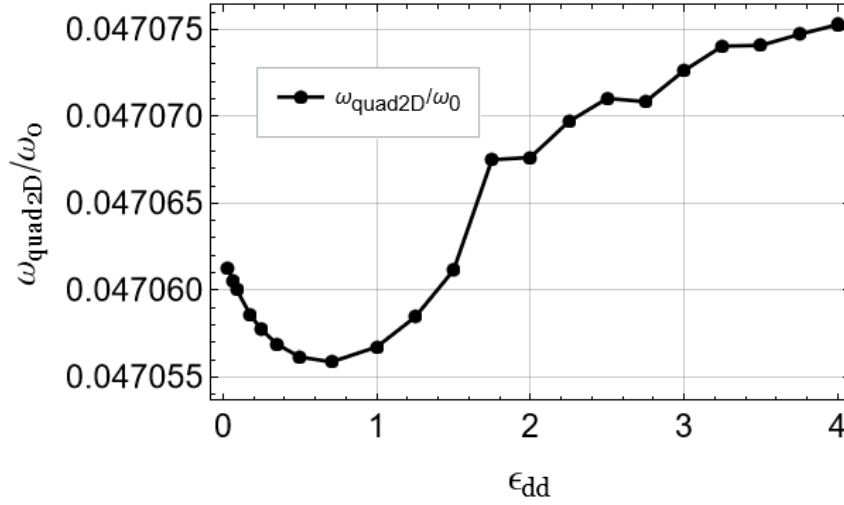
Apesar da boa concordância observada nos resultados, é interessante analisar o comportamento da frequência do modo de quadrupolo 2D em um regime com diferentes razões de casca, a saber: $c_1 = 10$, $c_2 = 30$ e $c_3 = 35$. Para esses valores, a expressão $\omega_{\text{quad2D}}/\omega_0$ fornece, aproximadamente, os valores 0,1414, 0,0471 e 0,0404, respectivamente. A seguir, apresentamos os gráficos correspondentes a cada caso:

Figura 16 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 10$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0 .



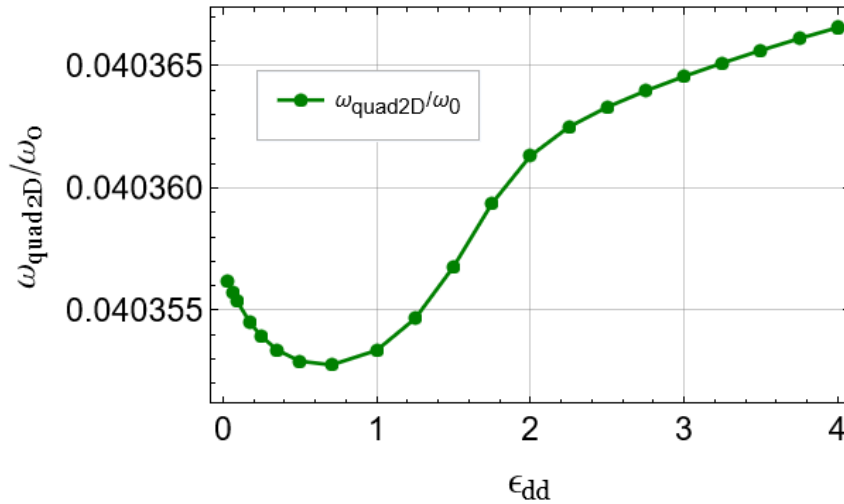
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 17 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 30$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0 .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 18 – Frequências do modo de quadrupolo 2D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 35$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad2D} , normalizada por ω_0 .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Observa-se que, na Figura 16, os resultados obtidos não apresentam boa concordância com o valor previsto teoricamente segundo [8]. No entanto, à medida que a espessura da casca diminui — como nos casos ilustrados nas Figuras 17 e 18 — Os valores numéricos tornam-se praticamente indistinguíveis dos resultados analíticos quando aproximados a quatro casas decimais. Tal comportamento indica que o método numérico empregado fornece estimativas mais precisas para a frequência do modo de quadrupolo 2D quanto mais fina é a casca confinante.

5.5 Modo de Quadropolo 3D(m=0)

De maneira análoga ao modo quadropolar bidimensional (2D), este modo é caracterizado por contrações alternadas entre os eixos coordenados. A diferença principal, contudo, é que o eixo z também participa da oscilação. Nesse cenário tridimensional, as três direções espaciais oscilam fora de fase entre si, como ilustrado na Fig. 19.

É importante destacar que esse modo não possui simetria esférica, uma vez que essa simetria é quebrada pela interação dipolo-dipolo, a qual acopla o modo quadropolo 3D e o modo de monopolo. Para lidar com esse acoplamento, adotaremos o procedimento proposto em [32], que consiste em construir um operador de excitação que combine ambos os modos, permitindo tratá-los de forma unificada.

A parte radial, correspondente às componentes x e y do operador de excitação, é descrita por:

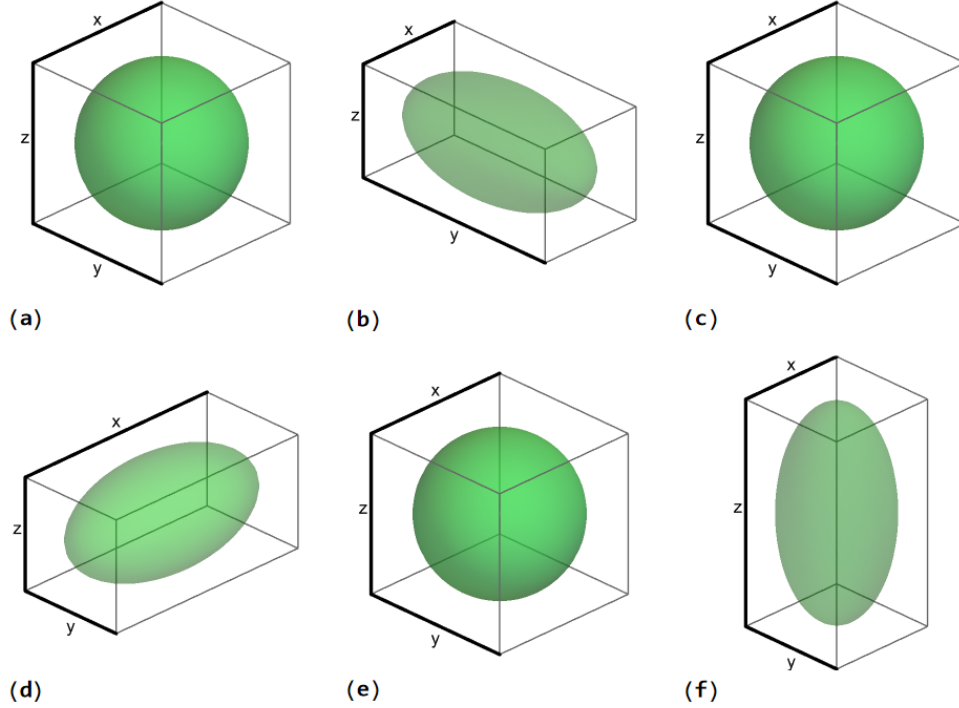
$$\hat{A}_{\perp} \approx M\omega_0 \delta\omega \sum_i (x_i^2 + y_i^2),$$

enquanto a parte axial assume a forma:

$$\hat{A}_z \approx M\omega_0 \delta\omega \sum_i (-\alpha z_i^2),$$

em que o parâmetro α será determinado posteriormente. Esse parâmetro tem a função de ajustar a razão entre as amplitudes das oscilações radial e axial. Ao maximizar a expressão resultante em relação a α , obtém-se a frequência do modo monopolar; por outro lado, a minimização em relação a α fornece a frequência do modo quadropolar tridimensional.

Figura 19 – Representação esquemática do modo quadrupolar 3D, caracterizado por oscilações fora de fase nos três eixos espaciais. As subfiguras ilustram: (a) o estado fundamental; (b) alongamento na direção y ; (c) retorno ao estado fundamental; (d) alongamento na direção x ; (e) retorno ao estado fundamental; e (f) alongamento na direção z .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Somando as contribuições radial e axial, e desconsiderando as constantes multiplicativas, obtemos o seguinte operador de excitação:

$$\hat{A}_{m=0} = \sum_i (x_i^2 + y_i^2 - \alpha z_i^2). \quad (5.20)$$

O procedimento para obtenção da frequência associada a esse modo segue de forma análoga ao aplicado nos modos anteriores. Dado que os cálculos são mais extensos e repetem etapas já discutidas, optamos por omiti-los nesta apresentação. Assim, a frequência do modo quadrupolar tridimensional é dada por:

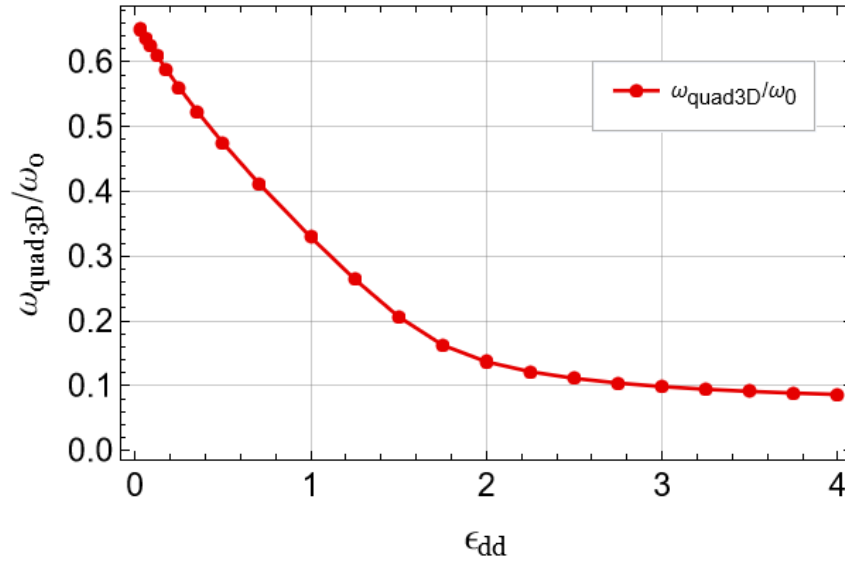
$$\omega_{m=0} \approx \omega_0 \sqrt{\frac{4(2\langle T_{\perp} \rangle + \alpha^2 \langle T_z \rangle) + 2M\omega_0^2 N(2\langle x^2 \rangle + \alpha^2 \langle z^2 \rangle - \langle \Omega \rangle) + 4\alpha^2 \langle H_{int} \rangle}{2M\omega_0^2 N(\langle x^2 \rangle + \alpha^2 \langle z^2 \rangle)}}, \quad (5.21)$$

em que,

$$\Omega = \frac{R_0}{r} \left(x^2 + y^2 + \alpha^2 z^2 - \frac{(x^2 + y^2 - \alpha^2 z^2)^2}{r^2} \right). \quad (5.22)$$

Por fim, apresentamos o resultado do último modo coletivo, representado no gráfico a seguir:

Figura 20 – Frequências do modo de quadrupolo 3D para uma casca com razão $c = R_0/R_1 = 20$. O eixo horizontal mostra os valores de ϵ_{dd} , e o eixo vertical apresenta a frequência do modo, ω_{quad3D} , normalizada por ω_0 .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Observa-se no gráfico acima que a frequência deste modo torna-se inferior à frequência da armadilha à medida que a interação dipolar se intensifica, evidenciando uma assinatura clara dessa interação no comportamento coletivo. Ademais, este modo não possui, até o momento, um análogo hidrodinâmico conhecido que permita uma comparação direta.

6 CONCLUSÃO

Nesta monografia, investigamos gases quânticos dipolares confinados na superfície de uma esfera, abordando tanto o estado fundamental, por meio de um método variacional, quanto os principais modos coletivos utilizando a técnica das *sum rules* [28]. O objetivo principal é replicar os resultados de [10] e verificar a consistência dos resultados obtidos por esse método em relação àqueles derivados das equações hidrodinâmicas [8].

Para o estado fundamental, seguimos a mesma metodologia adotada em [10], obtendo resultados compatíveis com os apresentados pelos autores. No entanto, o gráfico da Fig. 6 apresenta uma diferença por um fator aproximado de ≈ 2 em comparação ao trabalho original [33], o que pode estar relacionado a diferentes convenções ou normalizações empregadas numericamente.

Quanto aos modos coletivos — monopolo e quadrupolo bidimensional —, os resultados obtidos via *sum rules* mostraram boa concordância não apenas com o estudo replicado, mas também com cálculos baseados em equações hidrodinâmicas. A exceção é o modo dipolar, cujas frequências não coincidem com os resultados hidrodinâmicos, o que é esperado, dado que o método das *sum rules* fornece apenas um limite superior para essas excitações. Ressalta-se, ainda, que para o modo de quadrupolo bidimensional, a concordância com os resultados analíticos melhora significativamente à medida que a casca se torna mais fina, indicando maior precisão do método numérico nesse regime. Já o modo de quadrupolo tridimensional, por sua vez, não possui um análogo hidrodinâmico conhecido, o que limita comparações diretas com essa abordagem.

As perspectivas futuras deste trabalho incluem a análise do modo tesoura por meio do método das *sum rules*, assim como a extensão dos resultados obtidos para um sistema de gás fermiônico. Além disso, pretende-se analisar o limite de casca fina, empregando cálculos numéricos para investigar a energia e os modos coletivos em cascas com espessura finita, incluindo tanto cascas ligeiramente mais grossas quanto cascas hiperfinas.

REFERÊNCIAS

- [1] S. N. Bose, “Plancks gesetz und lichtquantenhypothese,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 26, pp. 178–181, 1924.
- [2] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen gases,” *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-mathematische Klasse*, pp. 261–267, 1924.
- [3] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor,” *Science*, vol. 269, no. 5221, pp. 198–201, 1995.
- [4] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms,” *Physical Review Letters*, vol. 75, no. 22, pp. 3969–3973, 1995.
- [5] J. F. Allen and A. Misener, “Flow of liquid helium ii,” *Nature*, vol. 141, no. 3558, p. 75, 1938.
- [6] P. Kapitza, “Viscosity of liquid helium below the λ -point,” *Nature*, vol. 141, no. 3558, p. 74, 1938.
- [7] D. V. Delft and P. Kes, “The discovery of superconductivity,” *Physics Today*, vol. 63, no. 9, pp. 38–43, 2010.
- [8] K. Sun, K. Padavić, F. Yang, S. Vishveshwara, and C. Lannert, “Static and dynamic properties of shell-shaped condensates,” *Physical Review A*, vol. 98, no. 1, p. 013609, 2018.
- [9] NASA Jet Propulsion Laboratory, “Cold atom lab (cal).” <https://coldatomlab.jpl.nasa.gov>, 2024. Acesso em: 15 fevereiro 2025.
- [10] P. C. Diniz, E. A. B. Oliveira, A. R. P. Lima, and E. A. L. Henn, “Ground state and collective excitations of a dipolar bose-einstein condensate in a bubble trap,” *Scientific Reports*, vol. 10, p. 4831, 2020.
- [11] S. R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005.

- [12] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*. Oxford: Butterworth Heinemann, 1996.
- [13] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1965.
- [14] L. Peliti, *Statistical Mechanics in a Nutshell*. Princeton: Princeton University Press, 2011.
- [15] M. Kardar, *Statistical Physics of Particles*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- [16] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 4 ed., 2018.
- [17] J. F. Oliveira Neto, “Gotículas quânticas dipolares com orientações arbitrária,” 2019. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Curso de Física, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-brasileira, Redenção-CE.
- [18] E. A. Cornell and C. E. Wieman, “Nobel lecture: Bose-einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, no. 3, p. 875, 2002.
- [19] S. L. Campbell, “Feshbach resonances in ultracold gases,” 2009. Disponível em: <https://physics.gu.se/~tfkhj/SaraCampbell.pdf>.
- [20] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, “Feshbach resonances in ultracold gases,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 82, no. 2, pp. 1225–1286, 2010.
- [21] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, and T. Pfau, “The physics of dipolar bosonic quantum gases,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 72, no. 12, p. 126401, 2009.
- [22] E. P. Gross, “Structure of a quantized vortex in boson systems,” *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, vol. 20, no. 3, pp. 454–477, 1961.
- [23] L. Pitaevskii, “Vortex lines in an imperfect bose gas,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 13, no. 2, pp. 451–454, 1961.
- [24] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics, Vol. 2*. New York: Wiley-VCH, 1996.

- [25] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics, Part I*. Oxford: Pergamon Press, 2nd ed., reprinted with corrections ed., 1981.
- [26] F. M. A. GUIMARÃES, “Abordagem variacional às gotículas quânticas dipolares.” Disponível em meio impresso, 2020. Monografia (Graduação) – Curso de Licenciatura em Física, Instituto de Ciências Exatas e da Terra, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), Redenção.
- [27] C. Lannert, T.-C. Wei, and S. Vishveshwara, “Dynamics of condensate shells: Collective modes and expansion,” *Phys. Rev. A*, vol. 75, p. 013611, Jan 2007.
- [28] R. Kubo, “Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 12, no. 6, pp. 570–586, 1957.
- [29] S. Stringari, “Collective excitations of a trapped bose-condensed gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, pp. 2360–2363, Sep 1996.
- [30] O. Bohigas, A. M. Lane, and J. Martorell, “Nuclear collective motion and random matrices,” *Physics Reports*, vol. 51, no. 5, pp. 267–316, 1979.
- [31] E. Lipparini and S. Stringari, “Sum rules and giant resonances in nuclei,” *Physics Reports*, vol. 175, no. 3, pp. 103–261, 1989.
- [32] T. Kimura, H. Saito, and M. Ueda, “A variational sum-rule approach to collective excitations of a trapped bose-einstein condensate,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 68, p. 1477–1480, May 1999.
- [33] P. Diniz, “Estado fundamental e modos coletivos de um condensado de Bose-Einstein dipolar aprisionado em uma casca esférica,” dissertação (mestrado em ciências), Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.
- [34] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 2nd ed., 2011.

APÊNDICE A – CÁLCULO DA CONTRIBUIÇÃO DE QUARTA ORDEM DA DENSIDADE ANGULAR À ENERGIA DE CONTATO

Em determinadas etapas do desenvolvimento, deparamo-nos com a integral quártica da densidade angular. Para prosseguir com a análise, reescrevemos essa integral de maneira mais conveniente para sua avaliação:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left| \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \right|^4 d\Omega &= \sum_{l_1, m_1} \sum_{l_2, m_2} \sum_{l_3, m_3} \sum_{l_4, m_4} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2} a_{l_3, m_3}^* a_{l_4, m_4}^* \int_{\Omega} Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} (Y_{l_3}^{m_3} Y_{l_4}^{m_4})^* d\Omega \\ &= \sum_{l_1, m_1} \sum_{l_2, m_2} \sum_{l_3, m_3} \sum_{l_4, m_4} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2} a_{l_3, m_3}^* a_{l_4, m_4}^* \Delta_{l_1, l_2, l_3, l_4}^{m_1, m_2, m_3, m_4}, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

para calcular os números Δ , utilizaremos a propriedade do produto de harmônicos esféricos [34],

$$\begin{aligned} Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) &= \\ \sum_{l, m} \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l + 1)}{4\pi}} &\times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} (-1)^m Y_l^m(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

os objetos entre parênteses representam os símbolos 3-J de Wigner, cujo as propriedades são:

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix},$$

são iguais a zero a menos que:

- $m_i \in [-l_i, l_i]$;
- $m_1 + m_2 + m_3 = 0$;
- $|l_1 - l_2| \leq l_3 \leq |l_1 + l_2|$;
- $(l_1 + l_2 + l_3) \in \mathbf{Z}$.

Além disso, possuem a propriedade de permutação de índices:

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{l_1 + l_2 + l_3} \begin{pmatrix} l_2 & l_1 & l_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Observe que, ao substituir a propriedade A.2 na integral polar, o produto de quatro harmônicos esféricos é simplificado, resultando em uma soma que envolve a integral de apenas

dois harmônicos esféricos, assim,

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} (Y_{l_3}^{m_3} Y_{l_4}^{m_4})^* d\Omega = \\
& \int_{\Omega} \sum_{l,m} \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} (-1)^m Y_l^m(\theta, \phi) \\
& \times \left(\sum_{l,m} \sqrt{\frac{(2l_3+1)(2l_4+1)(2l+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_3 & l_4 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & l_4 & l \\ m_3 & m_4 & -m \end{pmatrix} (-1)^m Y_l^m(\theta, \phi) \right)^* d\Omega,
\end{aligned} \tag{A.4}$$

onde teremos a seguinte integral:

$$\int_{\Omega} Y_m^l Y_{m'}^{l'} d\Omega = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}.$$

A identidade acima, quando aplicada à equação A.4, simplifica a expressão, uma vez que o delta de Kronecker elimina uma das integrais, resultando em uma forma mais compacta da equação. Adicionalmente, utilizando as propriedades dos Símbolos de Wigner, podemos remover o índice m de soma, obtendo, por fim, os números $\Delta_{l_1, l_2, l_3, l_4}^{m_1, m_2, m_3, m_4}$:

$$\begin{aligned}
\Delta_{l_1, l_2, l_3, l_4}^{m_1, m_2, m_3, m_4} = & \frac{\sqrt{\prod_{j=1}^4 2l_j + 1}}{4\pi} \sum_l (2l+1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -(m_1+m_2) \end{pmatrix} \times \\
& \begin{pmatrix} l_3 & l_4 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & l_4 & l \\ m_3 & m_4 & -(m_1+m_2) \end{pmatrix} \delta_{m_1+m_2, m_3+m_4}.
\end{aligned} \tag{A.5}$$

APÊNDICE B – TRANSFORMADA DE FOURIER DO POTENCIAL COULOMBIANO

Para calcular a transformada de Fourier do potencial Coulombiano, utilizamos a identidade de Schwinger:

$$\frac{1}{a^v} = \frac{1}{\Gamma(v)} \int_{\mathbb{R}_+} d\xi \xi^{v-1} e^{-\alpha\xi}, \quad (\text{B.1})$$

Com essa substituição, o cálculo da transformada de $\frac{1}{4\pi x}$ torna-se direto. Temos:

$$\begin{aligned} \mathbb{F} \left[\frac{1}{x} \right] &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \frac{1}{x} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \frac{1}{\sqrt{x^2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \frac{1}{\Gamma(1/2)} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}_+} d\xi \xi^{-1/2} e^{-\xi x^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}_+} d\xi \xi^{-1/2} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\xi x^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}_+} d\xi \xi^{-1/2} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\xi}} \right)^3 e^{-\frac{k^2}{4\xi}} \\ &= \pi \int_{\mathbb{R}_+} d\xi \frac{1}{\xi^2} e^{-\frac{k^2}{4\xi}} \\ &= \frac{4\pi}{k^2}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\mathbb{F} \left[\frac{1}{4\pi x} \right] = \frac{1}{k^2}. \quad (\text{B.2})$$

APÊNDICE C – CÁLCULO DAS INTEGRAIS RADIAIS DA ENERGIA DIPOLAR

Para o caso em que $l_6 = l_3$, temos:

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_l(k) &= \int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \left(\int_{\mathbb{R}_+} r^2 dr j_l(kr) \mathcal{F}^2 \left(\frac{r-R_0}{R_1} \right) \right)^2 \times \\
 &\quad \left(\int_{\mathbb{R}_+} r'^2 dr' j_l(kr') \mathcal{F}^2 \left(\frac{r'-R_0}{R_1} \right) \right)^2 \\
 &= R_0^3 \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi \int_{\mathbb{R}_+} u^2 du j_l(\xi u) \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1}(u-1) \right) \times \\
 &\quad \int_{\mathbb{R}_+} v^2 dv j_l(\xi v) \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1}(v-1) \right) \\
 &= R_0^3 \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}_+} du dv u^2 v^2 \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1}(u-1) \right) \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1}(v-1) \right) \\
 &\quad \times \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_l(\xi v).
 \end{aligned}$$

Utilizamos agora a identidade:

$$\int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_l(\xi v) = \frac{\pi}{2u^2} \delta(u-v), \quad (\text{C.1})$$

substituindo essa identidade, obtemos:

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_l(k) &= R_0^3 \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}_+} du dv u^2 v^2 \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1}(u-1) \right) \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1}(v-1) \right) \frac{\pi}{2uv^2} \delta(u-v) \\
 &= \frac{\pi R_0^3}{2} \int_{\mathbb{R}_+} du u^2 \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1}(u-1) \right) \\
 &= \frac{\pi R_0^3}{2} \int_0^\infty du u^2 \exp \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2}(u-1)^2 \right] \\
 &= \frac{\pi R_0^3}{2} \cdot \frac{R_1}{16R_0^3} \left(\sqrt{2\pi(4R_0^2 + R_1^2)} \left(\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}R_0}{R_1} \right) + 1 \right) + 4R_0R_1 e^{-2R_0^2/R_1^2} \right).
 \end{aligned}$$

No limite de casca fina, ou seja, $R_1 \ll R_0$, essa expressão se reduz a:

$$\int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_l(k) \approx \frac{\pi^{3/2} \sqrt{2} R_0^2 R_1}{4}. \quad (\text{C.2})$$

Para o caso em que $l_6 = l_3 - 2$, temos:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_{l-2}(k) &= R_0^3 \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}_+} du dv u^2 v^2 \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1} (u-1) \right) \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1} (v-1) \right) \\ &\quad \times \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_{l-2}(\xi v), \end{aligned}$$

utilizamos agora a relação de recorrência dos esféricos de Bessel:

$$j_{l-2}(x) = \frac{2l-1}{x} j_{l-1}(x) - j_l(x), \quad (\text{C.3})$$

que implica:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_{l-2}(\xi v) &= \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) \left(\frac{2l-1}{\xi v} j_{l-1}(\xi v) - j_l(\xi v) \right) \\ &= \frac{2l-1}{v} \int_{\mathbb{R}_+} \xi d\xi j_l(\xi u) j_{l-1}(\xi v) - \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_l(\xi v). \end{aligned}$$

Sabemos que:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_+} \xi d\xi j_l(\xi u) j_{l-1}(\xi v) &= \frac{\pi}{4} \delta(u-v), \\ \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_l(\xi v) &= \frac{\pi}{2u^2} \delta(u-v), \end{aligned}$$

portanto:

$$\int_{\mathbb{R}_+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_{l-2}(\xi v) = \left(\frac{\pi(2l-1)}{4v} - \frac{\pi}{2uv^2} \right) \delta(u-v).$$

Substituindo na expressão original:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_{l-2}(k) &= R_0^3 \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}_+} du dv u^2 v^2 \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1} (u-1) \right) \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1} (v-1) \right) \\ &\quad \times \left(\frac{\pi(2l-1)}{4v} - \frac{\pi}{2uv^2} \right) \delta(u-v) \\ &= \frac{R_0^3 \pi (2l-1)}{4} \int u^2 du \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1} (u-1) \right) \int v^2 dv \mathcal{F}^2 \left(\frac{R_0}{R_1} (v-1) \right) \\ &\quad - \int k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_l(k), \end{aligned}$$

de forma que os termos a serem calculados são gaussianas, dessa forma, obtendo a forma analítica de cada uma e aplicando o limite de casca fina, obtemos

$$\int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_{l-2}(k) \approx \frac{R_0^2 R_1 \pi^{3/2} \sqrt{2}}{4} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{R_1}{R_0} (2l-1) - 1 \right). \quad (\text{C.4})$$

O resultado para o caso em que $l_6 = l_3 + 2$, segue imediatamente do resultado anterior,

bastando substituir l por $l+2$:

$$\int_{\mathbb{R}_+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_{l-2}(k) \approx \frac{R_0^2 R_1 \pi^{3/2} \sqrt{2}}{4} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{R_1}{R_0} (2l+3) - 1 \right). \quad (\text{C.5})$$

APÊNDICE D – INTEGRAIS ENVOLVENDO AS DERIVADAS DA δ

Para resolver integrais que envolvem derivadas da função delta de Dirac, como no caso que aparece ao calcular certos momentos:

$$\int \mathbf{x}_k \cdot \nabla_k \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) f(\mathbf{x}_j) d^3 x_j,$$

é conveniente iniciar o estudo por uma situação mais simples. Para isso, consideramos o caso unidimensional, definindo a coordenada relativa como $X \equiv x_i - x_j$. Neste contexto, a integral tridimensional se reduz a uma integral unidimensional, o que facilita o tratamento analítico.

A análise unidimensional nos permitirá entender a estrutura geral dessas integrais envolvendo derivadas da delta, e nos levará a três casos distintos:

$$k = i: - \int \frac{d}{dX} (\delta(X)) \frac{dX}{dx_i} f(x_i - X) = f'(x_i); \quad (\text{D.1})$$

$$k = j: - \int \frac{d}{dX} (\delta(X)) \frac{dX}{dx_j} f(x_i - X) = f'(x_i); \quad (\text{D.2})$$

$$k \neq i, j: 0. \quad (\text{D.3})$$

De forma semelhante só que para o caso tridimensional, teremos:

$$\begin{aligned} \int d^3 x_j \mathbf{x}_k \cdot \nabla_k (\delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) f(x_j) &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \int d^3 X \mathbf{x}_k \cdot \nabla (\delta(\mathbf{X})) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \int d^3 X x_{k\alpha} \partial_\alpha (\delta(\mathbf{X})) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \left[\int d^3 X \partial_\alpha (x_{k\alpha} \delta(\mathbf{X}) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X})) \right. \\ &\quad \left. - \int d^3 X \delta(\mathbf{X}) \partial_\alpha (x_{k\alpha} f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X})) \right] \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \left[\oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}_k \delta(\mathbf{X}) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) - \nabla \cdot (\mathbf{x}_k f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X})) \right]_{\mathbf{X}=0} \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) [\mathbf{x}_k \cdot \nabla f(x_i) - 3f(x_i)]. \end{aligned}$$

Onde ∇ é o gradiente na coordenada relativa $\mathbf{X} \equiv \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ e os índices gregos denotam componentes de um vetor (e estão somados de 1 a 3). Podemos expandir o seguinte termo:

$$\begin{aligned}
\mathbf{X} \cdot \nabla [\mathbf{X} \cdot \nabla \delta(\mathbf{X})] &= X_\alpha \partial_\alpha [X_\beta \partial_\beta \delta(\mathbf{X})] \\
&= X_\alpha (\partial_\alpha X_\beta) \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) + X_\alpha X_\beta \partial_\alpha [\partial_\beta \delta(\mathbf{X})] \\
&= X_\alpha \delta_{\alpha\beta} \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) + X_\alpha X_\beta \partial_\alpha \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) \\
&= X_\alpha \partial_\alpha \delta(\mathbf{X}) + X_\alpha X_\beta \partial_\alpha \partial_\beta \delta(\mathbf{X}), \tag{D.4}
\end{aligned}$$

integrando o primeiro termo:

$$\begin{aligned}
\int d^3\mathbf{X} n^{(+)} n^{(-)} X_\alpha \partial_\alpha \delta(\mathbf{X}) &= \oint dS_\alpha n^{(+)} n^{(-)} X_\alpha \delta(\mathbf{X}) - \int d^3\mathbf{X} \partial_\alpha [X_\alpha n^{(+)} n^{(-)}] \delta(\mathbf{X}) \\
&= 0 - (3n^2(\mathbf{R}) + 0) = -3n^2(\mathbf{R}) \tag{D.5}
\end{aligned}$$

Utilizando a notação $n^{(\pm)} \equiv n(\mathbf{R} \pm \mathbf{X}/2)$, observamos que o segundo termo contém derivadas de segunda ordem da $\delta(\mathbf{X})$. Para integrá-lo por partes, buscamos reescrevê-lo em termos de derivadas de ordem inferior.

$$\begin{aligned}
n^{(+)} n^{(-)} \partial_\alpha \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) &= -12n^{(+)} n^{(-)} \delta(\mathbf{X}) - 8n^{(+)} n^{(-)} X_\alpha \partial_\mu \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) \\
&\quad - 2n^{(+)} n^{(-)} X_\alpha X_\beta \partial_\alpha [n^{(+)} n^{(-)}] \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) + Z_0, \tag{D.6}
\end{aligned}$$

em que Z_0 são termos cuja integral em $d^3\mathbf{X}$ se anula (de superfície ou da forma $\mathbf{X}\delta(\mathbf{X})$).

Finalmente, integrando (e fazendo direto as integrações por partes):

$$\begin{aligned}
\int d^3\mathbf{X} n^{(+)} n^{(-)} X_\alpha X_\beta \partial_\alpha \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) &= -12n^2(\mathbf{R}) + 8\partial_\alpha [X_\alpha n^{(+)} n^{(-)}] \Big|_{\mathbf{X}=0} \\
&\quad + 2\partial_\beta [X_\beta X_\alpha \partial_\alpha (n^{(+)} n^{(-)})] \Big|_{\mathbf{X}=0} \\
&= -12n^2(\mathbf{R}) + 8 \times 3n^2(\mathbf{R}) + 0 = 12n^2(\mathbf{R}). \tag{D.7}
\end{aligned}$$