

# Condensados de Bose-Einstein: um estudo variacional

Paulo Roberto Borba Pedreira

11 de janeiro 2000

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Condensado de Bose-Einstein</b>	<b>6</b>
2.1	Arranjo experimental . . . . .	6
2.2	Operador número . . . . .	8
2.3	Operadores energias cinética e potencial . . . . .	9
2.4	O Hamiltoniano e a equação de movimento para $\psi$ . . . . .	10
2.5	Equação de Gross-Pitaevskii . . . . .	12
2.6	Solução estacionária . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Oscilador anarmônico: um estudo variacional</b>	<b>14</b>
3.1	Oscilador anarmônico: estados Gaussianos . . . . .	14
3.2	Gaussianas generalizadas . . . . .	18
3.3	Oscilador anarmônico: Gaussiana generalizada . . . . .	19
3.3.1	Oscilador anarmônico com $n > 1$ . . . . .	20
3.3.2	Oscilador anarmônico com $n < 1$ . . . . .	23
3.4	Resultados numéricos . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Estado fundamental do condensado de Bose-Einstein</b>	<b>29</b>
4.1	Funcional de Gross-Pitaevskii . . . . .	29
4.2	Reescalamento do sistema. . . . .	30
4.3	Modelo não interagente . . . . .	31
4.4	Caso repulsivo com inúmeras partículas . . . . .	33
4.5	Estado fundamental do CBE: Interação repulsiva ( $^{87}\text{Rb}$ ) . . . . .	34
4.5.1	Normalização da função teste. . . . .	35
4.5.2	Energia potencial não linear . . . . .	37
4.5.3	Energia cinética . . . . .	37
4.5.4	Energia potencial harmônica anisotrópica . . . . .	38
4.6	Energia total por partícula . . . . .	39
4.6.1	Tamanhos transversal e vertical da nuvem atômica, razão aspecto e potencial químico . . . . .	42
4.7	Estado fundamental do CBE: Interação atrativa ( $^7\text{Li}$ ) . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Estados com vórtices, ou vorticosos</b>	<b>50</b>
5.1	Funcional de Gross-Pitaevskii para estados vorticosos . . . . .	50
5.2	Condensados de Bose-Einstein de $^{87}\text{Rb}$ com vórtices . . . . .	51

5.3	Condensados de Bose-Einstein de ${}^7\text{Li}$ com vórtices . . . . .	53
5.4	Cálculos para estados com vórtices . . . . .	57
5.4.1	Normalização da função de onda . . . . .	57
5.4.2	Energia potencial de interação . . . . .	59
5.4.3	Energia potencial de oscilador harmônico . . . . .	60
5.4.4	Energia centrífuga . . . . .	60
5.4.5	Energia cinética . . . . .	61
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>63</b>
<b>7</b>	<b>Apêndice A1: Cálculo Variacional</b>	<b>66</b>
7.1	Problema fundamental . . . . .	66
7.1.1	Lema fundamental . . . . .	67
7.2	Várias variáveis dependentes . . . . .	68
7.3	Várias variáveis independentes . . . . .	69
7.4	Problema isoperimétrico . . . . .	71
7.5	Equação de Schroedinger independente do tempo . . . . .	72
<b>8</b>	<b>Apêndice A2: Entropia de Tsallis</b>	<b>74</b>
8.1	A distribuição de Boltzmann-Gibbs . . . . .	74
8.2	A distribuição de Tsallis . . . . .	75
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>79</b>

# Capítulo 1

## INTRODUÇÃO

Às dez horas e cinquenta e quatro minutos do dia cinco de junho de 1995 foi observado, pela primeira vez, o produto real da condensação de Bose-Einstein [1]. Cerca de 2000 átomos de  $^{87}\text{Rb}$  foram aprisionados em uma armadilha magnética e esfriados, por laser e evaporativamente, até à temperatura de 170 nanokelvins [2]. O conjunto de átomos torna-se um “átomo gigante”, formado por uma *bola* de átomos de  $^{87}\text{Rb}$ , tão estacionários quanto permitido pelas leis quânticas, com todos os seus constituintes no mesmo estado quântico comportando-se como uma única entidade, o Condensado de Bose-Einstein (CBE). Esta *bola* estava envolta por uma nuvem difusa destes mesmos átomos. Antes de registrar este *átomo gigante* em imagens, os físicos resfriaram o condensado até a incrível marca de vinte nanokelvins: a temperatura mais baixa jamais conseguida em qualquer parte do Universo até esta data[1]. O condensado, o qual pode ser visto como um novo estado da matéria, foi predito há 70 anos atrás por Bose[3] e Einstein[4], mas nunca observado até então. Logo após esta descoberta, novos condensados foram observados: CBE com átomos de  $^{23}\text{Na}$ [5], e com átomos de  $^7\text{Li}$ [6], entre outros mais recentes tais como os CBE de  $^7\text{Li}$  [7], o de  $^{87}\text{Rb}$  [8, 9] e o de  $^{23}\text{Na}$  [10].

Em 1924, o físico indiano Satyendra Nath Bose, em um artigo enviado a Albert Einstein, usou argumentos de mecânica estatística para deduzir o espectro de radiação de corpo negro. Einstein estendeu o modelo estatístico para incluir sistemas com número de partículas conservado[4], utilizando a idéia recente de de Broglie\* de associar ondas à matéria. O resultado deste trabalho conjunto é a estatística de Bose-Einstein, e as partículas obedecendo esta estatística são os bósons. Estava previsto então, que em temperaturas suficientemente baixas, átomos formando um gás não-interagente condensariam, ao ponto onde todos cairiam no mesmo estado, comportando-se essencialmente como um único átomo†.

Devido a todos estes aspectos que cercam o condensado de Bose-Einstein, o interesse em entender mais sobre ele reacendeu, tanto teórico quanto experimentalmente, e muitos físicos assestaram suas objetivas sobre o CBE. Tragados por esta onda, provocada pelo novo estado da matéria, ou pelo *super-átomo*, nós desenvolvemos esta monografia.

Neste trabalho, no próximo capítulo, teremos uma introdução experimental

---

\*Anterior à Schrodinger estabelecer as bases da Mecânica Quântica; foi a primeira vez que alguém usou, ou se referiu, ao conceito de *ondas de matéria* de de Broglie[11].

†Condições similares existem em um laser, onde fótons viajam em uma forma coordenada, gerando um feixe de luz coerente[1].

ao CBE, principalmente às técnicas utilizadas para o resfriamento dos átomos [12, 13, 14], e também noções básicas da teoria sobre a qual se apoia o estudo sobre o condensado[15] e, em particular, ressaltaremos a equação de Gross-Pitaevskii[16]. Esta equação é obtida via a teoria de campo médio, e tem sido usado para descrever os estados fundamental e com vórtices de um CBE.

Para a resolução da equação de Gross-Pitaevskii, vários procedimentos numéricos [18, 19, 20, 21, 22] e métodos analíticos de aproximação[23] tem sido utilizados. Entre estes esquemas, chama a atenção o esquema proposto por Baym e Pethick[23], para obter uma aproximação dos valores numéricos experimentais encontrados por Anderson *et al*[2]. Neste esquema de aproximação variacional, a função teste usada tem a forma do estado fundamental do potencial da armadilha. Esta função é uma Gaussiana tridimensional, cujos parâmetros variacionais são as frequências axial e transversal da armadilha magnética. Como veremos mais tarde no capítulo 4, esta forma somente fornece bons resultados quando o número de átomos na armadilha é muito pequeno. Quando o número de átomos cresce, a interação repulsiva entre os átomos de  $^{87}\text{Rb}$  tende a fazer com que o condensado se expanda, e o perfil da densidade na região central, onde ela é máxima, aplanada. A Gaussiana consegue fornecer uma descrição da expansão do CBE, mas é impotente quanto à descrição do perfil da densidade. Outra aproximação, a aproximação de Thomas-Fermi [21, 22, 23], fornece uma função de onda que é válida quando o número de átomos é muito grande, o que é o caso em condensados mais recentes[24]. É óbvio que é de grande interesse termos uma função de onda que possua estes comportamentos limites e que forneça boa aproximação também fora dessas condições limites. Nesta direção, Fetter [25] propôs, baseando-se no método variacional, uma função teste para analisar o estado fundamental de bósons, em armadilhas tanto isotrópicas quanto anisotrópicas, para átomos com interação repulsiva, por exemplo o  $^{87}\text{Rb}$ . A função de Fetter interpola suavemente entre o gás ideal (número muito pequeno de átomos) e o limite de Thomas-Fermi (número muito grande de átomos). Entretanto, a função teste de Fetter não é adequada para estudar o condensado com interação atrativa entre os bósons, isto porque a energia variacional somente acha o seu mínimo quando a função tende para uma Gaussiana.

No capítulo 3, visando obter um melhor entendimento qualitativo da função teste a ser empregada no estudo da equação de Gross-Piteaevskii, analisaremos detalhadamente uma situação mais simples: a do oscilador anarmônico com energia potencial  $V(x) = \lambda|x|^{2n}$ , ( $n > 0$ ). Inicialmente, empregaremos uma função teste Gaussiana que verificaremos aproximar bem somente para o caso  $n$  próximo de um. Tendo em vista este fato, partiremos para a utilização de uma nova função teste. Motivados pela estatística generalizada de Tsallis[26] e baseados na respectiva generalização da exponencial, consideraremos a generalização da função Gaussiana, que utilizaremos como função teste; esta função é conhecida como Gaussiana generalizada ou Gaussiana- $q$ , ou ainda Tsallisiana. A Tsallisiana é dependente de um parâmetro real  $q$ , a qual nos fornece uma indicação do quanto ela se afasta da Gaussiana. Como veremos, os resultados obtidos com a Tsallisiana como função teste são impressionantemente acurados.

No capítulo 4, veremos que o funcional de Gross-Pitaevskii fornecerá uma

equação não-linear de Schroedinger (ENLS), a equação de Gross-Pitaevskii, para a descrição do CBE. Para solução da ENLS introduziremos como função teste a função Tsallisiana, já empregada no caso do oscilador anarmônico. Esta função teste tem os comportamentos limites corretos para o caso repulsivo, interpolando suavemente entre o gás ideal e o limite de Thomas-Fermi. Além disto, ela se aplica tão bem aos CBE com interações repulsivas, quanto aos condensados com interações atrativas. Deve ser ressaltado que a Tsallisiana com  $q < 1$  corresponde à função proposta por Fetter e, para  $q > 1$ , ela estende a proposta de Fetter para o caso atrativo. Neste capítulo, também, através da minimização da energia por partícula (o funcional de Gross-Pitaevskii), obteremos os valores dos parâmetros variacionais e, conseqüentemente, a função de onda do estado fundamental para o CBE de  $^{87}\text{Rb}$  (interações repulsivas) e para o CBE de  $^7\text{Li}$  (interações atrativas). De posse desta forma analítica da função de onda para o condensado, expressaremos analiticamente observáveis pertinentes. Por exemplo, os valores médios quadráticos,  $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$  e  $\sqrt{\langle z^2 \rangle}$ , que caracterizam o tamanho médio da nuvem atômica, em ambas as direções, a anisotropia da distribuição das velocidades, caracterizada por  $\sqrt{\langle p_z^2 \rangle / \langle p_x^2 \rangle}$ , a razão de perda de partículas e a densidade do condensado. No caso do CBE de  $^7\text{Li}$  a interação é atrativa, a qual é caracterizada por um comprimento de espalhamento de onda- $s$  negativo. À medida que o número de átomos aprisionados cresce, o CBE contrai e cresce a não uniformidade na região central. Após um número crítico de átomos na armadilha, o condensado colapsa. Este comportamento é descrito por nossa função de onda, e o número crítico para o condensado de  $^7\text{Li}$  está em bom acordo com outras predições numéricas[21].

No capítulo 5, baseado na mesma função de onda teste, agora modificada para levar em conta os estados vorticosos, resolveremos a equação não-linear de Schroedinger tanto para o CBE de  $^{87}\text{Rb}$  quanto para o CBE de  $^7\text{Li}$ , variacionalmente. Após a obtenção dos parâmetros variacionais via minimização da energia por partícula, calcularemos os valores de observáveis físicos de interesse.

No capítulo seguinte, capítulo 6, apresentaremos as conclusões referentes ao trabalho apresentado, ressaltando os bons resultados obtidos pela função teste aqui empregada. Deste modo, as contribuições desta monografia estarão apoiadas na introdução de uma nova função teste para o estudo variacional de osciladores anarmônicos e condensados de Bose-Einstein, de  $^{87}\text{Rb}$  e  $^7\text{Li}$ . Neste último caso, serão investigados os estados fundamental e vorticosos deste condensados.

A motivação para o presente trabalho é mostrar uma alternativa tão eficiente quanto o cálculo numérico, porém mais simples e mais amigável para a análise, obtenção e previsão de resultados destes sistemas. Os cálculos necessários para todos os tópicos apresentados serão integrações analíticas simples, descritas no texto, e cálculos numéricos de mínimos de funções, executados através do software *Mathematica* [27] rodando no ambiente Windows. Os resultados obtidos são bastante precisos quando comparados com os numéricos disponíveis na literatura.

Além disso, foram incorporados dois apêndices ao trabalho. O primeiro versando sobre o método variacional, ferramenta básica deste trabalho. No segundo apêndice, algumas idéias básicas sobre a estatística generalizada de Tsallis, enfatizando a generalização da função exponencial a ela vinculada.

## Capítulo 2

### CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN

Descrevemos resumidamente o arranjo experimental e a teoria relativos à condensação de Bose-Einstein para átomos alcalinos. Esta apresentação é direcionada à exposição, em linhas gerais, da conexão entre os recentes experimentos, datados da segunda metade da década de 90, relativos à condensação de átomos e à equação de Gross-Pitaevskii. Inicialmente tecemos alguns comentários sobre o arranjo experimental que permitiu verificar a existência de condensados para átomos alcalinos. A seguir apresentamos sucintamente como pode ser obtida a equação para um condensado, a equação de Gross-Pitaevskii. Assim, este capítulo é basicamente importante para motivar, contextualizar e estabelecer a notação empregada nas discussões sobre os condensados de Bose-Einstein (CBE) estudados nos capítulos seguintes.

#### 2.1 Arranjo experimental.

Desde o início dos anos 70 tem havido um interesse crescente, por parte de experimentais, de encontrar um condensado de Bose-Einstein em um gás diluído à baixa temperatura. Um dos primeiros candidatos foi o gás de átomos de hidrogênio com polarização de spin ( $H_{\uparrow}$ )[15]. Estes átomos eram imaginados estáveis como um gás, mesmo à  $T = 0$  K. Este fato devia-se aos átomos de  $H_{\uparrow}$  não poderem se combinar, posto que não existem estados ligados do potencial interatômico entre dois tais átomos. Logo, a fase sólida, bem como a fase líquida, não poderiam ser formadas [34]. Entretanto, em densidades altas, as interações de três corpos tornam-se importantes. Estas interações trocam os spins de alguns átomos permitindo, deste modo, a combinação entre eles e a respectiva formação de moléculas de  $H_2$ . As densidades mais altas eram uma imposição da técnica de resfriamento criogênico. Por meio desta técnica era possível obter temperaturas de aproximadamente  $10^{-4}$  K, mas não inferiores\*.

O candidato mais provável ao CBE passou a ser um gás diluído de átomos alcalinos: *Li*, *Na*, *K*, *Rb* ou *Cs*. Estes átomos tem a seu favor as suas transições ópticas, excitáveis pelos lasers disponíveis, e as suas estruturas internas de níveis energéticos são favoráveis ao resfriamento por lasers até a temperaturas muito baixas.

A estratégia utilizada para observação do primeiro CBE foi desacelerar o gás de átomos alcalinos, inicialmente à temperatura ambiente, por laser e capturá-lo em uma armadilha criada por diodos lasers. Esta técnica permitiu atingir temperaturas da ordem de  $10^{-6}$  K. Porém esta ordem de grandeza da temperatura ainda é insuficiente

---

\*O CBE de  $H_{\uparrow}$  foi observado, pela primeira vez, em junho de 1998, após quase 20 anos de trabalho[35].

para a formação do CBE e, como átomos alcalinos podem ser aprisionados em armadilhas magnéticas (possuem estrutura de “um elétron” e seus spins podem ser alternados controladamente), o gás de átomos alcalinos aprisionado magneto-ópticamente pode ser novamente esfriado, desta vez evaporativamente, até a temperatura necessária. Combinando as técnicas de esfriamento por laser e esfriamento evaporativo, os cientistas puderam obter sucesso em atingir a temperatura e a densidade necessárias à formação do CBE.

Pesquisadores[2] usaram armadilhas ópticas e magnéticas para criar o CBE, uma pequena *bola* de átomos de  $^{87}\text{Rb}$ , os quais eram tão estacionários quanto permitido pelo princípio da incerteza. Esta *bolinha*, envolvida por uma nuvem difusa de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  normais (temperaturas mais altas) foi o primeiro CBE observado.

Este CBE foi criado dentro de uma pequena câmara de vidro (figura (1.1)), com vácuo de aproximadamente  $10^{-11}$  Torr, envolvida por um arranjo de magnetos, lasers e computadores em um laboratório do Joint Institute Laboratory for Astrophysics (JILA). Começando com um gás, inicialmente à temperatura ambiente, estes pesquisadores frearam os átomos com laser, através da absorção de fótons com uma determinada energia e a emissão de fótons com energia mais alta, e os capturaram em uma armadilha óptica (criada por diodos lasers similares aos utilizados em impulsadores de discos compactos, CD's). Os lasers eram alinhados de modo a bombardearem os átomos a partir de qualquer direção: pela frente, por trás, pela direita, pela esquerda, por cima e por baixo[1].

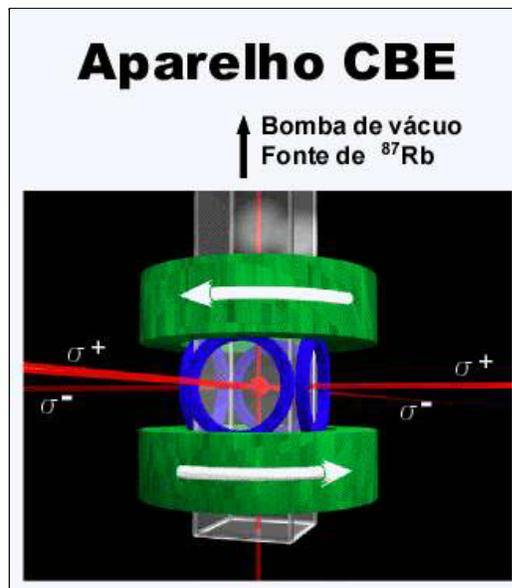


Figura 1.1 - Configuração magneto-óptica: Três pares de feixes de laser contra-propagando com polarizações de spin opostas ( $\sigma^+$  e  $\sigma^-$ ) superpostos ao campo magnético das bobinas de Helmholtz.<sup>†</sup>

O comprimento de onda dos fótons foram escolhidos de maneira que estes somente interagiriam com átomos que estivessem se movendo na mesma direção e em

<sup>†</sup>Estas imagens (figuras 1.1 e 1.2) foram obtidas de Mike Mathews, membro do grupo de JILA, via <http://jilawww.colorado.edu/www/press/images.html>

sentido contrário ao do movimento dos fótons (choque frontal). Esta técnica esfriou os átomos até  $10^{-6}$  K, ainda muito quente para o CBE, então cerca de  $10^7$  destes átomos foram capturados por esta armadilha de luz. Uma vez tendo os átomos aprisionados, os lasers foram desligados e os átomos mantidos no lugar por um campo magnético. Isto foi possível devido ao spin do elétron.

Os átomos são submetidos a outra sessão de congelamento, desta vez selecionando-se os mais quentes e ejetando-os da armadilha. À medida que saem os átomos mais quentes, carregando consigo calor dos demais, a fraca interação entre os restantes permite a obtenção de nova temperatura, agora mais baixa. Reduz-se a intensidade da armadilha, permitindo que átomos com menos energia sejam ejetados, e assim por diante. Esta é a técnica do resfriamento evaporativo.

O *pulo do gato* foi aprisionar uma densidade suficientemente alta de átomos em uma temperatura suficientemente baixa. O grupo em JILA[2] observou que como os átomos mais frios tem uma tendência de desviar-se do centro da armadilha (o fundo do poço de potencial da armadilha magnética), era necessário uma nova estratégia: foi criado um aparelho que permitia mover a armadilha magnética em torno do centro do sistema e aprisionar os átomos *fujões*. Este foi o passo final que permitiu ao grupo atingir a temperatura recorde de  $20 \times 10^{-9}$  K.

A fração condensada apareceu em uma densidade de  $2,5 \times 10^{12} \text{cm}^{-3}$  em uma temperatura de  $170 \times 10^{-9}$  K e pode ser preservada por 15 segundos. A certeza da condensação de Bose-Einstein foi garantida por três fatos: 1)- no topo de uma distribuição térmica larga de velocidade, surgiu um pico estreito, centrado, na velocidade zero; 2)-a fração dos átomos condensados contidos neste pico, estreito e centrado na velocidade zero, cresceu abruptamente quando a temperatura foi ainda mais reduzida; e 3)- o pico exibiu uma distribuição de velocidades anisotrópica, não-térmica, esperada para o estado quântico de mínima energia da armadilha magnética, em contraste com a distribuição isotrópica, térmica das velocidades observada na fração não-condensada [2]. Como pode ser visto da figura (2.2), a primeira imagem corresponde ao diagrama dos espaço de fase momentos antes da condensação. A imagem do meio é o diagrama no momento imediatamente seguinte à condensação. A terceira imagem é o digrama do espaço de fase para o condensado, após uma posterior evaporação, quando ficou um condensado quase puro. A dimensão do campo de visão é de  $200 \mu\text{m} \times 270 \mu\text{m}$ , o que corresponde a uma distância viajada pelos átomos durante 1/20 seg. As cores mais escuras correspondem à velocidades mais altas, e quanto mais clara a tonalidade mais baixa a velocidade.

## 2.2 Operador número

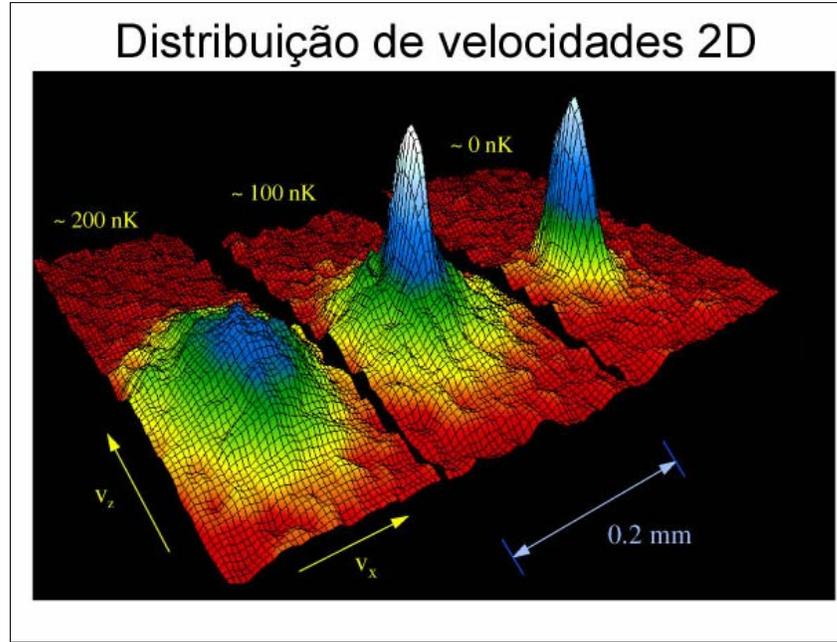
Visando a apresentação da equação fundamental desta monografia, a equação de Gross-Pitaevskii, faremos a seguir uma breve exposição do formalismo de segunda quantização[29]. No contexto da Mecânica Quântica, um ambiente natural para discutirmos sistemas compostos por muitas partículas *idênticas* é o do formalismo da segunda quantização, o qual passaremos a descrever concisamente, restrito ao caso não-relativístico. O objeto básico neste formalismo são os operadores de campo  $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$  e seu conjugado Hermitiano  $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)$ . Basicamente,  $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$  representa um operador de

destruição de partículas e  $\hat{\psi}^+(\mathbf{r},t)$  o operador de criação.

Neste contexto o operador densidade de partículas é  $\hat{n}(\mathbf{r},t) = \hat{\psi}^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$ , e o operador número corresponde a sua integral,

$$\hat{N} = \int \hat{n}(\mathbf{r},t) d^3\mathbf{r} = \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r},t)\hat{\psi}(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}. \quad (2.1)$$

Assim, os valores esperados de  $\hat{n}(\mathbf{r},t)$  e  $\hat{N}$  fornecem a densidade média de partículas e o número médio de partículas, respectivamente. A integral constante em  $\hat{N}$ , assim como as demais constantes neste capítulo, referem-se a todo o volume ocupado pelo sistema<sup>‡</sup>.



*Figura 2.2* - Imagem com simulação em cor da distribuição de velocidades em uma nuvem de átomos de  $^{87}\text{Rb}$ . a) - pouco antes da condensação de Bose-Einstein; b) - exatamente após aparecer a condensação, e c) - após alguma evaporação, quando ficamos com uma amostra do condensado quase puro.

### 2.3 Operadores energias cinética e potencial

Os demais operadores relativos às grandezas físicas são também escritos em termos de  $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$  e  $\hat{\psi}^+(\mathbf{r},t)$ . Por exemplo, a energia cinética para um conjunto de partículas idênticas de massa  $m$  é

$$\hat{E}^{(c)} = \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r},t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r},t) d^3\mathbf{r}, \quad (2.2)$$

<sup>‡</sup>Os operadores  $\psi$  e  $\psi^+$  dependem continuamente de  $\mathbf{r}$ . Caso as partículas tenham spin não nulo, estes operadores dependerão do estado de spin. Além disto, as integrais em (2.1) e nas demais equações deste capítulo devem ser substituídas por uma operação dupla: integral espacial e somatória nos estados de spin.

e a energia potencial de interação das partículas devido a um potencial externo  $V(\mathbf{r}, t)$  é dada por

$$\widehat{E}^{(p)} = \int \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}, t) V(\mathbf{r}, t) \widehat{\psi}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \int V(\mathbf{r}, t) \widehat{n}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}. \quad (2.3)$$

Por sua vez, a energia de interação entre as partículas envolve mais que dois operadores de campo. No caso de uma interação tipo par,  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ , a energia correspondente toma a forma

$$\widehat{E}^{(U)} = \frac{1}{2} \int \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_1, t) \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \widehat{\psi}(\mathbf{r}_2, t) \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \quad (2.4)$$

Geralmente temos  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  indicando que esta interação depende exclusivamente da posição relativa entre as partículas.

## 2.4 O Hamiltoniano e a equação de movimento para $\psi$

Basicamente, para a formação do operador Hamiltoniano do sistema devemos levar em conta todas as contribuições de energia cinética, de interação com campos externos, interação entre duas partículas, etc. Por exemplo, o Hamiltoniano para um sistema de partículas idênticas em um campo externo  $V(\mathbf{r}, t)$  e com interações do tipo par  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$  é

$$\begin{aligned} \widehat{H} = & \int \left[ \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_1, t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t) + \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_1, t) V(\mathbf{r}_1, t) \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \int \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_1, t) \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \widehat{\psi}(\mathbf{r}_2, t) \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t) d^3\mathbf{r}_2 \right] d^3\mathbf{r}_1. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Como continuação desta breve discussão sobre segunda quantização, notemos que os operadores  $\widehat{\psi}(\mathbf{r}, t)$  e  $\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}, t)$  satisfazem algumas regras de comutação a depender do tipo de partícula que descrevem: férmions ou bósons. Mais precisamente,

$$\left[ \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t), \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}, t) \right]_{\pm} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \quad (2.6)$$

e

$$\left[ \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t), \widehat{\psi}(\mathbf{r}, t) \right]_{\pm} = \left[ \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_1, t), \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}, t) \right]_{\pm} = 0, \quad (2.7)$$

onde

$$\left[ \widehat{A}, \widehat{B} \right]_{\pm} = \widehat{A}\widehat{B} \pm \widehat{B}\widehat{A}. \quad (2.8)$$

O sinal “+” (anti-comutador) corresponde ao caso fermiônico e o sinal “−” (comutador) ao caso bosônico.

A equação dinâmica para  $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$  ou  $\hat{\psi}^+(\mathbf{r},t)$  pode ser obtida através da equação de Heisenberg. Para o caso de  $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$  temos

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \hat{H} \right]_-, \quad (2.9)$$

independentemente do sistema ser formado por bósons ou férmions. A seguir passaremos a calcular  $\left[ \hat{\psi}, \hat{H} \right]_-$  para o caso bosônico (o resultado para o caso fermiônico é formalmente o mesmo). Usando o Hamiltoniano (2.5) verificamos que

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \hat{H} \right]_- &= \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1,t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1,t) d^3\mathbf{r}_1 \right] + \\ &+ \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1,t) \hat{V}(\mathbf{r},t) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1,t) d^3\mathbf{r}_1 \right] + \\ &+ \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1,t) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2,t) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2,t) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1,t) d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_1 \right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

As três contribuições são calculadas de maneira similar. Para exemplificar o cálculo, vamos considerar a primeira contribuição,

$$\begin{aligned} I &= \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1,t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1,t) d^3\mathbf{r}_1 \right] \\ &= \int \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1,t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1,t) \right] d^3\mathbf{r}_1. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Empregando as relações de comutação (2.6) e (2.7) obtemos

$$I = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1,t) d^3\mathbf{r}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}(\mathbf{r},t). \quad (2.12)$$

Procedendo de maneira análoga para os outros dois termos, verificamos que a equação de Heisenberg (2.9) reduz-se a

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t) \hat{\psi}(\mathbf{r},t) + \\ &+ \left[ \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1,t) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1,t) d^3\mathbf{r}_1 \right] \hat{\psi}(\mathbf{r},t), \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde foi usado  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = U(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t)$ .

No estudo da condensação de Bose-Einstein, como o próprio nome sugere, é empregado basicamente a vertente bosônica. Estritamente falando, uma descrição completa de um conjunto de átomos deveria levar em conta todas as partículas envolvidas: elétrons, prótons, etc.. Desta forma teríamos operadores de campo para cada tipo de partícula envolvida. Porém, em nossa análise, vamos considerar apenas o Hamiltoniano efetivo para o sistema de átomos. Neste caso o Hamiltoniano deveria exibir contribuições de interações tipo três partículas, quatro partículas, e assim por diante. Por simplicidade vamos considerar somente as interações tipo par. Na realidade, estudos indicam que estas contribuições subseqüentes a interação tipo par podem ser desprezadas no estudo do CBE.

## 2.5 Equação de Gross-Pitaevskii

Quando se supõe a existência de um condensado, é razoável (para não dizer natural) supor que o operador de campo  $\widehat{\psi}(\mathbf{r},t)$  comporte-se aproximadamente como seu valor médio[17]. Matematicamente,

$$\widehat{\psi}(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r},t) + \Delta\widehat{\psi}(\mathbf{r},t), \quad (2.14)$$

onde

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \langle \widehat{\psi}(\mathbf{r},t) \rangle \quad (2.15)$$

e  $\Delta\widehat{\psi}(\mathbf{r},t)$  é a diferença entre  $\widehat{\psi}(\mathbf{r},t)$  e  $\langle \widehat{\psi}(\mathbf{r},t) \rangle$ , aqui considerada pequena. Assim, substituiremos sistematicamente de agora em diante

$$\widehat{\psi}(\mathbf{r},t) \quad \text{por} \quad \Psi(\mathbf{r},t) \quad \text{e} \quad \widehat{\psi}^+(\mathbf{r},t) \quad \text{por} \quad \Psi^*(\mathbf{r},t). \quad (2.16)$$

Conseqüentemente, se levarmos a cabo esta substituição na equação de movimento para o operador de campo (2.13), obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = & \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \right) \Psi(\mathbf{r},t) + \\ & + \left[ \int \Psi^*(\mathbf{r}_1,t) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}_1,t) d^3 \mathbf{r}_1 \right] \Psi(\mathbf{r},t). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Além desta aproximação, podemos empregar

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = U_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (2.18)$$

Em outras palavras, a interação interpartículas pode, com boa aproximação, ser considerada desprezível quando as partículas estão distantes (baixa densidade) e é relevante somente quando elas estão muito próximas. Além disto, em baixas temperaturas, o comprimento de onda de de Broglie para os átomos é muito grande comparado com o alcance da energia potencial interatômica[30]. Empregando esta aproximação na equação (2.17) e fazendo a integração em  $\mathbf{r}_1$  verificamos que

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \right) \Psi(\mathbf{r},t) + U_0 |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 \Psi(\mathbf{r},t). \quad (2.19)$$

(2.19) é uma equação de Schroedinger não-linear (ESNL), a equação de *Gross-Pitaevskii* [16], para a função de onda do condensado  $\Psi(\mathbf{r},t)$ . Adicionada a esta equação devemos ter a condição de normalização

$$\int \Psi^*(\mathbf{r},t) \Psi(\mathbf{r},t) d^3 \mathbf{r} = N \quad (2.20)$$

advinda da equação (2.1). Aqui  $N$  é o número de partículas do condensado<sup>§</sup>.

---

<sup>§</sup>Outras referências autorizadas no assunto, contendo amplas discussões e referências bibliográficas, são [31, 32, 33].

## 2.6 Solução estacionária

Para obtermos a solução estacionária da equação de Gross-Pitaevskii, podemos considerar que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-i\frac{\mu}{\hbar}t\right)\psi(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

onde  $\mu$  é uma constante (como veremos no capítulo 4,  $\mu$  é o potencial químico do condensado). A substituição desta função na equação (2.19) quando o potencial externo não depende explicitamente do tempo, conduz à equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo, isto é,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + U_0|\psi(\mathbf{r})|^2\right]\psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}). \quad (2.22)$$

A obtenção da solução aproximada (estados fundamental e com vórtices) desta equação para os condensados de  $^{87}\text{Rb}$  e  $^7\text{Li}$ , via *método variacional*, é o principal objetivo desta monografia.

## Capítulo 3

### OSCILADOR ANARMÔNICO: UM ESTUDO VARIACIONAL

Neste capítulo, através do método variacional para a equação de Schroedinger independente do tempo, analisaremos o estado fundamental de uma classe de osciladores anarmônicos definidos pela energia potencial  $V(x) = \lambda |x|^{2n}$ , com  $\lambda$  e  $n$  reais positivos. Primeiramente, usaremos no estudo uma função teste Gaussiana. A seguir, visando melhorar a aproximação, introduziremos uma família de estados baseada na estatística de Tsallis[26]. A nossa função teste terá um parâmetro real  $q$ , o qual diferenciará as várias funções testes dentro da família, e para  $q \rightarrow 1$  a função Gaussiana é recuperada. É interessante notar que este tipo de função teste (Tsallisiana\*) generaliza a função Gaussiana. Como resultado, demonstraremos que o uso de estados Tsallisianos levará a uma significativa melhoria dos valores obtidos para a energia do estado fundamental do oscilador anarmônico, quando comparados com valores fornecidos pelos estados Gaussianos. Neste contexto ainda, calcularemos a energia do estado fundamental numericamente, ressaltando quão boa são as soluções variacionais introduzidas neste trabalho. Esta análise será relevante nas discussões subsequentes, pois permitirá uma primeira comparação entre estados Gaussianos e os Tsallisianos.

#### 3.1 Oscilador anarmônico: estados Gaussianos

Passamos a calcular, variacionalmente, a energia do estado fundamental para uma classe de osciladores anarmônicos descrita pelo potencial

$$V(x) = \lambda |x|^{2n} \tag{3.1}$$

com  $\lambda$  e  $n$  reais e positivos. Vamos escolher, inicialmente, como função teste uma Gaussiana, isto é, aquela que representa o estado fundamental de um oscilador harmônico,

$$\Psi(x) = \exp\left(-\frac{a^2 x^2}{2}\right). \tag{3.2}$$

Nos cálculos seguintes esta função Gaussiana terá o parâmetro  $a$  ajustado

---

\*Esta função está em conexão com a Mecânica Estatística generalizada de Tsallis, e por isto a apelidamos de função Tsallisiana.

variacionalmente. Conforme discutido no apêndice A1, construímos a integral

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2 x^2}{2}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda |x|^{2n} \right) e^{-\frac{a^2 x^2}{2}} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2 x^2} dx}. \quad (3.3)$$

Neste ponto, é de bom alvitre fazermos um preâmbulo a respeito do Hamiltoniano usado em (3.3). É sempre conveniente escolhermos variáveis especiais de modo a simplificarmos ao máximo a expressão original. Isto, por sua vez, simplifica bastante a análise a ser efetuada. Em nosso caso particular construímos um Hamiltoniano na forma escalonada e independente dos parâmetros experimentais,

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} |\xi|^{2n}, \quad (3.4)$$

usando  $\xi = \beta x$ . Com esta mudança de variável vemos que

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda |x|^{2n} = -\frac{\hbar^2}{2m} \beta^2 \frac{d^2}{d\xi^2} + \lambda \frac{|\xi|^{2n}}{\beta^{2n}}. \quad (3.5)$$

Para obtermos a estrutura da Equação (3.4) com  $\hat{H} = \alpha \hat{\mathcal{H}}$  devemos supor que

$$\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} = \frac{\lambda}{\beta^{2n}} = \frac{\alpha}{2}, \quad (3.6)$$

implicando

$$\beta^2 = \left( \frac{2\lambda m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{1+n}} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{2\lambda m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{1+n}}. \quad (3.7)$$

Assim, podemos exibir gráficos e tabelas de valores médios e outras grandezas, derivadas do Hamiltoniano, em unidades de  $\alpha$ .

Tendo em vista estas notas, o problema é reduzido a análise de

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \frac{\xi^2}{2}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} |\xi|^{2n} \right) e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \frac{\xi^2}{2}} d\xi, \quad (3.8)$$

onde  $N$  é o fator de normalização, definido como

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi. \quad (3.9)$$

Calculando a derivada segunda e substituindo em (3.8), temos

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \frac{1}{N} \left( \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{1}{2} \frac{a^4}{\beta^4} \xi^2 e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \frac{a^2}{\beta^2} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} |\xi|^{2n} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi \right). \quad (3.10)$$

Como as duas primeiras integrais podem ser consideradas casos especiais da terceira integral, calcularemos diretamente a última. Inicialmente notamos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\xi|^{2n} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi = 2 \int_0^{\infty} \xi^{2n} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi = \frac{\beta^{2n+1}}{a^{2n+1}} \int_0^{\infty} z^{(n-1/2)} e^{-z} dz, \quad (3.11)$$

onde fizemos a mudança de variável ditada pela relação  $a^2 \xi^2 / \beta^2 = z$ . Por outro lado, usando a representação integral de Euler para a função Gama (ver ref. [36], pág. 933, equação 8.310.1),

$$\Gamma(t) = \int_0^{\infty} z^{(t-1)} e^{-z} dz, \quad \text{Re}(t > 0), \quad (3.12)$$

com  $t = n + 1/2$ , obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\xi|^{2n} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi = \left(\frac{\beta}{a}\right)^{2n+1} \Gamma(n + 1/2). \quad (3.13)$$

Logo, empregando este resultado com  $n = 1$  e  $n = 0$  temos para as demais integrais de interesse em (3.10)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \begin{array}{c} \xi^2 \\ 1 \end{array} \right\} e^{-\frac{a^2}{\beta^2} \xi^2} d\xi = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\beta}{a}\right)^3 \\ \sqrt{\pi} \frac{\beta}{a} \end{array} \right\}. \quad (3.14)$$

Após agruparmos os termos, chegamos ao valor médio do Hamiltoniano em função dos parâmetros  $a$  e  $\beta$ ,

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{a^2}{\beta^2} + \Gamma(n + 1/2) \beta^{2n} a^{-2n} \right). \quad (3.15)$$

O valor de  $a$  para o qual  $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$  tem um extremo, neste caso um mínimo, é obtido através da equação

$$0 = \left[ \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle}{\partial a} \right]_{a=a_0} = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\pi} \frac{a_0}{\beta^2} - 2n \Gamma(n + 1/2) \beta^{2n} a_0^{-2n-1} \right), \quad (3.16)$$

cuja solução pode ser escrita como

$$a_0 = \beta \left( \frac{2n \Gamma(n + 1/2)}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2n+2}}. \quad (3.17)$$

Substituindo este resultado em (3.15), temos o extremo, mínimo, do valor médio do Hamiltoniano

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\min} = \frac{1}{2} \left( \frac{\Gamma(n + 1/2)}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{n+1}} \left[ \frac{1}{2} (2n)^{\frac{1}{n+1}} + \left( \frac{1}{2n} \right)^{\frac{n}{n+1}} \right]. \quad (3.18)$$

Visto que  $\Gamma(1 + 1/2) = \sqrt{\pi}/2$ , este resultado, como esperado, recai diretamente no valor exato do estado fundamental do oscilador harmônico ( $V(\xi) = \xi^2/2$ ), isto é,  $E_0 = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\min, n=1} = 1/2$ .

Agora que temos uma expressão analítica para o estado fundamental do oscilador anarmônico, podemos comparar os valores calculados por integração numérica, efetuados um a um, e os valores dados pelo cálculo variacional acima. Esta comparação está devidamente representada na figura (3.1). A partir deste gráfico, verificamos claramente que a aproximação em questão (Gaussiana) é boa somente para  $n$  suficientemente próximo de um. Isto se deve principalmente ao fato das funções de onda para o estado fundamental diferirem em muito de uma Gaussiana para  $n$  suficientemente distinto de um, conforme está ilustrado na figura (3.2). Assim, seria de grande valia usarmos uma função teste que acomodasse melhor os comportamentos de cauda, longa ou curta, ditados pelo valor de  $n$ . Esta questão e suas consequências são os objetos de discussão do restante deste trabalho.

Nos cálculos numéricos relativos a esta seção, assim como em todo o resto do trabalho, empregamos o programa *Mathematica*[27]. Essencialmente usamos este programa para obtermos numericamente o mínimo de funções e resolvermos equações diferenciais ordinárias.

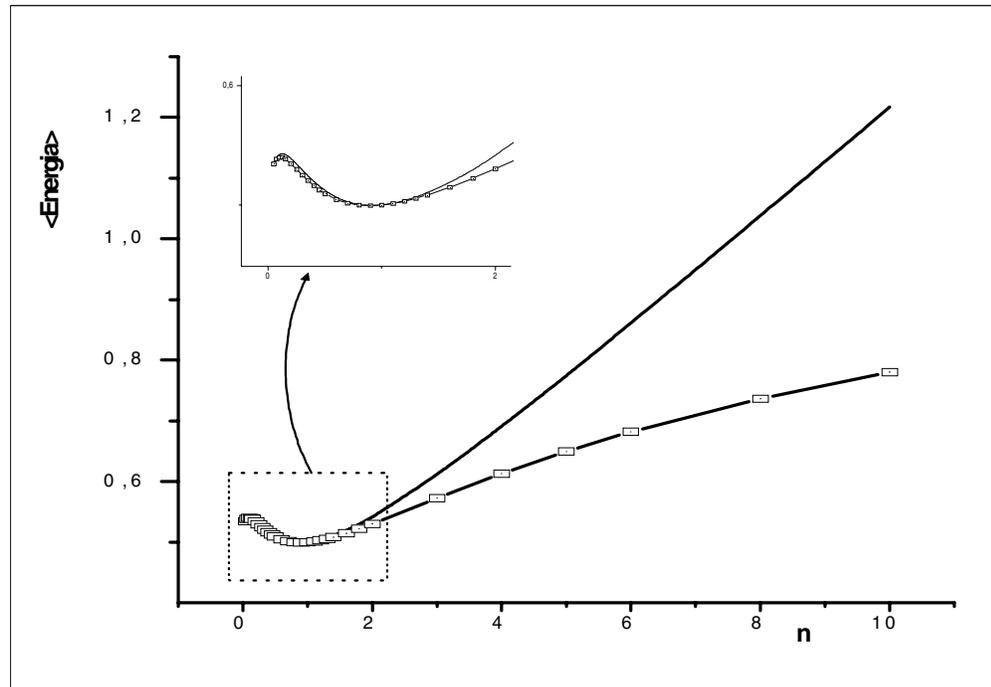


Figura 3.1 - Energia dos estado fundamental do oscilador anarmônico, em função de  $n$ . Os pontos representam valores obtidos por integração numérica e a linha sólida valores calculados variacionalmente via uma função teste Gaussiana.

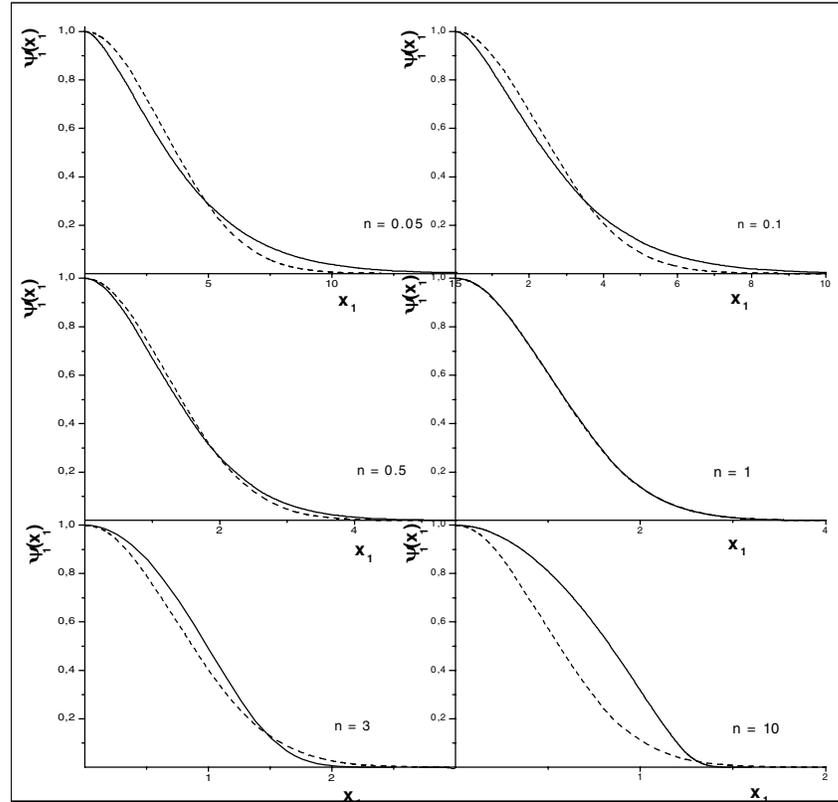


Figura 3.2 - Funções de onda do estado fundamental do oscilador anarmônico, para vários  $n$ 's. A linha sólida foi obtida numericamente, e a linha tracejada variacionalmente, através de uma função teste Gaussiana.

### 3.2 Gaussianas generalizadas

Consideraremos agora funções testes que se ajustem melhor às condições concretas do problema e que ainda propiciem uma fácil manipulação algébrica. Dito de outra maneira, quando  $n > 1$  deveremos ter um estado com cauda mais curta que a da Gaussiana, indicando o carácter mais fortemente confinante do potencial. Por outro lado, quando  $n < 1$  teremos uma situação mais fracamente confinante e, portanto, o estado fundamental deve ter cauda mais longa do que aquela de uma função Gaussiana. Uma classe de funções, que satisfaz todos estes requisitos e ao mesmo tempo propicia uma manipulação algébrica relativamente fácil, é a função Gaussiana generalizada baseada na estatística de Tsallis (função Tsallisiana).

No apêndice A2 apresentamos de maneira sucinta uma introdução sobre a estatística de Tsallis, ressaltando a seguinte generalização da função exponencial

$$e_q^x \equiv \exp_q(x) \equiv [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}. \quad (3.19)$$

Neste contexto, é natural considerarmos como generalização da distribuição Gaussiana

$$T_q(x) = \exp_q(-x^2) \equiv [1 + (1 - q)(-x^2)]^{1/(1-q)}. \quad (3.20)$$

Gráficos ilustrando o comportamento desta generalização da função Gaussiana estão expostos na figura (3.3). A partir desta figura fica claro que: para  $q > 1$  temos funções com caudas longas e para  $q < 1$  as funções tem caudas curtas como desejado. Isto é,  $T_q(x)$  para  $q < 1$  é não nula somente para  $|x| < \sqrt{1/(1-q)}$ , em conformidade com a interpretação probabilística da exponencial generalizada discutida no apêndice A2.

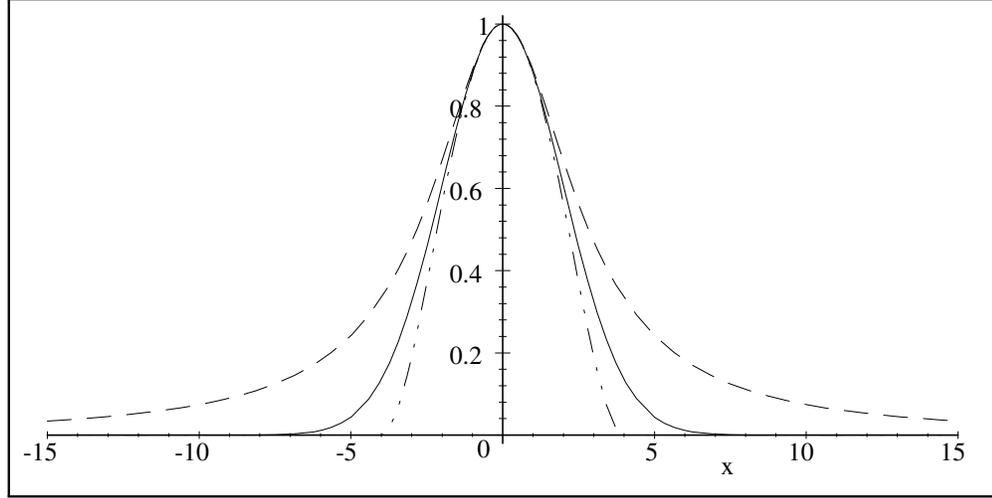


Figura 3.3 - Gráfico da Gaussiana generalizada, ou Tsallisiana, para alguns valores de  $q$ . A linha tracejada é a Lorentziana ( $q = 2$ ), a linha sólida é uma Gaussiana ( $q = 1$ ) e a linha ponto-ponto-traço é a Tsallisiana com  $q = 1/2$ .

### 3.3 Oscilador anarmônico: Gaussiana generalizada

Iremos agora proceder a outro cálculo aproximado da energia para o estado fundamental do oscilador anarmônico, descrito pelo Hamiltoniano (3.4). Usaremos como função teste a Tsallisiana

$$\psi_q(\xi) = \exp_q \left( -\frac{\xi^2}{2G} \right) = \left[ 1 + (1-q) \left( -\frac{\xi^2}{2G} \right) \right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.21)$$

onde  $q$  e  $G$  são os parâmetros a ajustar, via extremização do valor esperado do Hamiltoniano.

Empregaremos para  $n < 1$  uma função de onda com cauda mais longa que a da Gaussiana, isto é,  $q > 1$ . Neste caso, o limite de integração deve cobrir todo o espaço, desde  $-\infty$  até  $+\infty$ . Por outro lado, se  $n > 1$ , o potencial é mais fortemente confinante, o que implica soluções com caudas curtas, ou seja,  $q < 1$  e, portanto, conduzindo a cortes. São estes valores dos cortes, tomados como limites de integração, que correspondem aos valores de  $\xi$  limítrofes da região  $\psi_q \neq 0$ , ou  $1 - (1-q)(\xi_0^2/2G) = 0$ , fornecendo

$$\xi_0^\pm = \pm \xi_0 = \pm \sqrt{2G/(1-q)}, \quad (3.22)$$

onde o sinal negativo corresponde ao limite inferior da integral e o sinal positivo ao seu limite superior. Fica claro, então, que deveremos dividir nosso trabalho em duas etapas: 1)- cálculo da energia  $E$  para  $n > 1$  com  $q < 1$  e 2)- cálculo de  $E$  para  $n < 1$  e  $q > 1$ .

### 3.3.1 Oscilador anarmônico com $n > 1$

Para procedermos ao cálculo do valor esperado do Hamiltoniano escreveremos  $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \langle \hat{\mathcal{T}} \rangle + \langle \hat{\mathcal{V}} \rangle$ , onde

$$\langle \hat{\mathcal{T}} \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\xi_0}^{\xi_0} \psi_q^*(\xi) \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \psi_q(\xi) d\xi \quad (3.23)$$

e

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\xi_0}^{\xi_0} \psi_q^*(\xi) \left( \frac{1}{2} |\xi|^{2n} \right) \psi_q(\xi) d\xi \quad (3.24)$$

com

$$N = \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\xi_0}^{\xi_0} |\psi_q|^2 d\xi. \quad (3.25)$$

Começaremos nossos cálculos pelo valor médio da energia potencial usando a função teste (3.21), isto é,

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{V}} \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\xi_0}^{\xi_0} \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{1}{1-q}} \left( \frac{1}{2} |\xi|^{2n} \right) \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{1}{1-q}} d\xi \\ &= \frac{1}{N} \int_0^{\xi_0} \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{2}{1-q}} \xi^{2n} d\xi. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Agora, fazendo a mudança de variável definida pela relação

$$\xi = \sqrt{\frac{2G}{1-q}} y, \quad (3.27)$$

obtemos

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle = \frac{1}{N} \left( \frac{2G}{1-q} \right)^{\frac{2n+1}{2}} \int_0^1 (1-y^2)^{\frac{2}{1-q}} y^{2n} dy. \quad (3.28)$$

Observando o integrando acima vemos que a identidade (ver ref. [36], pg. 294, equação 3.251.1)

$$\int_0^1 (1-x^\lambda)^{\nu-1} x^{\mu-1} dx = \frac{1}{\lambda} B\left(\frac{\mu}{\lambda}, \nu\right) \quad \text{Re}(\mu) > 0, \text{Re}(\nu) > 0 \text{ e } \lambda > 0, \quad (3.29)$$

é a indicada para o nosso cálculo. Comparando esta identidade com a integral em (3.28), concluímos que  $\mu - 1 = 2n$ ,  $\lambda = 2$  e  $\nu - 1 = 2/(1 - q)$ , levando a

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle = \frac{1}{N} \left( \frac{2G}{1-q} \right)^{\frac{2n+1}{2}} \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2}) \Gamma\left(1 + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2} + n + \frac{2}{1-q}\right)}. \quad (3.30)$$

Para obtermos a última igualdade usamos a relação entre as funções Beta e Gama (ver ref [36], pg. 950, equação 8.384.1),

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x + y)}. \quad (3.31)$$

Resta ainda calcularmos a constante  $N = \langle \psi | \psi \rangle$ . Isto é feito através da integral

$$N = \int_{-\xi_0}^{\xi_0} \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{2}{1-q}} d\xi = 2 \int_0^{\xi_0} \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{2}{1-q}} d\xi. \quad (3.32)$$

Empregando a mudança de variável (3.27) na integral acima, temos

$$N = 2 \sqrt{\frac{2G}{1-q}} \int_0^1 (1-y^2)^{\frac{2}{1-q}} dy \quad (3.33)$$

e usando a integral (3.29), porém desta vez com  $\mu = 1$ ,  $\lambda = 2$  e  $\nu = 1 + 2/(1 - q)$ , concluímos que

$$N = 2 \sqrt{\frac{2G}{1-q}} B\left(\frac{1}{2}, \frac{2}{1-q} + 1\right) = 2 \sqrt{\frac{2G}{1-q}} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma\left(1 + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}, \quad (3.34)$$

onde usamos  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ .

Deste modo, podemos expressar o valor médio da energia potencial do oscilador anarmônico, usando as equações (3.30) e (3.34), como sendo

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle = B_n(q) G^n, \quad (3.35)$$

onde

$$B_n(q) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left( \frac{2}{1-q} \right)^n \frac{\Gamma\left(\frac{2}{1-q} + \frac{3}{2}\right) \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(n + \frac{2}{1-q} + \frac{3}{2}\right)}. \quad (3.36)$$

Passemos ao cálculo do valor médio da energia cinética para o oscilador anarmônico. A expressão para a energia cinética média, usando o estado Tsallisiano,

é

$$\begin{aligned} \langle \widehat{T} \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\xi_0}^{\xi_0} \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{1}{1-q}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{1}{1-q}} d\xi \\ &= -\frac{1}{2NG} \int_{-\xi_0}^{\xi_0} \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{1+q}{1-q}} d\xi + \frac{q}{2NG^2} \int_{-\xi_0}^{\xi_0} \xi^2 \left[ 1 - (1-q) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{2q}{1-q}} d\xi. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Fazendo uso da mudança de variável (3.27) e algumas simplificações, chegamos à

$$\begin{aligned} \langle \widehat{T} \rangle &= -\frac{1}{NG} \sqrt{\frac{2G}{1-q}} \left[ \int_0^1 (1-y^2)^{\frac{1+q}{1-q}} dy \right] + \\ &\quad + \frac{2}{NG} \frac{q}{1-q} \sqrt{\frac{2G}{1-q}} \left[ \int_0^1 y^2 (1-y^2)^{\frac{2q}{1-q}} dy \right]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Novamente recorrendo à identidade (3.29) e ao fator de normalização  $N$ , equação (3.34), encontramos, juntamente com o uso das identidades (3.31) e  $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$ , que a equação acima pode ser escrita da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} \langle \widehat{T} \rangle &= -\frac{1}{NG} \sqrt{\frac{2G}{1-q}} B\left(\frac{1}{2}; \frac{2}{1-q}\right) + \frac{2}{NG} \frac{q}{1-q} \sqrt{\frac{2G}{1-q}} B\left(\frac{3}{2}; \frac{1+q}{1-q}\right) \\ &= \frac{1}{2G} \frac{\Gamma\left(\frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{1-q}\right)} \frac{\left(\frac{1}{2} + \frac{2}{1-q}\right) \Gamma\left(\frac{2}{1-q} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{1-q} + \frac{1}{2}\right)} - \\ &\quad - \frac{q}{1-q} \frac{1}{2G} \frac{\Gamma\left(\frac{2}{1-q} - 1\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{1-q} - 1\right)} \frac{\left(\frac{1}{2} + \frac{2}{1-q}\right) \Gamma\left(\frac{2}{1-q} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{1-q} + \frac{1}{2}\right)} \\ &= \frac{A(q)}{G}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde

$$A(q) = \frac{5-q}{8(1+q)}. \quad (3.40)$$

Somando os valores médios das energias potencial (3.35) e cinética (3.39), temos o valor médio do Hamiltoniano,

$$E_n(q, G) = \frac{A(q)}{G} + B_n(q)G^n. \quad (3.41)$$

Como desejamos obter o mínimo do valor médio da energia, vamos empregar em nossa análise as equações

$$\left. \frac{\partial E_n(q, G)}{\partial q} \right|_{q=q_0} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial E_n(q, G)}{\partial G} \right|_{G=G_0} = 0, \quad (3.42)$$

que são condições necessárias de mínimo. A última delas para  $q$  genérico leva a

$$-\frac{A(q)}{G_0^2} + nB_n(q)G_0^{n-1} = 0, \quad (3.43)$$

implicando

$$G_0 = \left( \frac{A(q)}{nB_n(q)} \right)^{\frac{1}{n+1}}. \quad (3.44)$$

Este resultado substituído em  $E_n(q, G)$  conduz a

$$E_{n<1}(q, G_0) = E_{n<1}(q) = A(q) \left( \frac{nB_n(q)}{A(q)} \right)^{\frac{1}{n+1}} + B_n(q) \left( \frac{A(q)}{nB_n(q)} \right)^{\frac{n}{n+1}} \quad (3.45)$$

e, conseqüentemente,

$$E_{n<1}(q) = [A(q)^n B_n(q)]^{\frac{1}{n+1}} \left( n^{\frac{1}{n+1}} + n^{-\frac{n}{n+1}} \right). \quad (3.46)$$

Assim, a procura do extremo de  $E_n(q, G)$  está reduzido a análise do extremo de  $E_n(q)$ . De fato, as equações (3.42) implicam em

$$\begin{aligned} \left. \frac{dE_n(q)}{dq} \right|_{q=q_0} &= \left. \frac{dE_n(q, G_0)}{dq} \right|_{q=q_0} = \frac{\partial E_n(q, G_0)}{\partial q} + \frac{\partial E_n(q, G_0)}{\partial G_0} \frac{dG_0}{dq} \Big|_{q=q_0} \\ &= \left. \frac{\partial E_n(q, G_0)}{\partial q} \right|_{q=q_0} = 0. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Antes de analisarmos os extremos de  $E_n(q)$ , obteremos a expressão análoga para o caso  $n < 1$ , isto é,  $q > 1$ .

### 3.3.2 Oscilador anarmônico com $n < 1$

Seguiremos os mesmos moldes utilizados para os cálculos dos valores médios quando  $n > 1$ , porém usaremos como função teste a Tsalliana com  $q > 1$ .

Deste modo, a energia potencial média é

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle = \frac{1}{2N} \int_{-\infty}^{\infty} |\xi|^{2n} \psi_q^2 d\xi = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} \xi^{2n} \left[ 1 + (q-1) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{-\frac{2}{q-1}} d\xi. \quad (3.48)$$

Fazendo a mudança de variável  $y = \sqrt{2G/(q-1)} \xi$ , esta integral pode ser reescrita como

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle = \frac{1}{N} \left( \frac{2G}{q-1} \right)^{n+\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} y^{2n} (1+y^2)^{-\frac{2}{q-1}} dy. \quad (3.49)$$

Para calcularmos esta integral, usaremos a identidade (ref. [36], pg. 295, equação 3.251.2)

$$\int_0^{\infty} x^{\mu-1} (1+x^2)^{\nu-1} dx = \frac{1}{2} B \left( \frac{\mu}{2}, 1-\nu-\frac{\mu}{2} \right), \quad \text{Re } \mu > 0, \text{Re} \left( \nu + \frac{1}{2}\mu \right) < 1. \quad (3.50)$$

Ao identificarmos  $\mu - 1 = 2n$ ,  $\nu - 1 = -2/(q - 1)$ , a integral (3.49) torna-se

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle &= \frac{1}{N} \left( \frac{2G}{q-1} \right)^{\frac{2n+1}{2}} B \left( \frac{2n+1}{2}, \frac{2}{q-1} - \frac{2n+1}{2} \right) \\ &= \frac{1}{N} \left( \frac{2G}{q-1} \right)^{\frac{2n+1}{2}} \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2}) \Gamma(\frac{2}{q-1} - (n + \frac{1}{2}))}{\Gamma(\frac{2}{q-1})}.\end{aligned}\quad (3.51)$$

Necessitamos, neste momento, da quantidade  $N = \langle \psi_q | \psi_q \rangle$ . Para tanto utilizamos a equação (3.50) e novamente a substituição de variáveis  $y = \sqrt{2G/(q-1)} \xi$ , implicando em

$$\begin{aligned}N &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ 1 + (q-1) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{-\frac{2}{q-1}} d\xi = \left( \frac{2G}{q-1} \right)^{\frac{1}{2}} 2 \int_{-\infty}^{\infty} (1 + y^2)^{-\frac{2}{q-1}} dy \\ &= \left( \frac{2G}{q-1} \right)^{\frac{1}{2}} B \left[ \frac{1}{2}, \frac{2}{q-1} - \frac{1}{2} \right] = \left( \frac{2\pi}{q-1} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(\frac{2}{q-1} - \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{2}{q-1})} G^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\quad (3.52)$$

A substituição de  $N$  na equação (3.51), com a subsequente simplificação, fornece

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle = D_n(q) G^n, \quad (3.53)$$

onde,

$$D_n(q) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left( \frac{2}{q-1} \right)^n \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2}) \Gamma(\frac{2}{q-1} - (n + \frac{1}{2}))}{\Gamma(\frac{2}{q-1} - \frac{1}{2})}. \quad (3.54)$$

Para finalizarmos o cálculo do valor médio do Hamiltoniano resta saber o valor médio da energia cinética. Para tal procedamos ao cálculo da integral

$$\langle \hat{\mathcal{T}} \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ 1 + (q-1) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{-\frac{1}{q-1}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \left[ 1 + (q-1) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{-\frac{1}{q-1}} d\xi. \quad (3.55)$$

Como já estamos bastante familiarizados com este tipo de cálculo, vamos nos limitar a reportar brevemente os resultados intermediários. Assim,

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathcal{T}} \rangle &= \frac{1}{2N} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ 1 + (q-1) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{\frac{-1}{q-1}} \times \\ &\times \left\{ -\frac{q}{G^2} \xi^2 \left[ 1 + (q-1) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{-2-\frac{1}{q-1}} + \frac{1}{G} \left[ 1 + (q-1) \frac{\xi^2}{2G} \right]^{-1-\frac{1}{q-1}} \right\} d\xi.\end{aligned}\quad (3.56)$$

Após a mudança de variável  $y = \sqrt{2G/(q-1)}\xi$ , as simplificações de praxe e a substituição de  $N$ , a expressão anterior resulta em

$$\langle \hat{\mathcal{T}} \rangle = \frac{A(q)}{G}, \quad (3.57)$$

onde  $A(q)$  está definido na equação (3.40). Isto mostra, portanto, que esta expressão tem a mesma forma tanto para  $q < 1$  quanto para  $q > 1$ .

Da mesma forma, como na seção anterior, o valor médio da energia é encontrado adicionando  $\langle \hat{\mathcal{T}} \rangle$  e  $\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle$ , resultando em

$$E_n(q, G) = \frac{A(q)}{G} + D_n(q)G^n, \quad (3.58)$$

com  $D_n(q)$  dado pela equação (3.54). Como as expressões (3.58) e (3.41) tem as mesmas formas, o resultado decorrente delas também tem a mesma forma. Logo, a expressão do extremo, mínimo no caso, da energia média é a própria (3.46) com  $B_n(q)$  substituído por  $D_n(q)$ . Logo para  $n > 1$ , temos

$$E_{n>1}(q) = [A(q)^n D_n(q)]^{\frac{1}{n+1}} \left( n^{\frac{1}{n+1}} + n^{-\frac{n}{n+1}} \right). \quad (3.59)$$

### 3.4 Resultados numéricos

Estando de posse da expressão da energia em função dos parâmetros  $n$  e  $q$ , devemos procurar o valor de  $q$  que minimiza esta expressão. Devido à dificuldade analítica do processo, vamos proceder numericamente. O processo numérico, tanto para  $n > 1$  como para  $n < 1$ , é exatamente o mesmo, porque as expressões para a energia tem a mesma forma. A seguir vamos descrever o procedimento empregado, e na sequência exibiremos os resultados numéricos assim obtidos.

Inicialmente derivamos a expressão da energia em relação ao parâmetro  $q$ , mantendo  $n$  constante. Procuramos o valor  $q_0$  que torna esta derivada nula. Colocando  $q_0$  na expressão para a energia, encontramos o valor aproximado variacionalmente usando o estado Tsallisiano. A seguir, comparamos o resultado obtido com o valor calculado através de integração numérica da equação de Schroedinger, que arbitramos como valor exato. A tabela (3.1) apresenta os valores da energia  $E_{\min}$ , aproximada e exata, incluindo o erro relativo, e de  $q_0$  como função do valor de  $n$ , ver também a figura (3.4). Neste ponto é interessante ressaltar que os dados apresentados na tabela (3.1) e na figura (3.4) mostram, inequivocamente, que a função teste empregada na nossa análise simula com grande precisão o comportamento do sistema. Além disto, a comparação entre as figuras (3.2) e (3.5) indica que nossa função de onda é substancialmente mais conveniente para este estudo que a Gaussiana. Do mesmo modo, comparando as figuras (3.2) e (3.4), podemos observar a incrível melhoria na qualidade da aproximação do valor médio da energia, quando passamos da função teste Gaussiana para a Tsallisiana.

Tabela 3.1 - A tabela mostra os valores da energia exata ( $E_{\min}(\text{Num})$ ) e aproximada ( $E(\text{Apr})$ ), os correspondentes valores de  $n$ , os valores de  $q_0$  e o erro cometido na aproximação.

$n(< 1)$	$q_0$	$E_{\min}$ (Apr)	$E$ (Num)	$\Delta E(\%)$
0,050	1,5453	0,53485	0,53442	0,080
0,00	1,4972	0,54065	0,53997	0,126
0,150	1,4526	0,53937	0,53858	0,147
0,200	1,4112	0,53544	0,53462	0,153
0,250	1,3726	0,53060	0,52981	0,149
0,300	1,3365	0,52564	0,52492	0,138
0,350	1,3027	0,52096	0,52032	0,124
0,400	1,2710	0,51672	0,51616	0,108
0,450	1,2412	0,51299	0,51252	0,092
0,500	1,2131	0,50978	0,50940	0,076
0,600	1,1614	0,50486	0,50461	0,048
0,700	1,1150	0,50169	0,50156	0,026
0,800	1,0730	0,500001	0,49995	0,011
0,900	1,0349	0,499512	0,49950	0,003
<b>1,000</b>	<b>1,0003</b>	<b>0,50000</b>	<b>0,50000</b>	<b>2,34E-7</b>
1,100	0,96804	0,50128	0,50127	0,002
1,200	0,93860	0,50320	0,50316	0,009
1,300	0,91138	0,50564	0,50555	0,019
1,400	0,88613	0,50851	0,50835	0,031
1,600	0,84071	0,51518	0,51487	0,061
1,800	0,80097	0,52276	0,52225	0,097
2,000	0,76585	0,53089	0,53018	0,135
3,000	0,63722	0,57416	0,57240	0,308
4,000	0,55469	0,61155	0,61291	0,429
5,000	0,49672	0,65270	0,64942	0,505
6,000	0,45350	0,68562	0,68189	0,546
8,000	0,39285	0,74071	0,73644	0,580
10,000	0,35196	0,78476	0,78026	0,577

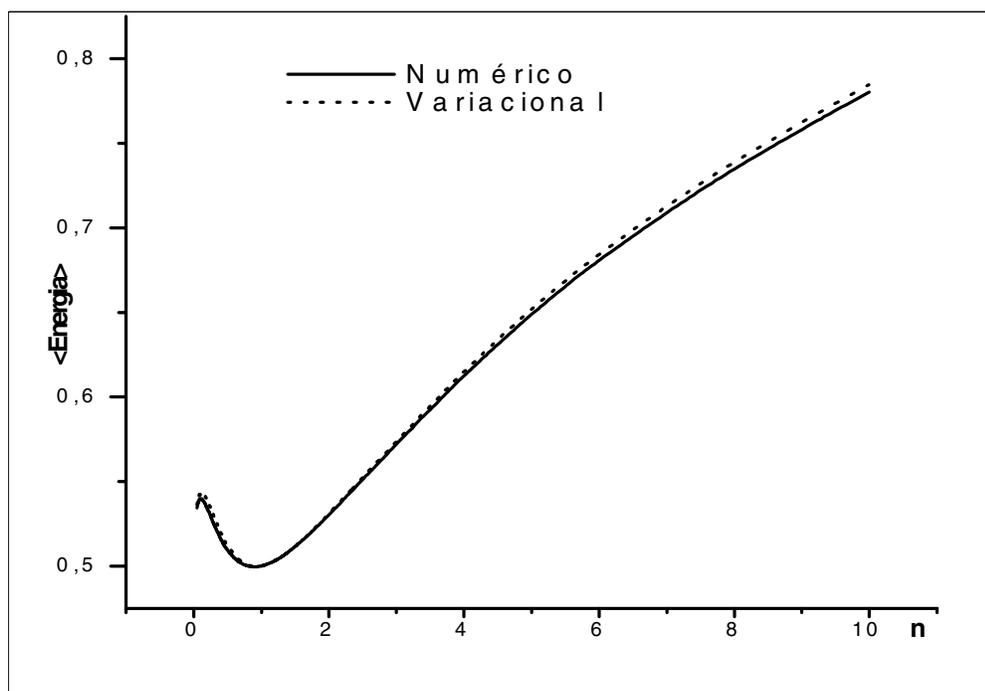


Figura 3.4 - Gráfico da energia do oscilador anarmônico em função do expoente da energia potencial,  $n$ . A linha sólida representa a energia exata e a linha pontilhada a energia aproximada variacionalmente, usando uma função teste Tsallisiana.

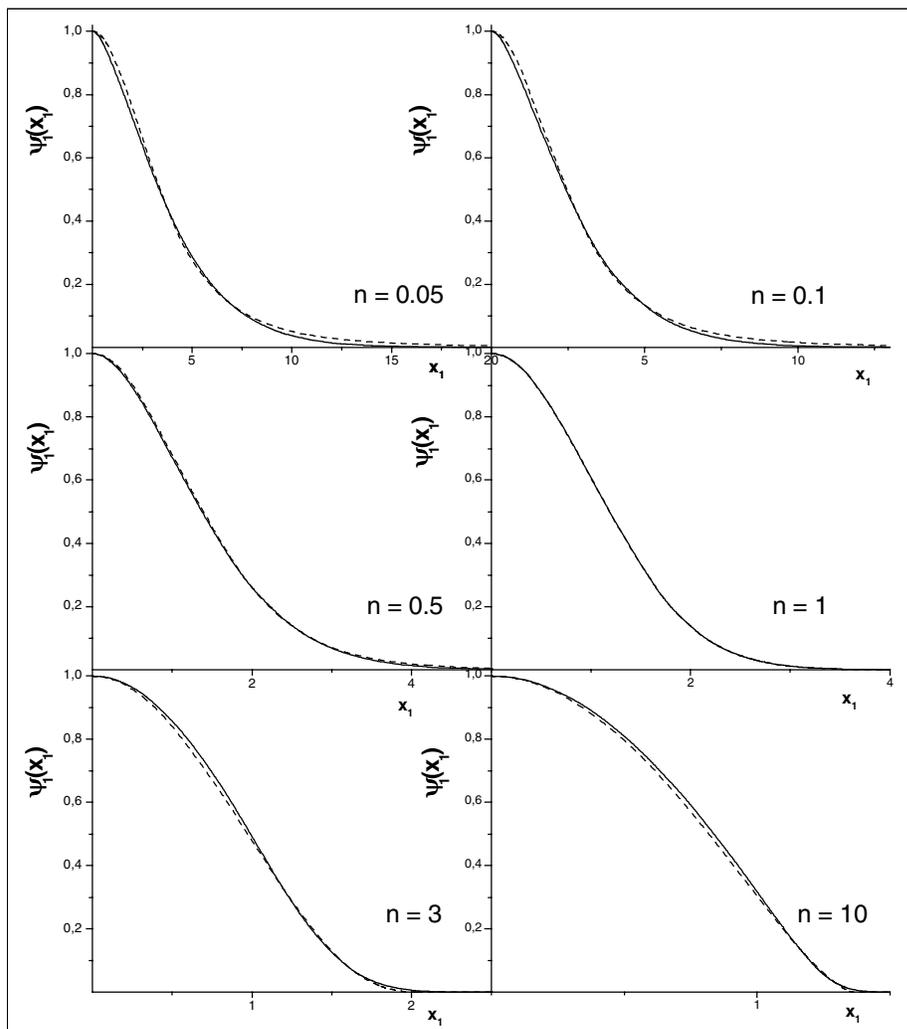


Figura 3.5 - Funções de onda do estado fundamental do oscilador anarmônico para vários  $n$ 's. A linha sólida representa a função obtida numericamente, e a tracejada representa a função Tsallisiana ajustada variacionalmente.

## Capítulo 4

### ESTADO FUNDAMENTAL DO CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN

Neste capítulo faremos um estudo da solução correspondente ao estado fundamental da equação de Gross-Pitaevskii (EGP) para um conjunto de átomos alcalinos, sujeitos a um potencial externo confinante do tipo harmônico, usando o método variacional. A função teste é, assim como no caso da análise, empregada para o oscilador anarmônico, uma Tsallisiana. De posse da expressão analítica da função de onda do estado fundamental do condensado, calcularemos várias outras grandezas pertinentes, tais como o potencial químico, as larguras axiais e transversais das nuvens de partículas, e a razão aspecto para um grande intervalo do número de constituintes do condensado. Especificamente, aplicaremos nosso ferramental variacional para o caso do  $^{87}\text{Rb}$  e  $^7\text{Li}$ . Além disto, verificaremos que os nossos resultados estão em ótima concordância com aqueles obtidos via um processo puramente numérico.

#### 4.1 Funcional de Gross-Pitaevskii

Objetivando a utilização do método variacional no estudo da equação de Gross-Pitaevskii, empregaremos o funcional

$$E[\psi] = \int d^3\mathbf{r} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{m}{2} [\omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2] |\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} |\psi(\mathbf{r})|^4 \right\}, \quad (4.1)$$

usualmente denominado de funcional de Gross-Pitaevskii.

Neste contexto estamos empregando um potencial externo, assimétrico e harmônico,  $V(\mathbf{r}) = m[\omega_{\perp}^2(x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2]/2$ , que modela bem as armadilhas para os átomos alcalinos  $^{87}\text{Rb}$  e  $^7\text{Li}$  [21, 28]. A extremização do funcional (4.1), empregando a condição de normalização

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = N, \quad (4.2)$$

conduz diretamente à equação de Gross-Pitaevskii discutida no capítulo anterior ( $N$  é o número de partículas do condensado). Para verificarmos tal fato, usemos o procedimento discutido no apêndice A1 para extremização de um funcional sujeito a vínculos,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \psi^*} - \nabla \cdot \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial (\nabla \psi^*)} \right) = 0 \quad (4.3)$$

com

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\psi, \psi^*, \nabla\psi, \nabla\psi^*) &= \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 + \left[ \frac{m}{2} \omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2 \right] |\psi(\mathbf{r})|^2 + \\ &+ \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} |\psi(\mathbf{r})|^4 - \mu |\psi(\mathbf{r})|^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Aqui, o multiplicador de Lagrange  $\mu$  foi empregado devido ao vínculo (4.2), usado para fixar o número de partículas. Portanto,  $\mu$  representa o potencial químico do sistema. Deste modo, obtemos para os termos da equação (4.3)

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \psi^*} = \left[ \frac{m}{2} \omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2 \right] \psi(\mathbf{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 \psi(\mathbf{r}) - \mu \psi(\mathbf{r}) \quad (4.5)$$

e

$$\nabla \cdot \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial (\nabla \psi^*)} \right) = \nabla \cdot \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi(\mathbf{r}) \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}), \quad (4.6)$$

que conduzem à ENLS

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \left[ \frac{m}{2} \omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2 \right] + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 \right\} \psi(\mathbf{r}) = \mu \psi(\mathbf{r}). \quad (4.7)$$

Quando comparamos esta equação com a (2.19), devemos notar que o comprimento de espalhamento da onda- $s$   $a$  foi introduzido pela relação  $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ .

## 4.2 Reescalonamento do sistema.

Visando simplificar a notação, definamos o comprimento padrão

$$a_{\perp} = \left( \frac{\hbar^2}{m\omega_{\perp}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.8)$$

a partir do qual reescalamos a função de onda, a coordenada espacial e a energia da seguinte forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{N}{a_{\perp}^3}} \psi_1(\mathbf{r}_1), \quad \mathbf{r}_1 = \frac{\mathbf{r}}{a_{\perp}} \quad \text{e} \quad E_1 = \frac{E}{\hbar\omega_{\perp}}. \quad (4.9)$$

Além destas relações, definamos também o parâmetro de assimetria

$$\lambda = \frac{\omega_z}{\omega_{\perp}}. \quad (4.10)$$

Com estas definições podemos reescrever as equações (4.1), (4.2) e (4.7), respectivamente, como

$$\frac{E_1}{N} = \frac{1}{2} \int \left[ |\nabla_1 \psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 + (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2) |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 + \frac{u_1}{2} |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^4 \right] d^3 \mathbf{r}_1, \quad (4.11)$$

$$\int |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 d^3\mathbf{r}_1 = 1 \quad (4.12)$$

e

$$\left[ -\nabla^2 + (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2) + \frac{u_1}{2} |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \psi_1(\mathbf{r}_1) = 2\mu_1 \psi_1(\mathbf{r}_1), \quad (4.13)$$

onde

$$\mu_1 = \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} \quad (4.14)$$

e o parâmetro sem dimensão

$$u_1 = 8\pi N \left( \frac{a}{a_\perp} \right) \quad (4.15)$$

caracteriza a intensidade das interações entre os constituintes do condensado. Note-mos, por exemplo, que para a armadilha de átomos usada por Anderson[2],  $a_\perp$  vale aproximadamente  $1,2 \mu m$ , e se usarmos  $a \cong 5 nm$  teremos  $u_1 \cong 0,1N$ ; e, portanto valores de  $u_1$  muito maiores que 1 devem ser esperados para condensados com milhares de átomos.

### 4.3 Modelo não interagente

Se inicialmente consideramos  $u_1 = 0$ , a equação (4.13) transforma-se na equação de Schroedinger para um oscilador harmônico anisotrópico. Esta equação tem como solução a função Gaussiana normalizada

$$\psi_1(\mathbf{r}_1) = \lambda^{\frac{1}{4}} \pi^{-\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x_1^2 + y_1^2 + \lambda z_1^2)\right), \quad (4.16)$$

a qual pode ser verificada através de substituição direta em (4.13). Neste caso também podemos calcular  $\mu_1$  a partir da equação (4.13) com  $u_1 = 0$ , multiplicando-se ambos os membros desta equação por  $\psi_1^*(\mathbf{r}_1)$  e integrando-se em todo o volume. Desta forma obtemos

$$\frac{1}{2} \int d^3r_1 \{-\psi_1^* \nabla_1^2 \psi_1 + (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2) |\psi_1|^2\} = \mu_1, \quad (4.17)$$

ou o que é o mesmo, de acordo com a equação (4.11),  $\mu_1 = E_1/N$ , isto é,  $\mu = E/N$ . Substituindo (4.16) na expressão acima, vemos que a parte cinética e a parte harmônica anisotrópica da energia por partícula são iguais a  $(1 + \lambda/2)/2$ . Para obtermos este último resultado, utilizamos a identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n \exp(-\lambda x^2) dx = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \lambda^{-(n+1)/2}, \quad [\text{Re}(\lambda) > 0]. \quad (4.18)$$

Como pode ser visto da equação (4.16), esta Gaussiana possui larguras vertical (direção  $z$ ) e transversais (direções  $x$  e  $y$ ) distintas, as quais podem ser calculadas de

acordo com a definição de valor médio,

$$\begin{aligned}
 \langle x_1^2 \rangle &= \langle y_1^2 \rangle = \int \psi_1^2(\mathbf{r}_1) x_1^2 d^3\mathbf{r}_1 = \int \psi_1^2(\mathbf{r}_1) y_1^2 d^3\mathbf{r}_1 \\
 &= \int \lambda^{\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{3}{2}} \exp(-x_1^2 - y_1^2 - \lambda z_1^2) x_1^2 dx_1 dy_1 dz_1 \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^{\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{3}{2}} \exp(-x_1^2) x_1^2 dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y_1^2) dy_1 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda z_1^2) dz_1 \\
 &= \lambda^{\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{\pi} \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda^{\frac{1}{2}}} = \frac{1}{2},
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

onde, novamente, fizemos uso da identidade (4.18). Empregando raciocínio completamente análogo, calculamos o valor médio de  $z_1^2$  e encontramos que

$$\langle z_1^2 \rangle = \frac{1}{2\lambda}, \tag{4.20}$$

conduzindo a

$$\sqrt{\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle z_1^2 \rangle}} = \sqrt{\lambda}. \tag{4.21}$$

Similarmente, calculamos os valores médios de  $p_x^2$  e  $p_z^2$ . Definimos a quantidade  $\sqrt{\langle p_z^2 \rangle / \langle p_x^2 \rangle}$  como uma medida da razão aspecto, caracterizando a anisotropia da distribuição de velocidades. Assim,

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle p_z^2 \rangle \\ \langle p_x^2 \rangle \end{array} \right\} = \int \psi^*(\mathbf{r}) \left\{ \begin{array}{l} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \end{array} \right\} \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \tag{4.22}$$

Reescalando as variáveis, ou seja, usando a transformação de variáveis (4.9), obtemos, além das outras relações já conhecidas,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{1}{a_{\perp}} \frac{\partial}{\partial x_{i_1}}, \tag{4.23}$$

onde  $x_i = x, y$  ou  $z$ . Reescrevendo as expressões dos valores médios em termos das novas variáveis, temos

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle p_z^2 \rangle \\ \langle p_x^2 \rangle \end{array} \right\} = -\frac{\hbar^2 N}{a_{\perp}^2} \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \end{array} \right\} \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \tag{4.24}$$

Simetrizamos a função de onda, com todas as variáveis tendo o mesmo fator de escala, usando as igualdades  $x_1 = \tilde{x}$ ,  $y_1 = \tilde{y}$  e  $z_1 = \tilde{z}/\sqrt{\lambda}$ . Nestas novas variáveis,  $d^3\mathbf{r}_1 = d^3\tilde{\mathbf{r}}/\sqrt{\lambda} = d\tilde{x}d\tilde{y}d\tilde{z}/\sqrt{\lambda}$  e

$$\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} = \lambda \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2}. \tag{4.25}$$

Deste modo, ficamos com

$$\begin{Bmatrix} \langle p_x^2 \rangle \\ \langle p_z^2 \rangle \end{Bmatrix} = -\frac{\hbar^2 N}{a_\perp^2 \sqrt{\lambda}} \int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) \begin{Bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \\ \lambda \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \end{Bmatrix} \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.26)$$

Notando que puramente por conceitos de simetria

$$\int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \right) \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}} = \frac{1}{3} \int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) (-\hbar^2 \nabla^2) \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}}, \quad (4.27)$$

concluimos que

$$\begin{Bmatrix} \langle p_x^2 \rangle \\ \langle p_z^2 \rangle \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} 1 \\ \lambda \end{Bmatrix} \frac{1}{3} \frac{\hbar^2 N}{a_\perp^2 \sqrt{\lambda}} \int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) \nabla^2 \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.28)$$

Destas relações inferimos, imediatamente, que

$$\sqrt{\frac{\langle p_z^2 \rangle}{\langle p_x^2 \rangle}} = \sqrt{\lambda} = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}}. \quad (4.29)$$

Valores da razão aspecto diferentes da unidade refletem uma característica, peculiar e única, dos condensados de Bose-Einstein.

#### 4.4 Caso repulsivo com inúmeras partículas

Por outro lado, se  $u_1 \gg 1$ , o que corresponde a um número muito grande de partículas, estamos no limite onde o termo cinético pode ser desprezado frente às outras duas contribuições[18, 21, 23]. Este limite é conhecido como aproximação de Thomas-Fermi. Neste contexto, estamos considerando o caso de interação repulsiva entre os átomos, isto é,  $a > 0$ . Assim, a equação (4.13) sem o termo cinético fica reduzida a

$$\left[ x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2 + \frac{u_1}{2} |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \psi_1(\mathbf{r}_1) = 2\mu_1 \psi_1(\mathbf{r}_1). \quad (4.30)$$

Conseqüentemente, temos

$$\psi_1(\mathbf{r}_1) = \sqrt{\frac{2 [2\mu_1 - (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2)]}{u_1}} \quad (4.31)$$

para  $(2\mu_1 - x_1^2 - y_1^2 - \lambda^2 z_1^2) > 0$ . Quando esta desigualdade não é satisfeita devemos ter  $|\psi_1(\mathbf{r}_1)| = 0$ . Aqui foi considerado, sem perda de generalidade, que  $\psi_1$  é uma função real. Partindo da imposição da normalização desta função de onda, calculamos facilmente o potencial químico. Para tanto, resolvemos a equação

$$\int_{-\sqrt{\frac{2\mu_1}{\lambda^2}}}^{\sqrt{\frac{2\mu_1}{\lambda^2}}} dz \int_{-\sqrt{2\mu_1 - \lambda^2 z^2}}^{\sqrt{2\mu_1 - \lambda^2 z^2}} dy \int_{-\sqrt{(2\mu_1 - y^2 - \lambda^2 z^2)}}^{\sqrt{(2\mu_1 - y^2 - \lambda^2 z^2)}} dx \frac{2 [2\mu_1 - x^2 - y^2 - \lambda^2 z^2]}{u_1} = 1, \quad (4.32)$$

encontrando

$$\mu_1 = \frac{1}{2} \left( \frac{15}{8\pi} \lambda u_1 \right)^{\frac{2}{5}}. \quad (4.33)$$

Lembrando que  $\mu = dE/dN$  [40] e fazendo uso das equações (4.14) e (4.15), obtemos  $E/N = (5/7)\mu$  em contraste com o caso sem interação, onde  $E/N = \mu$ . Além disto, procedendo de maneira análoga àquela que conduziu a (4.29), obtemos

$$\sqrt{\frac{\langle p_z^2 \rangle}{\langle p_x^2 \rangle}} = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}} = \lambda. \quad (4.34)$$

Este resultado, quando comparado com (4.29), ressalta a diferença entre as duas aproximações.

#### 4.5 Estado fundamental do CBE: Interação repulsiva ( $^{87}\text{Rb}$ )

Passemos ao objetivo principal deste capítulo, ou seja, o de encontrar variacionalmente o valor da energia por partícula ( $E_1/N$ ) dado pela equação (4.11), o potencial químico, as larguras axiais e transversais das nuvens atômicas, e a razão aspecto para um condensado com  $N$  variando em um largo intervalo. Para o cálculo de  $E_1/N$  usaremos o método variacional. Como fartamente ressaltado no capítulo 3 e apêndice A1, o processo consiste no cálculo do valor médio da energia total e a sua extremização, usando uma função teste com parâmetros ajustáveis. É importante observar que, calculando estas quantidades, automaticamente estamos calculando a função de onda do condensado, o que nos permitirá calcular as demais grandezas desejadas. Para calcularmos a energia por partícula, faremos o processo em quatro etapas, a saber: 1) cálculo do fator de normalização da função de onda

$$\int |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 d^3\mathbf{r}_1 = 1; \quad (4.35)$$

2) - cálculo da energia cinética

$$E_1^{(c)} = \frac{1}{2} \int |\nabla_1 \psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 d^3\mathbf{r}_1; \quad (4.36)$$

3) - cálculo da energia potencial harmônica anisotrópica

$$E_1^{(h)} = \frac{1}{2} \int (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2) |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 d^3\mathbf{r}_1; \quad (4.37)$$

e 4) - cálculo da energia potencial de interação dos constituintes do condensado

$$E_1^{(p)} = \frac{1}{2} \int \frac{u_1}{2} |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^4 d^3\mathbf{r}_1. \quad (4.38)$$

Estas integrais devem ser feitas tendo em conta todos os valores de  $\mathbf{r}_1$ , isto é,  $\mathbf{r}_1 \in \mathcal{R}^3$ .

Algumas funções testes tem sido propostas recentemente e, especialmente, mencionamos a função teste proposta por Fetter[25]

$$\psi(\mathbf{r}) = c_0 \left( 1 - \sum_j \frac{r_j^2}{d_j^2 R_j^2} \right)^{\frac{1+\lambda}{2}} \Theta \left( 1 - \sum_j \frac{r_j^2}{d_j^2 R_j^2} \right), \quad (4.39)$$

onde  $d_j$  e  $\lambda$  são os parâmetros variacionais e  $\Theta$  a função de Heaviside. Fetter usou esta função para analisar o estado fundamental de bósons em armadilhas isotrópicas. Ele também sugeriu esta função teste para o estudo do estado fundamental do condensado em armadilhas anisotrópicas com interação repulsiva, por exemplo, CBE de átomos de  $^{87}\text{Rb}$ . Entretanto, ele não fez uma análise quantitativa demonstrando que esta função teste fornece de fato bons resultados. Nesta seção, faremos tal estudo.

Por sua vez, a função de Fetter não é adequada para o estudo de condensados com interações atrativas entre os bósons, isto é, condensados onde a energia variacional acha o seu mínimo somente para  $\lambda \rightarrow \infty$ , o que corresponde à função teste Gaussiana. De modo a levar em conta a interação atrativa do condensado, estendemos a função de onda teste de Fetter propondo como função teste a Tsallisiana

$$\psi(\mathbf{r}_1) = C \left\{ 1 - (1-q) [\alpha(x_1^2 + y_1^2) + \beta z_1^2] \right\}^{\frac{1}{1-q}}, \quad (4.40)$$

para  $1 - (1-q)(\alpha x^2 + \alpha y^2 + \beta z^2) > 0$ , e  $\psi(\mathbf{r}) = 0$  nos demais casos. Aqui,  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $q$  são os parâmetros variacionais e  $C$  uma constante de normalização. Esta função difere de (4.39) somente quando  $q > 1$ . Para interação repulsiva usaremos  $q < 1$  (para  $q = 1$  a função teste corresponde à função de onda Gaussiana do gás ideal). Por outro lado, para a interação atrativa tomaremos  $q > 1$ .

#### 4.5.1 Normalização da função teste.

Com base nas observações que acabamos de fazer e também motivados pelos resultados animadores obtidos no capítulo 3 para o oscilador anarmônico, usaremos para a função teste a Tsallisiana (4.40) com  $q < 1$  para estudar CBE de  $^{87}\text{Rb}$ . Esta função tem como limites a equação (4.16) para  $q \rightarrow 1$  e a equação (4.39) quando  $q \rightarrow -1$ . Estes limites mostram que a expressão (4.40) interpola suavemente as soluções da equação de Schroedinger não linear (Gross-Pitaevskii) quando  $q$  varia no intervalo  $[-1, +1]$ , ou seja, quando os sistemas variam de um sistema sem interações entre partículas, até o caso limite de sistema de inúmeras partículas (aproximação de Thomas-Fermi).

Como acabamos de ver, a função teste escolhida inclui uma constante de normalização. Esta constante é escolhida de tal modo que a função teste é normalizada para a unidade, em conformidade com a expressão (4.12). Deste modo, escrevemos

$$\int C^2 [(1 - (1-q)(\alpha x_1^2 + \alpha y_1^2 + \beta z_1^2))]^{\frac{2}{1-q}} d^3 \mathbf{r}_1 = 1. \quad (4.41)$$

Esta integral torna-se fácil de ser calculada através de mudança de variáveis adequadas. Fazemos então a mudança de variáveis

$$\tilde{x} = x_1, \quad \tilde{y} = y_1 \quad \text{e} \quad \tilde{z} = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} z_1, \quad (4.42)$$

que conduzem ao elemento de volume

$$d^3\mathbf{r}_1 = dx_1 dy_1 dz_1 = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} d\tilde{x} d\tilde{y} d\tilde{z} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} d^3\tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.43)$$

Em termos das novas variáveis, a integral procurada é reescrita como

$$\begin{aligned} 1 &= \int C^2 [1 - (1-q)\alpha(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \tilde{z}^2)]^{\frac{2}{1-q}} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} d^3\tilde{\mathbf{r}} \\ &= \int C^2 (1 - (1-q)\alpha\tilde{r}^2)^{\frac{2}{1-q}} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} 4\pi\tilde{r}^2 d\tilde{r}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Note que o integrando somente é não nulo na região onde  $1 - (1-q)\alpha\tilde{r}^2 > 0$ , ou seja, na região onde  $0 \leq \tilde{r} < \tilde{r}_0$ , com  $\tilde{r}_0 = 1/\sqrt{\alpha(1-q)}$ . Desta forma, a constante de normalização procurada é obtida a partir da igualdade

$$1 = \int_0^{\tilde{r}_0} C^2 [1 - (1-q)\alpha\tilde{r}^2]^{\frac{2}{1-q}} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} 4\pi\tilde{r}^2 d\tilde{r}, \quad (4.45)$$

que após nova mudança de variável,  $X = [\alpha(1-q)]^{\frac{1}{2}} \tilde{r}$ , torna-se

$$1 = 4\pi \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} C^2 \left[ \frac{1}{\alpha^{\frac{3}{2}}(1-q)^{\frac{3}{2}}} \right] \int_0^1 (1-X^2)^{\frac{2}{1-q}} X^2 dX. \quad (4.46)$$

A solução desta integral pode ser obtida através de (3.29),

$$\int_0^1 x^{\mu-1} (1-x^\lambda)^{\nu-1} dx = \frac{1}{\lambda} B\left(\frac{\mu}{\lambda}, \nu\right), \quad \text{Re}(\mu) > 0, \text{Re}(\nu) > 0 \text{ e } \lambda > 0. \quad (4.47)$$

Assim temos para solução da integral (4.45), com as identificações  $\mu = 3$ ,  $\lambda = 2$  e  $\nu = [2/(1-q)] + 1$ ,

$$\left( \frac{4\pi^{\frac{3}{2}} C^2 \sqrt{\alpha}}{\alpha^{\frac{3}{2}}(1-q)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\beta} 4} \right) \left( \frac{\Gamma\left(\frac{3-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)} \right) = 1 \quad (4.48)$$

e conseqüentemente

$$C = \left( \frac{\alpha^2 \beta (1-q)^3}{\pi^3} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{1-q}\right)} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.49)$$

Finalmente, podemos escrever o estado Tsallisiano normalizado para  $q < 1$  como

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \left[ \frac{\alpha^2 \beta (1-q)^3}{\pi^3} \right]^{\frac{1}{4}} \left( \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{1-q}\right)} \right)^{\frac{1}{2}} \{1 - (1-q)[\alpha(x_1^2 + y_1^2) + \beta z_1^2]\}^{\frac{1}{1-q}} \\ &= \left[ \frac{\alpha^2 \beta (1-q)^3}{\pi^3} \right]^{\frac{1}{4}} \left( \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{1-q}\right)} \right)^{\frac{1}{2}} [1 - (1-q)\alpha\tilde{r}^2]^{\frac{1}{1-q}}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

#### 4.5.2 Energia potencial não linear

A contribuição para a energia total por partícula, referente à energia potencial de interação entre os constituintes do condensado (4.38), é após a mudança de variáveis e a integração angular,

$$E_1^{(p)} = \frac{1}{2} \frac{u_1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} 4\pi \int_0^{\tilde{r}_0} \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^4 \tilde{r}^2 d\tilde{r}. \quad (4.51)$$

A integral acima, resolvida de maneira exatamente análoga à presente no caso da normalização da função teste, conduz a

$$E_1^{(p)} = (1-q)^{\frac{5}{2}} \frac{\Gamma(\frac{4}{1-q})}{\Gamma(\frac{5}{2} + \frac{4}{1-q})} \left( \frac{\Gamma(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q})}{\Gamma(\frac{2}{1-q})} \right)^2 \left( \frac{u_1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \right) \alpha \beta^{\frac{1}{2}}. \quad (4.52)$$

#### 4.5.3 Energia cinética

Usando a transformação de variáveis (4.42) teremos para as derivadas parciais as seguintes relações

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial}{\partial x_1}, \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} = \frac{\partial}{\partial y_1} \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \frac{\partial}{\partial z_1}. \quad (4.53)$$

Deste modo, fazendo uso também do elemento de volume (4.43), a energia cinética (4.36)

$$E_1^{(c)} = \frac{1}{2} \int \left[ \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{x}} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{y}} \right)^2 + \frac{\beta}{\alpha} \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{z}} \right)^2 \right] \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} d^3 \tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.54)$$

Notemos que nestas novas coordenadas as dependências do estado Tsallisiano em  $\tilde{x}$ ,  $\tilde{y}$  e  $\tilde{z}$  são idênticas, portanto podemos escrever que

$$\int \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{x}} \right)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}} = \int \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{y}} \right)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}} = \int \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{z}} \right)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}} \quad (4.55)$$

e conseqüentemente

$$\begin{aligned} \int \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{x}_i} \right)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}} &= \frac{1}{3} \int \left[ \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{x}} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{y}} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{z}} \right)^2 \right] d^3 \tilde{\mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{3} \int (\nabla \psi_1)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

onde  $\tilde{x}_i = \tilde{x}, \tilde{y}$  ou  $\tilde{z}$ . Logo,

$$\begin{aligned} E_1^{(c)} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \left( 1 + 1 + \frac{\beta}{\alpha} \right) \frac{1}{3} \int (\nabla \psi_1)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}} = \frac{1}{3} \left( 2 + \frac{\beta}{\alpha} \right) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int (\nabla \psi_1)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{3} \left( 2 + \frac{\beta}{\alpha} \right) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial \tilde{r}} \right)^2 d^3 \tilde{\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Escrevendo explicitamente a integral, temos

$$E_1^{(c)} = \frac{1}{3} \left( 2 + \frac{\beta}{\alpha} \right) \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} 4\alpha^2 \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{1-q}\right)} \left[ \frac{\alpha^2 \beta (1-q)^3}{\pi^3} \right]^{\frac{1}{2}} 4\pi \times$$

$$\times \int_0^{\tilde{r}_0} \tilde{r}^4 [1 - (1-q)\alpha\tilde{r}^2]^{\frac{2q}{1-q}} d\tilde{r}. \quad (4.58)$$

Olhando o termo que envolve as funções Gama mais detalhadamente, vemos que ele pode ser transformado, usando a propriedade  $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ . Assim, temos

$$\frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{1-q}\right)} = \frac{\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{1+q}{1-q}\right)}{\left(\frac{2}{1-q}\right) \left(\frac{1+q}{1-q}\right) \Gamma\left(\frac{1+q}{1-q}\right)}. \quad (4.59)$$

Além disto, usando a mudança de variável local  $X = \tilde{r} \sqrt{(1-q)\alpha}$  e a identidade (4.47), a integral entre colchetes pode ser reescrita como

$$\frac{1}{\alpha^{\frac{5}{2}}(1-q)^{\frac{5}{2}}} \int_0^1 X^4 (1-X^2)^{\frac{2q}{1-q}} dX = \frac{1}{\alpha^{\frac{5}{2}}(1-q)^{\frac{5}{2}}} \frac{1}{2} B\left(\frac{5}{2}; \frac{1+q}{1-q}\right)$$

$$= \frac{1}{\alpha^{\frac{5}{2}}(1-q)^{\frac{5}{2}}} \frac{3}{8} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma\left(\frac{1+q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{1+q}{1-q}\right)}. \quad (4.60)$$

Por sua vez, estes resultados conduzem a

$$E_1^{(c)} = \frac{1}{3} \left( 2 + \frac{\beta}{\alpha} \right) \frac{8\pi\alpha^{\frac{5}{2}}}{\beta^{\frac{1}{2}}} \left( \frac{\alpha^2 \beta (1-q)^3}{\pi^3} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}{\left(\frac{1+q}{1-q}\right) \left(\frac{2}{1-q}\right)} \frac{3\sqrt{\pi}}{8\alpha^{\frac{5}{2}}(1-q)^{\frac{5}{2}}}$$

$$= \frac{1}{4} (2\alpha + \beta) \frac{7-3q}{1+q}. \quad (4.61)$$

#### 4.5.4 Energia potencial harmônica anisotrópica

A energia potencial harmônica anisotrópica (4.37), com  $\psi_1$  expressa pela equação (4.50), é

$$E_1^{(h)} = \frac{1}{2} \left( \frac{\alpha^2 \beta (1-q)^3}{\pi^3} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{3-q}{1-q}\right)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.62)$$

$$\times \int [(x_1^2 + y_1^2) + \lambda^2 z_1^2] [1 - (1-q)(\alpha x_1^2 + \alpha y_1^2 + \beta z_1^2)]_1^{\frac{2q}{1-q}} d^3 \tilde{\mathbf{r}}_1.$$

Usando a mudança de variável (4.42), transformamos a expressão acima em

$$E_1^{(h)} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\alpha^2 \beta (1-q)^3}{\pi^3} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q})}{\Gamma(\frac{3-q}{1-q})} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \\ \times \int [1 - (1-q)\alpha\tilde{r}^2]^{\frac{2}{1-q}} \left( \tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \lambda^2 \frac{\alpha}{\beta} \tilde{z}^2 \right) d^3\tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.63)$$

Nestas novas variáveis, as dependências em  $\tilde{x}$ ,  $\tilde{y}$  e  $\tilde{z}$  são idênticas. Portanto,

$$\int \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^2 \tilde{x}^2 d^3\tilde{\mathbf{r}} = \int \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^2 \tilde{y}^2 d^3\tilde{\mathbf{r}} = \int \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^2 \tilde{z}^2 d^3\tilde{\mathbf{r}} \\ = \frac{1}{3} \int \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^2 \tilde{r}^2 d^3\tilde{\mathbf{r}} \quad (4.64)$$

e conseqüentemente

$$E_1^{(h)} = \frac{1}{3} \left( 1 + \lambda^2 \frac{\alpha}{2\beta} \right) \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^2 \tilde{r}^2 d^3\tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.65)$$

Empregando a identidade (4.47) com as identificações pertinentes dos parâmetros  $\mu$ ,  $\nu$  e  $\lambda$ , vemos que

$$\sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^2 \tilde{r}^2 d^3\tilde{\mathbf{r}} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} 4\pi \int_0^{\tilde{r}_0} \psi_1(\tilde{r}, \alpha, \beta, q)^2 \tilde{r}^4 d\tilde{r} = \frac{3}{\alpha} \frac{1}{9-5q}. \quad (4.66)$$

Desta forma,

$$E_1^{(h)} = \left( \frac{1}{\alpha} + \frac{\lambda^2}{2\beta} \right) \frac{1}{9-5q}. \quad (4.67)$$

## 4.6 Energia total por partícula

De posse destes valores parciais das diversas formas de energia por partícula, formamos a expressão completa, ou seja, a expressão para a energia do condensado de Bose-Einstein como uma função do número de partículas (veja as equações (4.52), (4.61) e (4.67)) é

$$\frac{E_1}{N} = E_1^{(p)} + E_1^{(c)} + E_1^{(h)} \quad (4.68) \\ = \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{7-3q}{1+q} \right) (2\alpha + \beta) \right] + \left[ \left( \frac{1}{9-5q} \right) \left( \frac{1}{\alpha} + \frac{\lambda^2}{2\beta} \right) \right] + \alpha \sqrt{\beta} G(q),$$

onde

$$G(q) = \frac{u_1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} (1-q)^{\frac{5}{2}} \left( \frac{\Gamma(\frac{4}{1-q})}{\Gamma(\frac{5}{2} + \frac{4}{1-q})} \right) \left( \frac{\Gamma(\frac{5}{2} + \frac{2}{1-q})}{\Gamma(\frac{2}{1-q})} \right)^2. \quad (4.69)$$

Faz-se mister, agora, calcular o conjunto de valores  $\{\alpha, \beta, q\}$  que extremizam a expressão acima, para cada valor de  $N$ . A tabela (4.1) exhibe estes parâmetros, calculados numericamente, os quais tornam a quantidade  $E_1/N$  um extremo, mínimo no caso, enquanto que a figura (4.1) exhibe as funções de onda do estado fundamental do CBE de  $^{87}\text{Rb}$  para alguns valores representativos do número de átomos  $N$ . Nesta análise usamos os valores experimentais empregados por Dalfovo e Stringari [21]:  $a/a_\perp = 4.33 \cdot 10^{-3}$  e  $N$  o número de partículas. Deste modo,  $u_1 = 34,64 \pi N \cdot 10^{-3}$ , pois  $u_1 = 8 \pi N a / a_\perp$ . É interessante comparar, assim como no caso do oscilador anarmônico, o quão a aproximação Gaussiana difere da generalização aqui empregada. Tal comparação está apresentada na figura (4.2), onde verificamos que a função teste Gaussiana desvia marcadamente da sua generalização. A exemplo do que verificamos no estudo do oscilador anarmônico, isto reforça mais uma vez que a nossa função teste aproxima bem melhor que a Gaussiana.

Tabela 4.1 - Dado o número de partículas do CBE do  $^{87}\text{Rb}$ ,  $N$ , a energia do estado fundamental calculada variacionalmente,  $\frac{E_1}{N}(var)$ ; numericamente,  $\frac{E_1}{N}(num)$ ; o erro relativo,  $\Delta(\frac{E_1}{N})\%$ ; e os parâmetros variacionais  $q$ ,  $\alpha$  e  $\beta$  da função de onda. O número de algarismos significativos de  $\frac{E_1}{N}(var)$  foi tomado igual ao de  $\frac{E_1}{N}(num)$  obtido da referência [21].

$N$	$\frac{E_1}{N}$ (Var)	$\frac{E_1}{N}$ (Num)	$\Delta(\frac{E_1}{N})\%$	$q$	$\alpha$	$\beta$
100	2,66	2,66	0,00	0,9308	0,3702	1,2035
200	2,86	2,86	0,00	0,8843	0,3053	1,0841
500	3,33	3,30	0,91	0,7879	0,2137	0,8820
1000	3,86	3,84	0,52	0,7074	0,1562	0,7349
2000	4,65	4,61	0,87	0,5999	0,1099	0,5842
5000	6,18	6,12	0,98	0,4631	0,0687	0,4209
10000	7,83	7,76	0,90	0,3150	0,0469	0,3118
15000	9,05	8,98	0,78	0,2696	0,0386	0,2670
20000	10,06	9,98	0,80	0,1862	0,0327	0,2293
50000	14,1867			0,0527	0,0209	0,0527

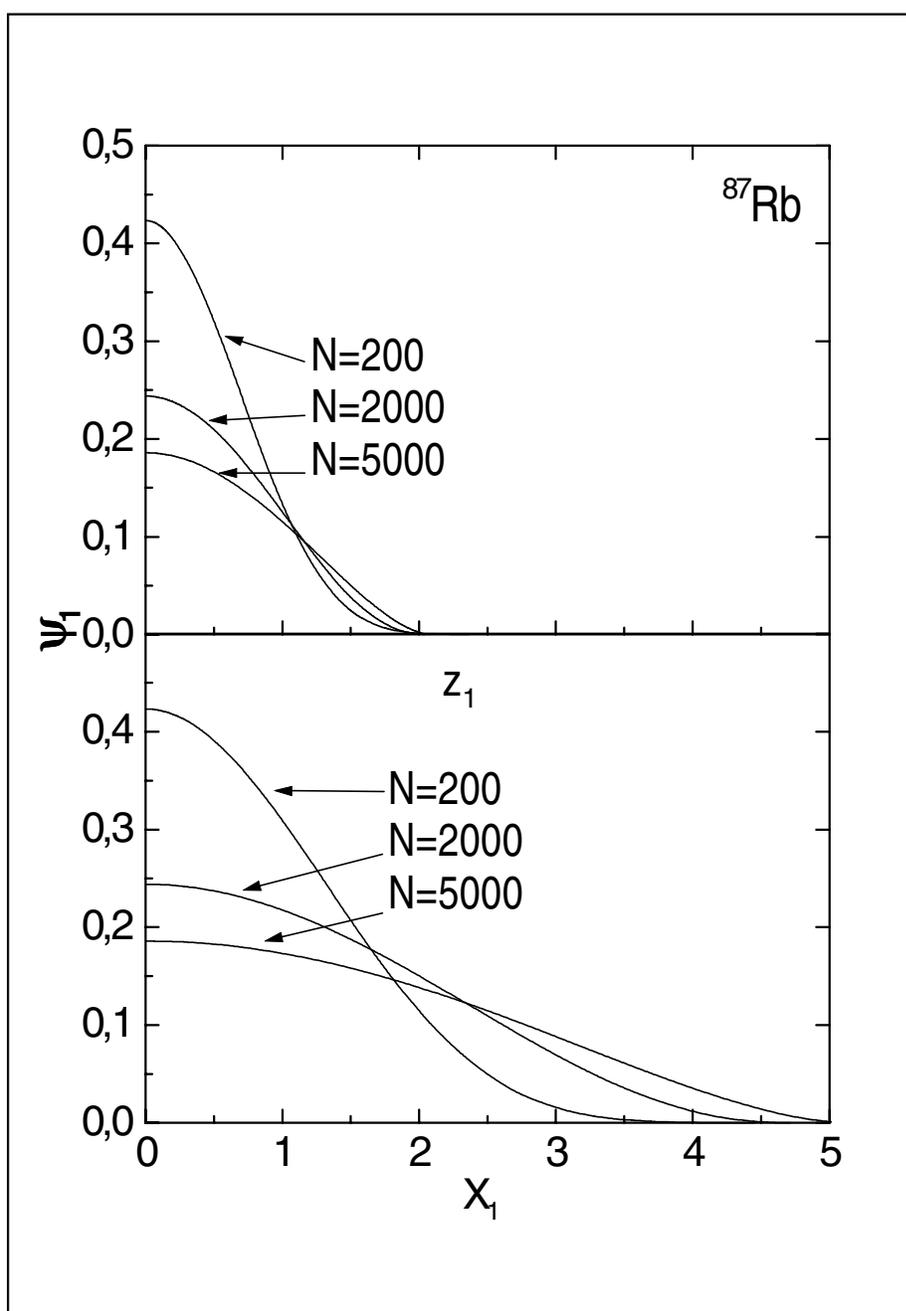


Figura 4.1 -Nestas figuras vemos as funções de onda  $\psi_1$  projetadas sobre os eixos  $z_1$  e  $x_1$ (figuras superior e inferior, respectivamente). As funções de onda, à medida que  $N$  cresce, diminuem de amplitude enquanto aumentam o tamanho da nuvem atômica. Aqui empregamos, de cima para baixo,  $N = 200, 2000$  e  $5000$ .

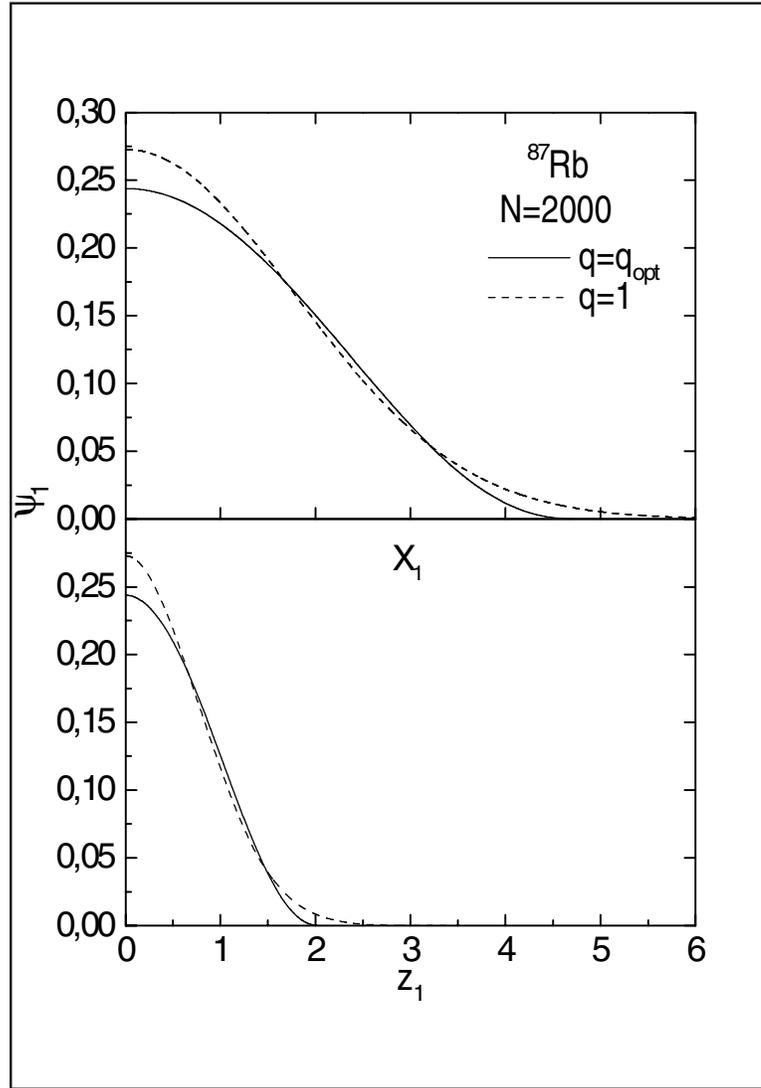


Figura 4.2 - A função de onda do estado fundamental ao longo do eixo  $x_1$  (parte superior) e  $z_1$  (parte inferior) para CBE de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  com  $N = 2000$ . A linha tracejada corresponde ao resultado obtido usando função Gaussiana, e a linha sólida ao resultado conseguido empregando a função teste Tsallisiana.

#### 4.6.1 Tamanhos transversal e vertical da nuvem atômica, razão aspecto e potencial químico

Como podemos apreciar da figura (4.2), o cálculo do tamanho da nuvem atômica é um bom indicador para avaliarmos a qualidade da aproximação variacional. Podemos notar que para  $N$  crescente, a repulsão entre os átomos do condensado tendem a diminuir a densidade central, expandindo a nuvem atômica para regiões onde a armadilha de potencial é mais forte. Este efeito produz um acréscimo da energia potencial de oscilador harmônico por partícula, como também da energia interna de cada partícula. Em reação adversa, a energia cinética por partícula diminui, devido ao achatamento da distribuição da densidade. O tamanho médio da nuvem de átomos

pode ser calculada muito facilmente, uma vez conhecida a função de onda do estado fundamental. Para este fim, a exemplo da seção (4.3), escrevemos

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int \psi(x, y, z)^2 x^2 d^3 \mathbf{r} \\
&= Na_{\perp}^2 \int \psi_1(x_1, y_1, z_1)^2 x_1^2 d^3 \mathbf{r}_1 \\
&= Na_{\perp}^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int \psi_1(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})^2 \tilde{x}^2 d^3 \mathbf{r}.
\end{aligned} \tag{4.70}$$

Novamente chamamos a atenção para o fato de que para o cálculo de  $\langle z^2 \rangle$  a integral é a mesma que para  $\langle x^2 \rangle$ , diferenciando-se apenas na mudança de variável  $z_1 = \sqrt{\alpha/\beta} \tilde{z}$ . Deste modo,

$$\langle z^2 \rangle = Na_{\perp}^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \frac{\alpha}{\beta} \int \psi_1(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})^2 \tilde{z}^2 d^3 \mathbf{r}. \tag{4.71}$$

De acordo com a metodologia estabelecida no cálculo da energia cinética, podemos escrever que

$$\begin{Bmatrix} \langle x^2 \rangle \\ \langle z^2 \rangle \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ \alpha/\beta \end{Bmatrix} \frac{4\pi}{3} Na_{\perp}^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int_0^{\tilde{r}_0} \psi_1(\tilde{r})^2 \tilde{r}^4 d\tilde{r}. \tag{4.72}$$

Então, de acordo com a identidade (4.66), obtemos

$$\begin{Bmatrix} \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle \\ \langle z^2 \rangle \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/\alpha \\ 1/\beta \end{Bmatrix} \left( \frac{Na_{\perp}^2}{9 - 5q} \right). \tag{4.73}$$

De posse destes valores podemos tabelar não somente os valores dos tamanhos transversais e verticais, como também os valores da razão aspecto espacial da nuvem atômica dada pela expressão  $\sqrt{\langle x^2 \rangle / \langle z^2 \rangle}$ , que de acordo com as expressões acima é

$$\sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}} = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}. \tag{4.74}$$

De maneira análoga calculamos a razão  $\sqrt{\langle p_z^2 \rangle / \langle p_x^2 \rangle}$ , definida no início do capítulo como a razão aspecto das velocidades, a partir da função de onda do estado fundamental. No limite de partículas não interagentes esta razão vale  $\sqrt{\lambda}$  como já vimos, e deve aproximar-se de  $\lambda$  no limite fortemente repulsivo. Esta razão é calculada, no caso geral, através das definições de valor médio de momentum utilizando-se a função teste. Assim,

$$\begin{Bmatrix} \langle p_x^2 \rangle \\ \langle p_z^2 \rangle \end{Bmatrix} = \int \psi^*(\mathbf{r}) \begin{Bmatrix} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{Bmatrix} \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \tag{4.75}$$

Reescalando as variáveis, ou seja, usando a transformação de variáveis (4.9), obtemos, além das outras relações já conhecidas,  $\partial/\partial x_i = (\partial/\partial x_{i1})/a_\perp$ , onde  $x_{i1} = x_1, y_1$  ou  $z_1$ . Reescrevendo as expressões dos valores médios em termos das novas variáveis, temos

$$\begin{Bmatrix} \langle p_x^2 \rangle \\ \langle p_z^2 \rangle \end{Bmatrix} = -\frac{\hbar^2 N}{a_\perp^2} \int \psi^*(\mathbf{r}) \begin{Bmatrix} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \end{Bmatrix} \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (4.76)$$

Simetizamos a função de onda para que todas as variáveis tenham o mesmo fator de escala, usando (4.42). Nestas novas variáveis, verificamos que

$$\begin{Bmatrix} \langle p_x^2 \rangle \\ \langle p_z^2 \rangle \end{Bmatrix} = -\frac{\hbar^2 N}{a_\perp^2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) \begin{Bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \end{Bmatrix} \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.77)$$

Tendo em vista que (por exemplo ver equação (4.56))

$$\int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_i^2} \right) \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}} = \frac{1}{3} \int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) (-\hbar^2 \nabla^2) \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}}, \quad (4.78)$$

concluimos que

$$\begin{Bmatrix} \langle p_x^2 \rangle = \langle p_y^2 \rangle \\ \langle p_z^2 \rangle \end{Bmatrix} = -\frac{\hbar^2 N}{a_\perp^2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \begin{Bmatrix} 1 \\ \beta/\alpha \end{Bmatrix} \int \psi_1^*(\tilde{\mathbf{r}}) (\nabla^2) \psi_1(\tilde{\mathbf{r}}) d^3 \tilde{\mathbf{r}}. \quad (4.79)$$

Destas duas relações inferimos, imediatamente, que

$$\sqrt{\frac{\langle p_z^2 \rangle}{\langle p_x^2 \rangle}} = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \quad (4.80)$$

e portanto

$$\sqrt{\frac{\langle p_z^2 \rangle}{\langle p_x^2 \rangle}} = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}}. \quad (4.81)$$

Para o cálculo do potencial químico, usamos um pequeno artifício a partir da equação (4.13). Formamos a equação integral

$$\begin{aligned} & \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1) [-\nabla_1^2 \psi_1(\mathbf{r}_1) + (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2) \psi_1(\mathbf{r}_1) + u_1 |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \psi_1(\mathbf{r}_1)] d^3 r_1 \\ &= 2\mu_1 \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_1) d^3 r_1 \end{aligned} \quad (4.82)$$

isto é,

$$\frac{1}{2} \int d^3 r_1 \left\{ -\psi_1^* \nabla_1^2 \psi_1 + (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2) |\psi_1|^2 + \frac{u_1}{2} |\psi_1|^4 \right\} + \frac{1}{2} \int d^3 r_1 \left( \frac{u_1}{2} |\psi_1|^4 \right) = \mu_1. \quad (4.83)$$

De acordo com a igualdade (4.11), a primeira integral à esquerda desta equação é  $E_1/N$ , e a segunda é a energia potencial não linear. Deste modo,

$$\mu_1 = \frac{E_1}{N} + E_1^{(p)}. \quad (4.84)$$

Na tabela (4.2) listamos os valores do potencial químico  $\mu_1$ , os tamanhos médios verticais e transversais e as razões aspectos da nuvem atômica, em unidades de  $a_\perp$ , em função do número de átomos no condensado, para valores calculados com a aproximação variacional e calculados numericamente. Aqui, diferentemente do capítulo 3 onde resolvemos numericamente a equação de Schroedinger, usamos os resultados numéricos obtidos por Dalfovo e Stringari[21]. Como deve estar claro, os cálculos baseados na função teste (4.40) com  $q < 1$  dão resultados muito próximos do exato (numérico), indicando o quão boa é a função teste (4.40) para o estudo do estado fundamental do CBE de  ${}^{87}Rb$ .

*Tabela 4.2* - Resultados\* para o estado fundamental de átomos de  ${}^{87}Rb$  em uma armadilha com  $\lambda = \sqrt{8}$ . O potencial químico está em unidades de  $\hbar\omega_\perp$ , com  $2\pi\omega_\perp = 220 \text{ Hz}$ , e o comprimento em unidades de  $a_\perp$ †.

$N$	$\mu_1$	$\mu_1$	$\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$	$\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$	$\sqrt{\langle z_1^2 \rangle}$	$\sqrt{\langle z_1^2 \rangle}$	$\sqrt{\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle z_1^2 \rangle}}$	$\sqrt{\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle z_1^2 \rangle}}$
	(Var)	(Num)	(Var)	(Num)	(Var)	(Num)	(Var)	(Num)
100	2,88	2,88	0,79	0,79	0,44	0,44	1,80	1,80
200	3,23	3,21	0,85	0,85	0,45	0,45	1,88	1,88
500	3,96	3,94	0,96	0,96	0,47	0,47	2,03	2,03
1000	4,81	4,77	1,08	1,08	0,50	0,50	2,17	2,17
2000	5,99	5,93	1,23	1,23	0,53	0,53	2,31	2,31
5000	8,22	8,14	1,48	1,47	0,60	0,59	2,48	2,49
10000	10,60	10,5	1,70	1,69	0,66	0,65	2,58	2,60
15000	12,36	12,2	1,84	1,84	0,70	0,70	2,63	2,63
20000	13,78	13,7	1,95	1,94	0,74	0,73	2,65	2,66

#### 4.7 Estado fundamental do CBE: Interação atrativa ( ${}^7Li$ )

Como já ressaltado, para o estudo do estado fundamental de energia do condensado de átomos alcalinos ultrafrios de  ${}^7Li$ , sujeitos à interação atrativa, utilizaremos a função teste (4.40) com  $q > 1$ . Isto por sua vez conduz a funções testes não nulas a longa distância. Não é necessário dizer que todo o procedimento de cálculo empregado no caso atrativo deve ser repetido, porém levando em conta que as integrais finais não são do tipo (4.47). Melhor dizendo, devemos substituir a identidade (4.47) neste

\*Os valores numéricos são aqueles obtidos por Dalfovo e Stringari em [21] e, nesta tabela, estão nas colunas indicadas por (Num). As colunas encabeçadas por (Var) advêm de nosso cálculo variacional.

†Nas tabelas e gráficos seguintes, utilizamos as mesmas unidades aqui empregadas.

cálculo por

$$\int_0^{\infty} x^{\mu-1} (1+x^2)^{\nu-1} dx = \frac{1}{2} B\left(\frac{\mu}{2}, 1-\nu-\frac{\mu}{2}\right), \quad \text{Re } \mu > 0, \text{Re}\left(\nu + \frac{1}{2}\mu\right) < 1, \quad (4.85)$$

ver identidade (3.50). Visto que não existe nada de novo no procedimento dos cálculos a serem efetuados para o caso atrativo, nos limitaremos a reportar os resultados relevantes para  $q > 1$ . Assim, por exemplo, a nova função teste, normalizada é

$$\psi_1(\mathbf{r}_1) = Q_a(\alpha, \beta, q) [1 - (1-q)(\alpha x_1^2 + \alpha y_1^2 + \beta z_1^2)]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (4.86)$$

onde

$$Q_a(\alpha, \beta, q) = \left[ \frac{\alpha\beta^{\frac{1}{2}} (1-q)^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{2}{q-1}\right)}{\pi^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{2}{q-1} - \frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.87)$$

A substituição de (4.86) em (4.11), juntamente com o uso da identidade (4.85), fornece a energia por partícula  $E_1/N$  em termos dos parâmetros variacionais  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $q$ ,

$$\frac{E_1}{N} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(2\alpha + \beta)(7 - 3q)}{2(1+q)} + \frac{1}{(9-5q)} \left( \frac{2}{\alpha} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) + \alpha\sqrt{\beta}F(q) \right\}, \quad (4.88)$$

onde

$$F(q) = \frac{u_1 (q-1)^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{4}{q-1} - \frac{3}{2}\right) \left[ \Gamma\left(\frac{2}{q-1}\right) \right]^2}{2\pi^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{4}{q-1}\right) \left[ \Gamma\left(\frac{2}{q-1} - \frac{3}{2}\right) \right]^2}. \quad (4.89)$$

Chamamos a atenção para o fato dos dois primeiros termos de (4.88) também estarem presentes em (4.68). Esta invariância de forma, para os termos com  $q > 1$  e  $q < 1$ , em integrais que contêm Tsallisianas multiplicando expressões quadráticas das variáveis de integração é bastante comum. Relembrando, já tivemos a oportunidade de constatar tal fato no cálculo da energia cinética do oscilador anarmônico estudado no capítulo 3 (veja equações (3.39) e (3.57)).

Novamente, seguindo a mesma linha de raciocínio que no caso repulsivo, obtemos para as outras quantidades de interesse,  $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$  e  $\sqrt{\langle z^2 \rangle}$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle \\ \langle z^2 \rangle \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} 1/\alpha \\ 1/\beta \end{array} \right\} \frac{Na_{\perp}^2}{(9-5q)}.$$

Mais uma vez, é interessante notar que a forma desta expressão independe de  $q$  ser maior ou menor que 1 (veja equação(4.73)). Na mesma direção, vemos que a razão aspecto pode ser escrita como (por comparação veja a equação (4.80) e (4.81))

$$\sqrt{\frac{\langle p_z^2 \rangle}{\langle p_x^2 \rangle}} = \sqrt{\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle z^2 \rangle}} = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}. \quad (4.90)$$

Para o cálculo numérico das quantidades relativas ao CBE de  ${}^7Li$ , usamos os mesmos valores dos parâmetros utilizados na armadilha anisotrópica por Dalfovo[21]: a frequência axial é  $\omega_z/2\pi = 117 \text{ Hz}$ ; o correspondente comprimento característico é  $a_\perp = 2.972 \times 10^{-4} \text{ cm}$ ; a frequência transversal é  $\omega_\perp/2\pi = 163 \text{ Hz}$ ; o parâmetro de assimetria é  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 0.72$ ; o comprimento de espalhamento da onda- $s$  do tripleto de spin é  $a = -27a_0$ ; e  $|a|/a_\perp = 0.48 \times 10^{-3}$ . Nossos resultados numéricos para o estado fundamental da energia por partícula  $E_1/N$ , para  $\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$  e  $\sqrt{\langle z_1^2 \rangle}$ , e os parâmetros variacionais estão listados na tabela (4.3). Assim como apresentamos para o CBE de  ${}^{87}Rb$ , as funções de onda, ao longo dos eixos  $x_1$  e  $z_1$ , estão desenhadas para o CBE de  ${}^7Li$ , para vários valores de  $N$ , na figura (4.3).

*Tabela 4.3* - Resultados variacionais para o estado fundamental do CBE de  ${}^7Li$ : a energia  $E_1/N$ , os comprimentos  $\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$  e  $\sqrt{\langle z_1^2 \rangle}$  e os parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $q$ . Os números entre parênteses correspondem aos resultados da referência [21].

$N$	$E_1/N$	$\alpha$	$\beta$	$q$	$\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$	$\sqrt{\langle z_1^2 \rangle}$
100	1,342	0,5114	0,3717	1,0092	0,701	0,825
200	1,325	0,5302	0,3858	1,0190	0,695	0,815
300	1,308	0,5478	0,4017	1,0295	0,688	0,804
400	1,289	0,5676	0,4196	1,0407	0,681	0,792
500	1,270	0,5900	0,4400	1,0528	0,674	0,780
700	1,229	0,6459	0,4918	1,0805	0,656	0,752
1000	1,156	0,7849	0,6237	1,1376	0,620	0,696
	(1,15)				(0,62)	(0,69)
1100	1,127	0,8669	0,031	1,1652	0,603	0,669
1200	1,093	1,0050	0,8386	1,2043	0,578	0,633

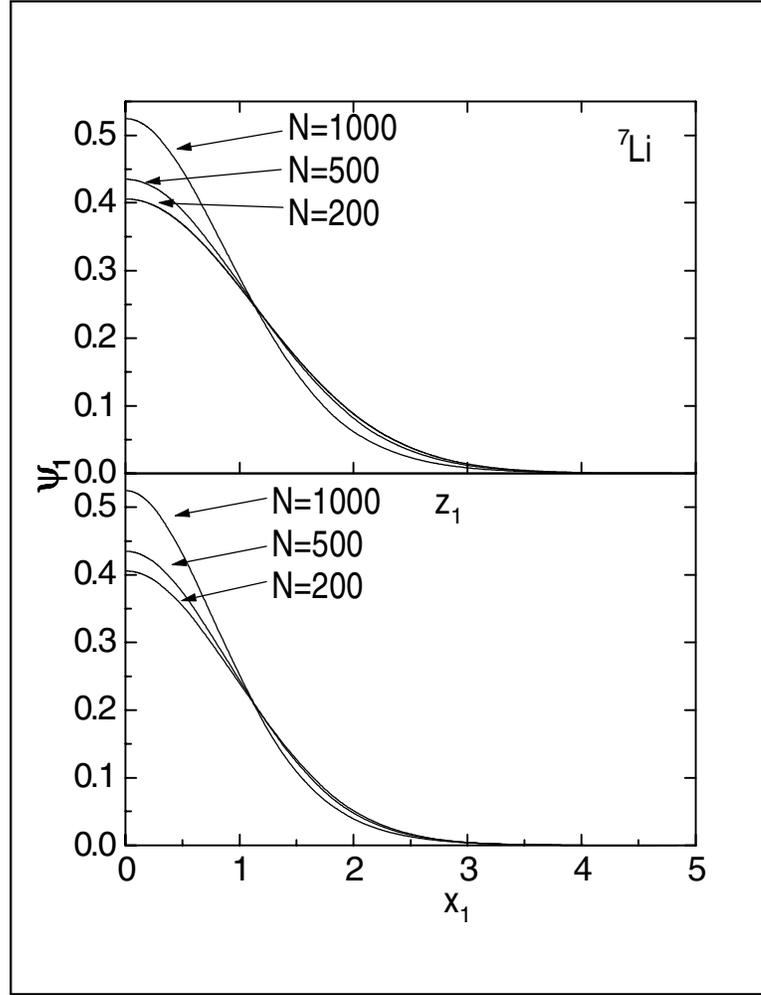


Figura 4.3 - As funções de onda ao longo do eixo  $z_1$  (parte superior) e  $x_1$  ( parte inferior) para o CBE de  ${}^7\text{Li}$  com  $N = 200, 500$  e  $1000$ .

Diferentemente do CBE de  ${}^{87}\text{Rb}$ , o CBE de  ${}^7\text{Li}$  não existe para um número suficientemente grande de átomos. Isto ocorre devido à interação atrativa entre os átomos de  ${}^7\text{Li}$ . Assim, quando  $N$  é suficientemente grande o efeito cumulativo da atração entre os átomos provoca um colapso do CBE de  ${}^7\text{Li}$ . Este aspecto é manifestado em nossos cálculos através da presença de um estado metaestável. Estado este caracterizado pela presença de um mínimo local, somente quando  $N$  é menor que um certo número crítico  $N_c$ . Os nossos cálculos numéricos, que apresentam uma certa instabilidade perto de  $N_c$ , conduziram a  $N_c \approx 1280$ , valor compatível com o valor aproximado encontrado por Dalfovo e Stringari[21], 1400. Acima deste número existe apenas o mínimo global na origem, arbitrariamente profundo, caracterizando o colapso. Para ilustrar este comportamento metaestável, da maneira mais transparente e simples, vamos considerar o caso  $\alpha = \beta$ . Neste caso a energia (4.88) é reduzida a

$$\frac{E_1}{N} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{3\alpha(7-3q)}{2(1+q)} + \frac{1}{\alpha(9-5q)} (2 + \lambda^2) + \alpha^{\frac{3}{2}} F(q) \right\}. \quad (4.91)$$

A figura (4.4) ilustra o comportamento metaestável, deste CBE simplificado, através do gráfico de  $E_1/N$  versus  $1/\sqrt{\alpha}$ , para um valor típico de  $q$  e vários  $N$ 's. O comportamento qualitativo das curvas apresentadas na figura não depende sensivelmente de  $q$ . Sendo assim, escolhemos arbitrariamente  $q = 1, 1$ .

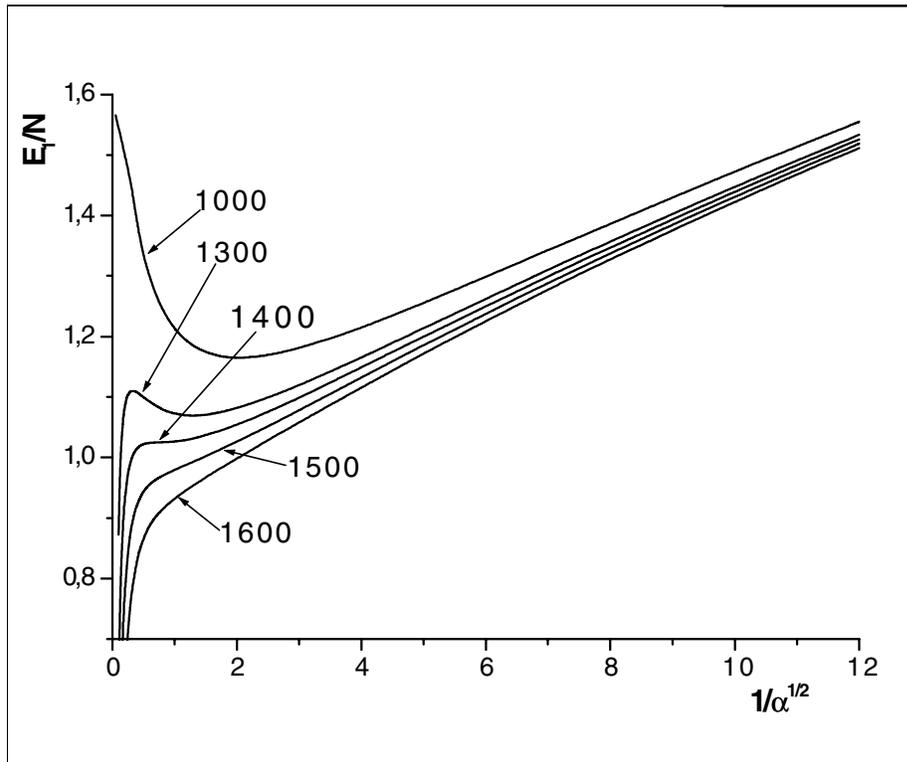


Figura 4.4 - O gráfico de  $E_1/N$  versus  $1/\sqrt{\alpha}$  (este objeto está medido em unidades de  $a_{\perp}$ ), para  $q = 1, 1$ ,  $N = 1000, 1300, 1400, 1500$  e  $1600$ ,  $u_1 = -3,84\pi \times 10^{-3}N$  e  $\lambda = 0,72$ . Os valores de  $N$  estão mostrados na figura. Observe que para  $N$  aproximadamente maior que 1400, o estado metaestável deixa de existir.

## Capítulo 5

### ESTADOS COM VÓRTICES, OU VORTICOSOS

Neste capítulo, daremos prosseguimento à análise do capítulo anterior através de um estudo variacional, detalhado, dos estados com vórtices para os condensados de Bose-Einstein, dos átomos de  $^{87}\text{Rb}$  e  $^7\text{Li}$ .

#### 5.1 Funcional de Gross-Pitaevskii para estados vorticosos

As energias dos estados vorticosos dos CBE's também podem ser obtidas através do funcional de Gross-Pitaevskii, equação (4.1). Supondo que estes estados tenham a linha do vórtice ao longo do eixo  $z$ , podemos escrever a função de onda como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) e^{i\kappa\phi}, \quad (5.1)$$

onde  $\phi$  é o ângulo em torno do eixo  $z$ , e  $\kappa$  o inteiro caracterizando o quantum de circulação. A substituição de  $\Psi(\mathbf{r})$ , no lugar de  $\psi(\mathbf{r})$ , na equação (4.1) e a utilização das variáveis escalonadas (equações (4.9)) fornecem o funcional energia para os estados com vórtices

$$\frac{E_1[\psi]}{N} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 \left[ |\nabla_1 \psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 + (\kappa r_{1\perp}^{-2} + r_{1\perp}^2 + \lambda^2 z_1^2) |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 + \frac{u_1}{2} |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^4 \right], \quad (5.2)$$

onde  $r_{1\perp}^2 = x_1^2 + y_1^2$ . Além disto, temos o vínculo

$$\int d^3\mathbf{r}_1 |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 = 1. \quad (5.3)$$

A ENLS agora torna-se

$$\left[ -\nabla_1^2 + \kappa^2 r_{1\perp}^{-2} + r_{1\perp}^2 + \lambda^2 z_1^2 + u_1 |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \psi_1(\mathbf{r}_1) = 2\mu_1 \psi_1(\mathbf{r}_1). \quad (5.4)$$

Motivados pelos bons resultados obtidos para o estado fundamental dos condensado de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  e de  $^7\text{Li}$  e observando que, para estados vorticosos destes mesmos átomos, a presença do termo centrífugo  $\kappa r_{1\perp}^{-2}$  obriga a função de onda ser nula na origem\*, utilizaremos para a função de onda teste normalizada a função Tsallisiana

$$\psi_1(\mathbf{r}_1) = Q_{r,a}(\alpha, \beta, q, \gamma) r_{1\perp}^\gamma \left[ 1 - (1 - q)(\alpha r_{1\perp}^2 + \beta z_1^2) \right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (5.5)$$

---

\*Se assim não fosse, o valor médio do termo centrífugo divergiria.

onde  $Q_{r,a}(\alpha, \beta, q, \gamma)$  é o fator de normalização (os índices  $r$  e  $a$  referem-se aos casos repulsivo e atrativo respectivamente),  $\alpha, \beta$  e  $\gamma > 0$  e  $q$  são os parâmetros variacionais.

A substituição da expressão (5.5) na equação (5.2) resultará na energia por partícula  $E_1/N$  em termos de  $\alpha, \beta, \gamma$  e  $q$ .

Para os estados com vórtices obteremos, através do processo de minimização da energia, os valores dos parâmetros variacionais e, por consequência, a função de onda para o condensado, para um dado valor de  $N$ . De posse desta função de onda, calcularemos todas as demais grandezas características do condensado, tais como: a energia por partícula, o potencial químico, a razão aspecto (característica da distribuição anisotrópica da velocidade), o pico da densidade (o valor e a posição), e a velocidade angular crítica ( $\Omega_c = \kappa^{-1} [(E_1/N)_\kappa - (E_1/N)_0]$ ) para a formação dos estados vorticosos. A seguir, adotaremos este procedimento para analisarmos os estados com vórtices dos CBE's de  $^{87}\text{Rb}$  e  $^{87}\text{Li}$ , respectivamente. Apresentaremos neste capítulo os resultados e suas discussões antes da apresentação dos detalhes dos cálculos envolvidos. Isto se deve ao fato de que, nos dois casos anteriores, oscilador anarmônico e estado fundamental da equação de Gross-Pitaevski, adquirimos uma visão mais clara dos procedimentos de cálculo, possibilitando portanto uma análise mais centrada nos resultados principais.

## 5.2 Condensados de Bose-Einstein de $^{87}\text{Rb}$ com vórtices

Para os estados com vórtices do condensado de  $^{87}\text{Rb}$  a função de onda teste escolhida é dada pela expressão (5.5) normalizada. A constante de normalização é, neste caso,

$$Q_r(\alpha, \beta, q, \gamma) = \left[ \frac{\alpha^{(1+\gamma)} \beta^{\frac{1}{2}} (1-q)^{\gamma+\frac{5}{2}} \Gamma\left(\frac{5}{2} + \gamma + \frac{2}{1-q}\right)}{2\pi^{\frac{3}{2}} \Gamma(1+\gamma) \Gamma\left(\frac{2}{1-q}\right)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.6)$$

A substituição da função de onda teste normalizada em (5.2) juntamente com a utilização da identidade (4.47) nos fornece a energia por partícula em termos de  $\alpha, \beta, \gamma$  e  $q$  dada por

$$\begin{aligned} \frac{E_1}{N} = & \left\{ \frac{1}{2} \left[ \frac{\alpha((1-q)\gamma + 2) + \beta}{1+q} + \frac{\kappa^2 \alpha}{\gamma} \right] \left[ 2 + (1-q) \left( \gamma + \frac{3}{2} \right) \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2 \left[ 2 + (1-q) \left( \gamma + \frac{5}{2} \right) \right]} \left[ \frac{2(1+\gamma)}{\alpha} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right] + \alpha \beta^{\frac{1}{2}} B(q, \lambda) \right\}, \quad (5.7) \end{aligned}$$

onde

$$B(q, \lambda) = \frac{u_1 (1-q)^{\frac{5}{2}} \Gamma(1+2\gamma) \Gamma\left(\frac{4}{1-q}\right)}{2\pi^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{5}{2} + 2\gamma + \frac{4}{1-q}\right)} \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + \gamma + \frac{2}{1-q}\right)}{\Gamma(1+\gamma) \Gamma\left(\frac{2}{1-q}\right)} \right]^2. \quad (5.8)$$

É digno de nota que para recuperarmos a energia do estado fundamental a partir de (5.7), é necessário fixarmos inicialmente  $\kappa = 0$  e, em seguida, utilizarmos  $\gamma = 0$ .

Notemos, também, que a primeira, a segunda e a terceira contribuições de (5.7) correspondem aos termos de energia cinética, campo externo e interação mútua, respectivamente.

Para estes estados vorticosos, calculamos numericamente  $E_1/N$  e a velocidade angular crítica  $\Omega_c$ , para  $\kappa = 1, 2$  e  $3$ . Os resultados destes cálculos e os parâmetros correspondentes estão listados nas tabelas (5.1), (5.2) e (5.3). Como já verificamos para o caso do estado fundamental de um CBE, que a aproximação Gaussiana é de uma maneira geral mais pobre que a Tsallisiana vamos restringir a apresentação de resultados relativos à última. Para podermos apreciar melhor a distinção existente entre um estado com vórtice e um estado fundamental, é conveniente vermos um gráfico que mostre conjuntamente estes estados. Estas funções de onda, do estado fundamental e do estado com vórtice, são exibidas na figura (5.1), ao longo do eixo  $x_1$ , para  $N = 200$  e  $2000$ . Deve ser citado ainda, a exemplo da análise da função de onda para o CBE de  $^{87}\text{Rb}$ , que a função teste Gaussiana fornece bons resultados somente para  $N$  pequeno.

Notemos que devido à interação repulsiva entre os átomos de  $^{87}\text{Rb}$ , a tendência do condensado é expandir à medida que  $N$  cresce, tal que a velocidade crítica diminui com o crescimento de  $N$ , o que está de acordo com nossos resultados. Além disto, nossas estimativas das frequências críticas  $\Omega_c/2\pi$  em um sistema de 10.000 átomos, para  $\kappa = 1, 2$  e  $3$ , estão em ótimo acordo com os valores 26, 35 e 41  $\text{Hz}$  reportados na referência [21].

Da equação (5.5) nós obtemos facilmente o valor do pico da densidade do CBE (a densidade é definida como  $\rho = |\psi(\mathbf{r})|^2 = (N/a_\perp^3) |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2$ ),

$$\rho_{\max} = \frac{2^{\frac{2}{1-q}} N Q_r(\alpha, \beta, \gamma)}{a_\perp^3 [2 + \gamma(1 - q)]^{\gamma + \frac{2}{1-q}}} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^\gamma, \quad (5.9)$$

localizado em

$$r_{1\perp} = \left[ \frac{\gamma}{\alpha [2 + \gamma(1 - q)]} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.10)$$

Substituindo os valores numéricos dos parâmetros variacionais dados na tabela (5.1), nós obtemos para  $\kappa = 1$  e o número de partículas  $N = 500, 5000$  e  $20000$ , os picos de densidades em  $2,041 \times 10^{13}, 7,434 \times 10^{13}$  e  $13,325 \times 10^{13}$  em  $r_{1\perp} = 1,125, 1,466$  e  $1,764$  respectivamente. Estes resultados mostram como o pico se move para longe do eixo  $z$  quando o número de partículas do CBE é aumentado.

Tabela 5.1 - Resultados variacionais para os estados com vórtices do  ${}^{87}\text{Rb}$  com  $\kappa = 1$ .

$N$	$\left(\frac{E_1}{N}\right)$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$q$	$\frac{\Omega_c}{2\pi}$
100	3,552	0,4330	1,3085	0,9524	0,9817	69
200	3,678	0,3998	1,2253	0,9126	0,9654	64
500	4,007	0,3151	1,0515	0,8226	0,9240	54
1000	4,452	0,2401	0,8812	0,7256	0,8710	46
2000	5,143	0,1706	0,7017	0,6146	0,7951	38
5000	6,568	0,1016	0,4875	0,4713	0,6602	30
10000	8,161	0,0673	0,3584	0,3787	0,5381	26
15000	9,354	0,0529	0,2966	0,3322	0,4598	23
20000	10,339	0,0446	0,2588	0,3026	0,4032	22

Tabela 5.2 - Resultados variacionais para os estados com vórtices do  ${}^{87}\text{Rb}$  com  $\kappa = 2$ .

$N$	$\left(\frac{E_1}{N}\right)$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$q$	$\frac{\Omega_c}{2\pi}$
100	4,520	0,4581	1,3358	1,9043	0,9905	72
200	4,619	0,4236	1,2964	1,8217	0,9813	68
500	4,889	0,3485	1,1174	1,6288	0,9560	61
1000	5,272	0,2737	0,9528	1,4150	0,9194	55
2000	5,891	0,1980	0,7659	1,1684	0,8610	48
5000	7,223	0,1181	0,5317	0,8574	0,7454	41
10000	8,749	0,0775	0,3878	0,6656	0,6318	36
15000	9,906	0,0605	0,3195	0,5733	0,5576	33
20000	10,868	0,5076	0,2776	0,5160	0,5025	32

Tabela 5.3 - Resultados variacionais para os estados com vórtices do  ${}^{87}\text{Rb}$  com  $\kappa = 3$ .

$N$	$\left(\frac{E_1}{N}\right)$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$q$	$\frac{\Omega_c}{2\pi}$
100	5,503	0,4654	1,3502	2,8661	0,9940	74
200	5,587	0,4478	1,3046	2,8144	0,9921	71
500	5,821	0,3675	1,1566	2,4662	0,9705	65
1000	6,162	0,2950	1,0003	2,1415	0,9438	60
2000	6,729	0,2170	0,8131	1,7562	0,8980	54
5000	7,980	0,1306	0,5678	1,2638	0,7998	47
10000	9,444	0,0856	0,4135	0,9627	0,6972	42
15000	10,566	0,0666	0,3397	0,8199	0,6279	39
20000	11,503	0,0558	0,2945	0,7324	0,5755	37

### 5.3 Condensados de Bose-Einstein de ${}^7\text{Li}$ com vórtices

Para o CBE de  ${}^7\text{Li}$  nós utilizamos a seguinte função de onda teste normalizada

$$\psi_1(\mathbf{r}_1) = Q_r(\alpha, \beta, q, \gamma) r_{1\perp}^\gamma \left[1 - (1 - q)(\alpha r_{1\perp}^2 + \beta z_1^2)\right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (5.11)$$

onde

$$Q_r(\alpha, \beta, q, \gamma) = \left[ \frac{\alpha^{(1+\gamma)} \beta^{\frac{1}{2}} (q-1)^{\gamma+\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{2}{q-1}\right)}{\pi^{\frac{3}{2}} \Gamma(1+\gamma) \Gamma\left(\frac{2}{q-1} - \gamma - \frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.12)$$

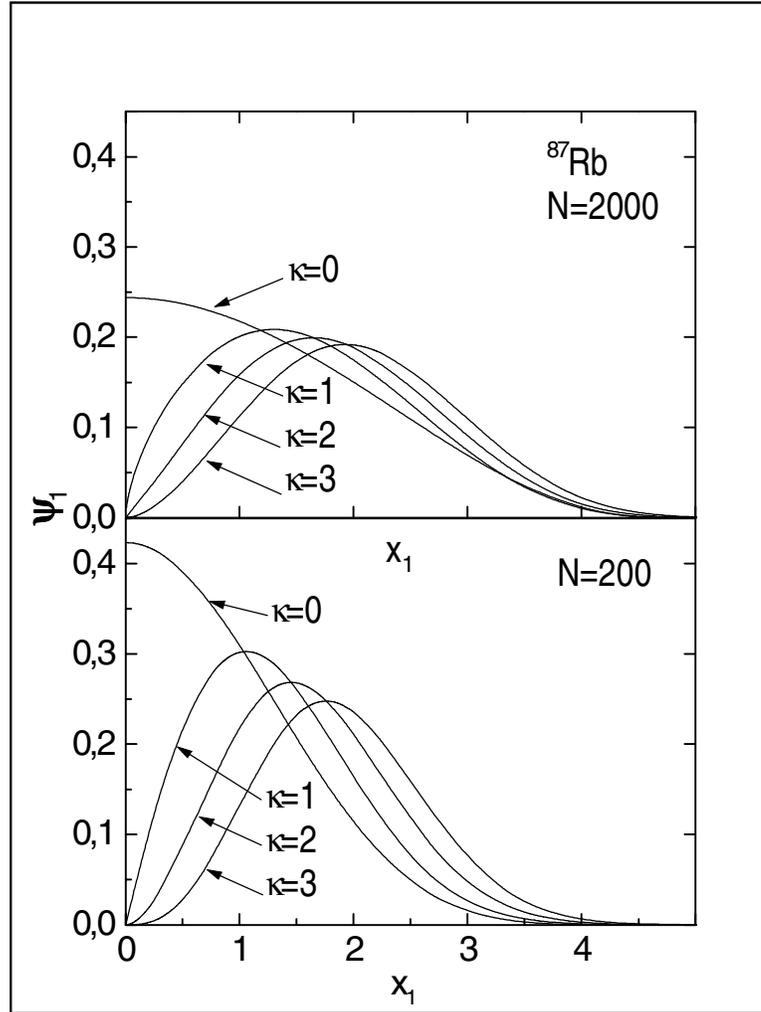


Figura 5.1 - Projeção das funções de onda dos estados fundamental e com vórtices ao longo do eixo  $x_1$ , para o CBE de  ${}^{87}\text{Rb}$ . A parte superior corresponde a  $N = 2000$  e a inferior a  $N = 200$ .

Através da substituição de (5.11) em (5.2) e o uso da identidade (4.85) chegamos ao valor da energia por partícula  $E_1/N$  em termos de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $q$ ,

$$\begin{aligned} \frac{E_1}{N} = & \frac{1}{2} \left\{ \left[ \frac{\alpha((1-q)\gamma+2) + \beta}{1+q} + \frac{\kappa^2\alpha}{\gamma} \right] \left[ 2 + (1-q) \left( \gamma + \frac{3}{2} \right) \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2 \left[ 2 + (1-q) \left( \gamma + \frac{5}{2} \right) \right]} \left[ \frac{2(1+\gamma)}{\alpha} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right] + \alpha\beta^{\frac{1}{2}} J(q, \gamma) \right\}, \quad (5.13) \end{aligned}$$

onde

$$L(q, \gamma) = \frac{u_1 (q-1)^{\frac{3}{2}} \Gamma(1+2\gamma) \Gamma\left(\frac{4}{q-1} - 2\gamma - \frac{3}{2}\right) \left[\Gamma\left(\frac{2}{q-1}\right)\right]^2}{2\pi^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{4}{q-1}\right) \left[\Gamma(1+\gamma) \Gamma\left(\frac{2}{q-1} - \gamma - \frac{3}{2}\right)\right]^2}. \quad (5.14)$$

Observemos que, também para este sistema, recuperamos a energia do estado fundamental fixando  $\kappa = 0$  e em seguida fazendo  $\gamma = 0$ . Para estes estados vorticosos com interação atrativa, nós calculamos numericamente a energia por partícula,  $E_1/N$ , e a velocidade angular crítica  $\Omega_c$  para  $\kappa = 1, 2$  e  $3$ . Todos estes resultados estão tabelados, juntamente com os respectivos parâmetros variacionais, nas tabelas (5.4), (5.5) e (5.6). Na figura (5.3) nós ilustramos a função de onda para vários valores de  $\kappa$  e  $N$  do CBE de  ${}^7\text{Li}$ . É interessante lembrar que no caso  $N = 2000$  não existe função de onda para o estado fundamental deste CBE, pois 2000 está acima do número crítico do estado fundamental. Deve ser frizado que existem números críticos para os estados vorticosos, porém maiores que o do estado fundamental. Além disto, contrariamente à interação repulsiva dos átomos de  ${}^{87}\text{Rb}$ , a interação atrativa dos átomos de  ${}^7\text{Li}$  força-os para o centro do condensado e, conseqüentemente, a velocidade angular cresce à medida que  $N$  cresce. O nosso resultado previsto para  $\kappa = 1$  e  $N = 1000$  é  $\Omega_c = 1.118$ , que concorda muito bem com 1,12, como reportado na referência [21].

Para a interação atrativa, a densidade máxima é dada por

$$\rho_{\max} = \frac{2^{\frac{2}{1-q}} N Q_a^2(\alpha, \beta, q, \gamma)}{\alpha^3 [2 + \gamma(1-q)]^{\gamma + \frac{2}{1-q}}} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^\gamma, \quad (5.15)$$

que acontece em

$$\mathbf{r}_{1\perp} = \left\{ \frac{\gamma}{\alpha [2 + \gamma(1-q)]} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (5.16)$$

Substituindo os valores numéricos dos parâmetros variacionais das tabelas (5.4), (5.5) e (5.6), nós obtemos para  $\kappa = 1, 2$  e  $3$  com os números de partículas  $N = 3500, 6000$  e  $8000$  as densidades máximas  $\rho_{\max} = 1,517 \times 10^{13}, 2,337 \times 10^{13}$  e  $2,830 \times 10^{13}$  ocorrendo em  $r_{1\perp} = 0,862, 1,242$  e  $1,555$ , respectivamente. Os três picos da densidade crescem quase que proporcionalmente ao número de partículas. Estes resultados também estão em acordo com aqueles obtidos na referência [21] (ver sua figura 8).

Tabela 5.4 - Resultados variacionais para os estados com vórtices do CBE de  ${}^7\text{Li}$  com  $\kappa = 1$ .

$N$	$\left(\frac{E_1}{N}\right)$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$q$	$\frac{\Omega_c}{2\pi}$
300	2,335	0,5139	0,3763	1,0110	1,0053	1,027
500	2,318	0,5236	0,3880	1,0183	1,0087	1,048
700	2,301	0,5339	0,4004	1,0275	1,0119	1,072
1000	2,274	0,5519	0,4224	1,0400	1,0186	1,118
1100	2,265	0,5582	0,4302	1,0446	1,0207	1,138
1200	2,255	0,5646	0,4383	1,0493	1,0227	1,162
2000	2,176	0,6273	0,5197	1,0922	1,0410	
3000	2,057	0,7560	0,6991	1,1682	1,0699	
3500	1,985	0,8730	0,8718	1,2260	1,0893	

Tabela 5.5 - Resultados variacionais para os estados com vórtices do CBE de  ${}^7\text{Li}$  com  $\kappa = 2$ .

$N$	$\left(\frac{E_1}{N}\right)$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$q$	$\frac{\Omega_c}{2\pi}$
300	3,342	0,5096	0,3713	2,2018	1,0025	1,017
500	3,329	0,5163	0,3795	2,0365	1,0042	1,030
700	3,316	0,5229	0,3883	2,0495	1,0059	1,044
1000	3,297	0,5380	0,4030	2,0863	1,0099	1,071
1100	3,290	0,5375	0,4068	2,0806	1,0094	1,082
1200	3,284	0,5416	0,4122	2,0884	1,0105	1,095
2000	3,228	0,5761	0,4578	2,1591	1,0179	
3000	3,153	0,6315	0,5346	2,2676	1,0282	
6000	3,843	1,0763	1,2307	2,9819	1,0681	

Tabela 5.6 - Resultados variacionais para os estados com vórtices do CBE de  ${}^7\text{Li}$  com  $\kappa = 3$ .

$N$	$\left(\frac{E_1}{N}\right)$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$q$	$\frac{\Omega_c}{2\pi}$
300	4,345	0,5085	0,3694	3,0325	1,0018	1,017
500	4,334	0,5139	0,3760	3,0522	1,0028	1,030
700	4,324	0,5193	0,3828	3,0718	1,0039	1,044
1000	4,308	0,5280	0,3937	3,1033	1,0055	1,071
1100	4,302	0,5305	0,3973	3,1115	1,0060	1,082
1200	4,297	0,5336	0,4013	3,1225	1,0060	1,095
2000	4,252	0,5583	0,4354	3,2078	1,0107	
3000	4,128	0,6451	0,5577	3,5008	1,0282	
6000	3,766	1,2087	1,4620	5,0965	1,0681	

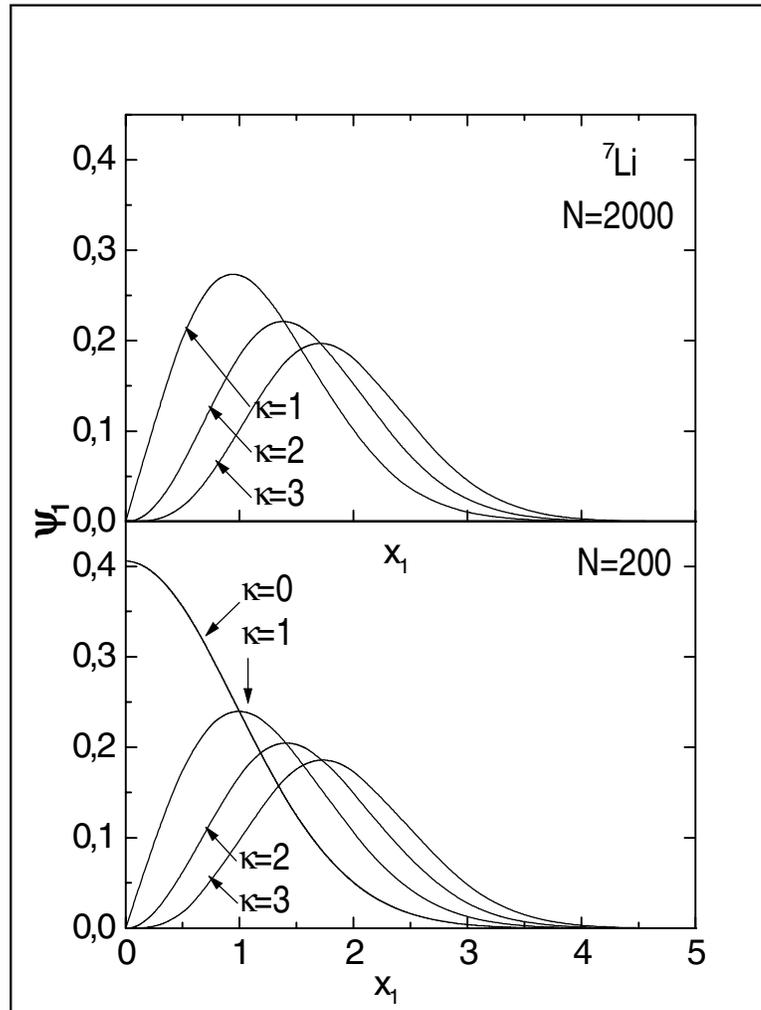


Figura 5.2 - Na parte superior são apresentados estados com vórtices para o CBE de  ${}^7\text{Li}$ , com  $N = 2000$  e a parte inferior exibe-se o análogo para  $N = 200$ , ambas sendo projeções ao longo do eixo  $x_1$ .

## 5.4 Cálculos para estados com vórtices

### 5.4.1 Normalização da função de onda

O procedimento de cálculo que passamos a descrever é aplicável para um estado vorticoso genérico, isto é, para qualquer valor de  $\kappa$ . Esta metodologia inclui como caso particular o estado fundamental,  $\kappa = 0$ . Porém, do ponto de vista metodológico, entendemos ser instrutivo apresentar os dois procedimentos de cálculo: o empregado no capítulo 4 e este que exibiremos a seguir para o caso com interação repulsiva,  $q < 1$ .

Iniciemos com o cálculo da constante de normalização da função de onda (5.5). Chamamos a atenção para o fato que todas as variáveis auxiliares utilizadas aqui são locais, a menos que explicitadas diferentemente. Seja então a equação que define a

constante de normalização

$$\int_V |\psi_1|^2 d^3\mathbf{r}_1 = 1. \quad (5.17)$$

Simetrizemos as variáveis usando

$$x = x_1, \quad y = y_1 \quad \text{e} \quad z = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} z_1, \quad (5.18)$$

tal que  $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$  e  $r_\perp^2 = x^2 + y^2 = r^2 \text{sen}^2(\theta)$ , onde  $r$ ,  $\theta$  e  $\varphi$  são as coordenadas esféricas. Deste modo a função de onda teste (5.5) torna-se

$$\psi_1(x, y, z) = Q_r(\alpha, \beta, q, \gamma) [r \text{sen}(\theta)]^\gamma [1 - (1 - q) \alpha r^2]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (5.19)$$

Assim,

$$1 = 2\pi Q_r^2(\alpha, \beta, q, \gamma) \int_0^{r_0} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} r^{2\gamma+2} dr \int_0^\pi \text{sen}^{2\gamma+1}(\theta) [1 - (1 - q) \alpha r^2]^{\frac{2}{1-q}} d\theta, \quad (5.20)$$

onde  $r_0 = \sqrt{1/\alpha(1 - q)}$ . Portanto, a integral dupla acima pode ser escrita como

$$1 = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} 2\pi Q_r^2(\alpha, \beta, q, \gamma) I_1 I_2 \quad (5.21)$$

com

$$I_1 = \int_0^\pi \text{sen}^{2\gamma+1}(\theta) d\theta \quad (5.22)$$

e

$$I_2 = \int_0^{r_0} r^{2\gamma+2} [1 - (1 - q) \alpha r^2]^{\frac{2}{1-q}} dr. \quad (5.23)$$

Façamos, inicialmente, a integral  $I_1$ . Para tanto procedamos à mudança de variáveis  $\zeta = \cos(\theta)$ , tal que  $d\theta = -d\zeta / \sqrt{1 - \zeta^2}$ . Então,

$$I_1 = \int_{-1}^1 (1 - \zeta^2)^\gamma d\zeta = 2 \int_0^1 (1 - \zeta^2)^\gamma d\zeta = B\left(\frac{1}{2}, \gamma + 1\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(\gamma + 1)}{\Gamma\left(\gamma + \frac{3}{2}\right)} \quad (5.24)$$

$$\int_0^\pi \text{sen}^{2\gamma+1}(\theta) d\theta = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\gamma + 1)}{\Gamma\left(\gamma + \frac{3}{2}\right)} \quad (5.25)$$

onde empregamos, de acordo com ([36], 8.380.1)

$$B(x, y) = 2 \int_0^1 t^{2x-1} (1 - t^2)^{y-1} dt \quad (5.26)$$

com as identificações  $t = \zeta$ ,  $x = 1/2$  e  $y = \gamma + 1$ .

Passemos ao cálculo de  $I_2$ . Fazendo a mudança de variáveis  $t = \sqrt{(1-q)\alpha} r$ , chegamos a

$$I_2 = \frac{1}{2[(1-q)\alpha]^{2\gamma+\frac{3}{2}}} 2 \int_0^1 t^{2\gamma+2} (1-t^2)^{\frac{2}{1-q}} dt. \quad (5.27)$$

Novamente, usando a identidade (5.26) e as identificações  $x = \gamma + 3/2$  e  $y = 1 + 2/(1-q)$ , temos como resultado

$$\int_0^{r_0} r^{2\gamma+2} [1 - (1-q)\alpha r^2]^{\frac{2}{1-q}} dr = \frac{1}{2[(1-q)\alpha]^{\gamma+\frac{3}{2}}} \frac{\Gamma(\gamma + \frac{3}{2}) \Gamma(\frac{2}{1-q} + 1)}{\Gamma(\gamma + \frac{2}{1-q} + \frac{5}{2})}. \quad (5.28)$$

De posse dos resultados para  $I_1$  e  $I_2$ , obtemos a constante de normalização

$$Q_r(\alpha, \beta, q, \gamma) = \left[ \frac{\beta^{\frac{1}{2}} (1-q)^{\gamma+\frac{5}{2}} \alpha^{\gamma+1}}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\Gamma(\gamma + \frac{2}{1-q} + \frac{5}{2})}{\Gamma(\gamma + 1) \Gamma(\frac{2}{1-q})} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.29)$$

#### 5.4.2 Energia potencial de interação

A expressão para a energia potencial de interação é

$$E^{(p)} = \frac{u_1}{4} \int_V |\psi_1|^4 d^3 \mathbf{r}_1. \quad (5.30)$$

Usando os mesmos artifícios de cálculo que na seção anterior, temos

$$E^{(p)} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} 2\pi Q_r^4(\alpha, \beta, q, \gamma) u_1 (I_3 I_4), \quad (5.31)$$

onde

$$I_3 = \int_0^\pi \text{sen}^{4\gamma}(\theta) \text{sen}(\theta) d\theta \quad (5.32)$$

e

$$I_4 = \int_0^{r_0} r^{4\gamma+2} [1 - (1-q)\alpha r^2]^{\frac{4}{1-q}} dr. \quad (5.33)$$

Usando as identidades (5.25) e (5.28) a integral  $I_3$  torna-se

$$I_3 = \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(2\gamma + 1)}{\Gamma(2\gamma + \frac{3}{2})} \quad (5.34)$$

e a integral  $I_4$ ,

$$I_4 = \frac{1}{2[1 - (1-q)\alpha]^{2\gamma+\frac{3}{2}}} \left[ \frac{\Gamma(2\gamma + \frac{3}{2}) \Gamma(\frac{4}{1-q} + 1)}{\Gamma(2\gamma + \frac{4}{1-q} + \frac{5}{2})} \right]. \quad (5.35)$$

Deste modo,

$$E^{(p)} = \left[ \frac{\beta(1-q)^5}{\pi^3} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\alpha u_1}{2} \left[ \frac{\Gamma(\gamma + \frac{2}{1-q} + \frac{5}{2})}{\Gamma(\gamma + 1) \Gamma(\frac{2}{1-q})} \right]^2 \left[ \frac{\Gamma(2\gamma + 1) \Gamma(\frac{4}{1-q})}{\Gamma(2\gamma + \frac{4}{1-q} + \frac{5}{2})} \right]. \quad (5.36)$$

### 5.4.3 Energia potencial de oscilador harmônico

A expressão da energia correspondente ao oscilador harmônico é

$$E^{(oh)} = \frac{1}{2} \int_V (r_{1\perp}^2 + \lambda^2 z_1^2) |\psi_1|^2 d^3 \mathbf{r}_1 = \frac{1}{2} (I_5 + I_6) \quad (5.37)$$

onde

$$\begin{aligned} I_5 &= \frac{1}{2} \int_V r_{1\perp}^2 \psi_1^2 d^3 r_1 = \frac{1}{2} 2\pi \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} Q_r^2(\alpha, \beta, q, \gamma) \int_0^\pi \text{sen}^{2\gamma+3}(\theta) d\theta \times \\ &\times \int_0^{r_0} r^{2\gamma+4} [1 - (1-q)]^{\frac{2}{1-q}} dr \end{aligned} \quad (5.38)$$

e

$$\begin{aligned} I_6 &= \frac{\lambda^2}{2} \int_V z_1^2 \psi_1^2 d^3 r_1 = \frac{\lambda^2}{2} 2\pi \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}} Q_r^2(\alpha, \beta, q, \gamma) \int_0^\pi \text{sen}^{2\gamma+3}(\theta) \cos^2(\theta) d\theta \times \\ &\times \int_0^{r_0} r^{2\gamma+4} [1 - (1-q)]^{\frac{2}{1-q}} dr. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Seguindo os procedimentos anteriores, temos

$$I_5 = \frac{\gamma + 1}{2\alpha [2 + (1-q) (\gamma + \frac{5}{2})]} \quad (5.40)$$

e

$$I_6 = \frac{\lambda^2}{4\beta [2 + (1-q) (\gamma + \frac{5}{2})]}. \quad (5.41)$$

Conseqüentemente,

$$E^{(oh)} = \frac{1}{4 [2 + (1-q) (\gamma + \frac{5}{2})]} \left( \frac{2(\gamma + 1)}{\alpha} + \frac{\lambda^2}{\beta} \right) \quad (5.42)$$

### 5.4.4 Energia centrífuga

A expressão da contribuição centrífuga, seguindo os procedimentos já adotados, é

$$\begin{aligned} E^{(ct)} &= \frac{\kappa^2}{2} \int_V \frac{|\psi_1|^2}{r_{1\perp}^2} d^3 \mathbf{r}_1 \\ &= \kappa^2 \pi \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} Q_r^2(\alpha, \beta, q, \gamma) \int_0^\pi \text{sen}^{2\gamma+3}(\theta) \cos^2(\theta) d\theta \times \\ &\times \int_0^{r_0} r^{2\gamma+4} [1 - (1-q) \alpha r^2]^{\frac{2}{1-q}} dr \end{aligned} \quad (5.43)$$

tal que, de acordo com as identidades (5.25) e (5.28)

$$E^{(ct)} = \frac{\alpha \kappa^2}{2\gamma} \left[ 2 + (1-q) \left( \gamma + \frac{3}{2} \right) \right]. \quad (5.44)$$

## 5.4.5 Energia cinética

Passemos à última contribuição para o funcional de Gross-Pitaevskii, isto é,

$$E^{(c)} = \frac{1}{2} \int_V |\nabla \psi_1|^2 d^3 \mathbf{r}_1. \quad (5.45)$$

Exatamente como nas seções anteriores, temos que a contribuição cinética é

$$\begin{aligned} E^{(c)} &= \frac{1}{2} \int_V \left[ \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial y_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial z_1} \right)^2 \right] d^3 \mathbf{r}_1 \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \int_V \left[ \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial y} \right)^2 + \frac{\beta}{\alpha} \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \right)^2 \right] d^3 \mathbf{r}, \end{aligned} \quad (5.46)$$

tendo em vistas a transformação de variáveis (5.18). Assim, notando que  $\psi_1$  é simétrica em relação a  $x$  e a  $y$ , vamos calcular primeiro a integral que usa a derivada em  $z$ .

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial z} = -2 \alpha z Q_r(\alpha, \beta, q, \gamma) r_{\perp}^{\gamma} [1 - (1 - q) \alpha z^2]^{\frac{q}{1-q}}, \quad (5.47)$$

tal que, designando por  $E_z^{(c)}$  a contribuição devida à derivada em  $x$ , e correspondentemente para as demais, temos

$$E_z^{(c)} = \frac{1}{2} \int_V \frac{\beta}{\alpha} \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \right)^2 d^3 r_1, \quad (5.48)$$

$$E_x^{(c)} = \frac{1}{2} \int_V \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right)^2 d^3 r_1 \quad (5.49)$$

e

$$E_y^{(c)} = \frac{1}{2} \int_V \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial y} \right)^2 d^3 r_1. \quad (5.50)$$

Deste modo,

$$\begin{aligned} E_z^{(c)} &= \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} Q_r^2(\alpha, \beta, q, \gamma) \int_V \pi r^2 \text{sen}(\theta) dr d\theta (4\alpha^2 z^2) r_{\perp}^{2\gamma} [1 - (1 - q) \alpha r^2]^{\frac{2q}{1-q}} \\ &= 4\pi \alpha^{\frac{3}{2}} \beta^{\frac{1}{2}} Q_r^2(\alpha, \beta, q, \gamma) \left[ \int_0^{\pi} \text{sen}^{2\gamma+1}(\theta) \cos^2(\theta) d\theta \right] \times \\ &\quad \times \left[ \int_0^{r_0} r^{2\gamma+4} [1 - (1 - q) \alpha r^2]^{\frac{2q}{1-q}} dr \right] \end{aligned} \quad (5.51)$$

Novamente, fazendo uso das identidades (5.25) e (5.28),

$$E_z^{(c)} = \frac{1}{2} \frac{\beta}{1+q} \left[ \left( \gamma + \frac{3}{2} \right) (1 - q) + 2 \right]. \quad (5.52)$$

Como as integrais nas derivadas em relação a  $x$  e  $y$  tem a mesma forma para ambas, nos limitaremos a reportar os resultados

$$E_x^{(c)} + E_y^{(c)} = \frac{1}{2} \frac{\alpha (2 + (1 - q) \gamma)}{1 + q} \left[ 2 + (1 - q) \left( \gamma + \frac{3}{2} \right) \right]. \quad (5.53)$$

Deste modo, agrupando as diversas contribuições para  $E^{(c)}$ , obtemos

$$E^{(c)} = E_x^{(c)} + E_y^{(c)} + E_z^{(c)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{[\alpha (2 + (1 - q) \gamma) + \beta]}{1 + q} \right\} \left[ 2 + (1 - q) \left( \gamma + \frac{3}{2} \right) \right]. \quad (5.54)$$

Como os cálculos, para o caso atrativo, da energia por partícula são similares aos que acabamos de exibir, não nos deteremos em maiores detalhes. Ressaltamos apenas que os resultados finais das contribuições para a energia diferem em forma somente para os termos de interação entre os átomos (ver as equações (5.7) e (5.13)). Isto reforça, mais uma vez, que integrais quadráticas nas coordenadas, ou suas derivadas, tem a mesma dependência em  $q$ , independentemente de qual seja o caso:  $q > 1$  ou  $q < 1$ .

## Capítulo 6

### CONCLUSÃO

Neste trabalho fizemos um estudo variacional de situações que diferem, de maneira controlável, do comportamento Gaussiano. Empregamos para tal uma família de funções teste que diferem da Gaussiana em grau ajustável. Estas funções Tsallisianas (Gaussianas generalizadas), que dependem de um parâmetro real  $q$ , estão baseadas na estatística de Tsallis. Quando  $q$  tende para um, reobtemos a Gaussiana. Por sua vez, para  $q > 1$  temos funções de cauda mais longa que a Gaussiana, em particular, a função Lorentziana é obtida quando consideramos  $q = 2$ . Por outro lado, funções de cauda curta são obtidas com  $q < 1$ . Neste caso a função é de cauda finita.

Primeiramente analisamos o estado fundamental de uma família de osciladores anarmônicos, regida por uma energia potencial proporcional a  $|x|^{2n}$ . Para tanto utilizamos, inicialmente, como função teste a função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico, isto é, uma Gaussiana. Verificamos que os resultados obtidos são bons somente para  $n$  próximo de um, o que foi constatado através das figuras (3.1) e (3.2), indicando portanto a necessidade de uma função com comportamento de cauda mais adequado que a da Gaussiana. Por exemplo, quando  $n > 1$ , o estado fundamental é em certo sentido mais fortemente confinante que o Gaussiano, pois para  $x$  suficientemente grande, o potencial cresce muito mais rapidamente que o potencial harmônico; sugerindo assim uma função de onda que decresce mais rapidamente que a Gaussiana com o crescimento de  $x$ . Empregamos, conseqüentemente, a Tsallisiana com  $q < 1$ . Os resultados obtidos mostraram uma estreita concordância com a análise numérica (tabela(3.1) e figura (3.4)), tanto para a energia do estado fundamental, quanto para a correspondente função de onda (figura (3.5)). Nesta mesma direção, empregamos Tsallisianas com  $q > 1$ , quando  $n < 1$ . Da mesma forma que no caso  $n > 1$ , os resultados para  $n < 1$  apresentaram excelente concordância com aqueles obtidos numericamente. Estes resultados variacionais e numéricos, da energia do estado fundamental, estão em forma tabular (tabela (3.1)) e gráfica (figura (3.4)) para valores desde  $n = 0,05$  até  $n = 10$ . Nesta mesma tabela (3.1) estão calculados os desvios percentuais da aproximação variacional em relação aos dados numéricos, arbitrados como exatos. Notemos que o maior desvio foi 0,58%. Na figura (3.5) são exibidas as Tsallisianas (funções de onda testes) e as funções obtidas por integração numérica. Salta aos olhos a concordância entre ambas, ratificando a qualidade da aproximação variacional.

Motivados pelos resultados animadores obtidos variacionalmente, para a família de osciladores anarmônicos, partimos para a análise do problema básico que

norteou esta monografia: o estudo variacional de condensados de Bose-Einstein de átomos alcalinos. O primeiro caso estudado foi o estado fundamental do CBE de  $^{87}\text{Rb}$ , que apresenta interação atrativa entre seus constituintes. O termo de interação mútua, do tipo par, entre os átomos de  $^{87}\text{Rb}$  é da forma  $|\psi|^4$  conduzindo, quando comparado ao oscilador anarmônico com  $n > 1$ , a uma função teste com  $q < 1$ . Esta função teste, parametrizada de outra forma, foi proposta por Fetter[25], porém sem uma análise quantitativa para o CBE de  $^{87}\text{Rb}$ . Fizemos aqui a análise numérica detalhada para este caso. Os resultados obtidos são de fato animadores. No caso do estado fundamental do CBE de  $^{87}\text{Rb}$ , caracterizado por interação repulsiva entre seus constituintes, podemos estimar a qualidade dos resultados obtidos comparando-os com valores obtidos numericamente (Dalfovo e Stringari, referência [21]), observando-se a tabela (4.1) O maior desvio é menor que 1%. Na figura (4.1) são mostradas algumas funções de onda testes. O comportamento destas funções é o esperado para um condensado, ou seja, à medida que  $N$  cresce diminui a amplitude e aumenta o raio médio da nuvem atômica. Na figura (4.2) mostramos a comparação entre a função teste Tsallisiana e uma Gaussiana para um CBE de  $^{87}\text{Rb}$  para  $N = 2000$  átomos. Este número foi escolhido por ter sido o número de átomos do primeiro CBE observado [2]. Embora, visualmente, a função de onda teste não se distancie apreciavelmente da Gaussiana, convém lembrar que  $u_1 \approx 0,1N = 200$ , se usamos os parâmetros de Anderson et al (referência [2]), o que nos afasta da aproximação Gaussiana do modelo não-interagente (válida se  $u_1 \approx 0$ ). Como medida da qualidade da Tsallisiana como função teste, calculamos vários parâmetros do CBE e o comparamos com valores obtidos por métodos numéricos. Neste sentido tabulamos os valores de  $\mu_1$ , os valores médios  $\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$  e  $\sqrt{\langle z_1^2 \rangle}$ , assim como também a razão aspecto  $\sqrt{\langle p_z^2 \rangle} / \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}$  variacionais e numéricos. Exceto por  $\mu_1$ , os valores variacionais e numéricos são praticamente indistinguíveis. O maior erro percentual cometido no cálculo de  $\mu_1$  é menor que 1,40%. Estes dados estão colecionados na tabela (4.2).

Já no caso do CBE de  $^7\text{Li}$ , interação atrativa entre os átomos, introduzimos e empregamos como função teste uma Tsallisiana com  $q > 1$  para levar em conta o comportamento de cauda longa deste condensado. Os resultados quantitativos conseguidos variacionalmente estão, para o estado fundamental, em franca concordância com os poucos valores calculados numericamente disponíveis na literatura[21]. Por exemplo, no cálculo da energia por partícula, para  $N = 1000$ , nossa aproximação fornece 1,156 contra 1,15 da referência [21]. Também para  $N = 1000$ , os valores médios  $\sqrt{\langle x_1^2 \rangle}$  e  $\sqrt{\langle z_1^2 \rangle}$  são respectivamente 0,620 e 0,696, para a aproximação variacional e 0,62 e 0,69 para a análise numérica. Diferentemente do caso repulsivo, o atrativo não admite um número muito grande de átomos formando o condensado. Nossa análise forneceu o número crítico da ordem de 1300 átomos de  $^7\text{Li}$ .

No tocante aos estados com vórtices estendemos as funções testes Tsallisianas, de maneira a incorporar o valor nulo na origem. Os cálculos efetuados estão novamente em boa concordância com os obtidos numericamente. Para o CBE de  $^{87}\text{Rb}$  calculamos a velocidade angular crítica que não está com erro superior a 2,9% em relação aos obtidos numericamente. Na mesma direção, verificamos que o pico da densidade do condensado, calculada através de nosso procedimento variacional fornece uma margem de erro semelhante aos anteriores, quando comparado aos resultados

numéricos. Com discrepâncias pequenas, análogas às obtidas para o CBE de  $^{87}\text{Rb}$ , encontram-se os valores resultantes do estudo dos estados vorticosos do CBE de  $^7\text{Li}$ .

Verificamos em nossos estudos que o cálculo variacional permite obter com grande precisão, e sem perder o apelo qualitativo, muitos resultados de problemas não puramente acadêmicos. Aliado a este poder, temos ainda a simplicidade de cálculo do método variacional, quando comparado a técnicas puramente numéricas. Neste contexto verificamos que uma função teste, simples como a Tsallisiana, pode ser aplicada com sucesso em problemas fisicamente relevantes. Além disto, a partir do procedimento de cálculo empregado na análise de CBE, verificamos que integrais com Tsallisianas podem ser facilmente efetuadas em dimensões arbitrárias. Isto sugere que funções Tsallisianas possam ser empregadas em muitos outros contextos, onde funções com comportamento de cauda mais curto ou longo comparados com o da Gaussiana sejam relevantes.

## Capítulo 7

### APÊNDICE A1: CÁLCULO VARIACIONAL

Neste apêndice reveremos brevemente o cálculo das variações[37]. A natureza dos extremos, se máximos ou mínimos, ficará evidente pelo problema a ser tratado e por conseguinte consideraremos somente a primeira variação. Analisaremos o problema fundamental para uma variável dependente envolvendo pontos extremos fixados e apresentaremos a generalização para muitas variáveis, dependentes e independentes. Consideraremos também o problema isoperimétrico, enfatizando a solução aproximada para equação de autovalor.

#### 7.1 Problema fundamental

O problema fundamental no cálculo de variações é encontrar a função  $y(x)$  que leva a integral

$$J = \int_{x_1}^{x_2} \phi(y, y'; x) dx \quad (7.1)$$

a um valor estacionário. Na expressão acima  $x$  é a variável independente,  $y = y(x)$  e  $y' = dy/dx$ . Vamos assumir que  $y(x)$  possui todas as derivadas necessárias que a solução do problema exige. Com esta suposição não será necessário reiterar em cada estágio as restrições que deveriam ser impostas à função  $y(x)$ . Podemos ver também que  $J$  é um número que depende do caminho  $\Gamma$  escolhido (caracterizado por  $y = y(x)$ ) para efetuarmos a integração do ponto  $A = (x_1, y_1)$  ao ponto  $B = (x_2, y_2)$ . Uma vez escolhido o caminho  $\Gamma$ ,  $J$  fica determinado. Escolhamos  $\Gamma_0$  de tal modo que  $J$  tenha um extremo para um dado  $y(x)$  com  $A$  e  $B$  fixados. Se usarmos  $\Gamma_0$  como referência para os caminhos adjacentes, dentro de uma pequena vizinhança, podemos definir qualquer afastamento de  $\Gamma_0$ , caracterizado por  $Y(x)$ , como

$$\delta y(x) = Y(x) - y(x). \quad (7.2)$$

Assim,

$$\delta \left( \frac{dy}{dx} \right) = \frac{dY}{dx} - \frac{dy}{dx} = \frac{d}{dx}(Y - y) = \frac{d}{dx}(\delta y) \quad (7.3)$$

ou,  $\delta$  e  $d/dx$  comutam. Deste modo, podemos escrever que  $Y(x) = y(x) + \delta y(x)$  e  $Y'(x) = y'(x) + \delta y'(x)$ .

Nestes termos, a condição para que  $J$  fique estacionário é que seu valor calculado ao longo de  $\Gamma$ , e suficientemente “próximo” de  $\Gamma_0$ , sejam os mesmos, ou seja, as integrais ao longo de  $y$  e de  $y + \delta y$  forneçam o mesmo valor\*. Isto é, a variação de  $J$  é nula,

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \phi(y + \delta y, y' + \delta y'; x) dx - \int_{x_1}^{x_2} \phi(y, y'; x) dx = 0. \quad (7.4)$$

Expandindo a primeira parte do integrando em série de Taylor, desprezando os termos de ordem superior à primeira, e subtraindo desta expansão a segunda parte do integrando, obtemos

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \phi}{\partial y'} \delta y' \right) dx = \int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \phi}{\partial y'} \frac{d}{dx} \delta y \right) dx. \quad (7.5)$$

Fazendo a integração do segundo termo por partes e usando  $u = \partial \phi / \partial y'$  e  $d\nu = (d(\delta y) / dx) dx = d(\delta y)$ , resultando  $\nu = \delta y$ , verificamos que

$$\delta J = \left[ \delta y \frac{\partial \phi}{\partial y'} \right]_{x_1}^{x_2} + \int_{x_1}^{x_2} \delta y \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y'} \right) \right\} dx = \int_{x_1}^{x_2} \delta y \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y'} \right) \right\} dx. \quad (7.6)$$

Para obtermos a última igualdade empregamos

$$\delta y(x_1) = \delta y(x_2) = 0, \quad (7.7)$$

visto que os pontos extremos estão fixados.

### 7.1.1 Lema fundamental

Como em várias situações faremos uso do Lema fundamental do cálculo variacional e do seu corolário, vamos apresentá-los:

**Lema: Se,**

- $f(x)$  é contínua em  $a \leq x \leq b$ ;
- $g(x)$  e  $g'(x)$  são contínuas em  $a \leq x \leq b$ ;
- $g(a) = g(b) = 0$ , mas  $g(x)$  é arbitrária para qualquer  $x$  em  $a \leq x \leq b$ , então

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = 0 \quad (7.8)$$

**implica**  $f(x) = 0$  em  $a \leq x \leq b$ .

---

\*Desprezando termos de ordem superior à primeira em  $\delta y$ .

**Corolário :** Se  $f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x); g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x)$  são definidas como as  $f(x)$  e  $g(x)$  no lema acima, respectivamente, então

$$\int_a^b \left\{ \sum_{r=1}^n f_r(x) g_r(x) \right\} dx = 0 \quad (7.9)$$

implica que  $f_r(x) = 0$  em  $a \leq x \leq b$  para  $1 \leq r \leq n$ .

A prova do corolário é simples, pois sendo os  $g$ 's arbitrários, escolhamos  $g_s(x) = 0$  para todo  $s$  tal que  $1 \leq s \leq n$  exceto em  $r = s$ , e aplicamos o lema.

Com o lema à disposição, voltemos à integral  $\delta J$ . Já vimos que, apesar de “pequeno”, o  $\delta y$  é arbitrário, então, usando o lema constatamos que

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y'} \right) = 0. \quad (7.10)$$

Esta é a equação de *Euler-Lagrange*, cuja solução  $y(x)$  nos fornece o caminho  $\Gamma_0$  unindo  $A$  e  $B$  que extremiza a integral  $J$ . A equação de Euler-Lagrange é uma condição necessária para que  $J$  seja um extremo. Em nossas aplicações ficará evidente se  $y(x)$  maximiza ou minimiza  $J$ , por conseguinte não nos deteremos em detalhes sobre as condições suficientes para que a solução encontrada seja um mínimo ou um máximo.

## 7.2 Várias variáveis dependentes

Como uma das generalizações do problema fundamental do cálculo das variações, consideremos a integral

$$J = \int_{x_1}^{x_2} \phi(y_1, y_2, \dots, y_n; y'_1, y'_2, \dots, y'_n; x) dx. \quad (7.11)$$

Como anteriormente, formamos a integral

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \left( \sum_{r=1}^n \frac{\partial \phi}{\partial y_r} \delta y_r + \sum_{r=1}^n \frac{\partial \phi}{\partial y'_r} \delta y'_r \right) dx = \sum_{r=1}^n \int_{x_1}^{x_2} \left( \delta y_r \frac{\partial \phi}{\partial y_r} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \phi}{\partial y'_r} \right) dx. \quad (7.12)$$

A exemplo de (7.6) efetuamos integrações por partes e usamos  $\delta y_r(x_1) = \delta y_r(x_2) = 0$  para obter a última igualdade, para qualquer  $1 \leq r \leq n$ . Pelo corolário enunciado anteriormente, vemos que

$$\frac{\partial \phi}{\partial y_r} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y'_r} \right) = 0 \quad \text{para} \quad 1 \leq r \leq n. \quad (7.13)$$

Como exemplo de (7.13) consideremos um sistema mecânico conservativo (holonômico) [38], com coordenadas generalizadas  $q_1, q_2, \dots, q_n$ . Neste caso,

$$J = \int_{t_1}^{t_2} L dt, \quad (7.14)$$

onde  $L = T - V$ , sendo  $T$  e  $V$  as energias cinética e potencial, respectivamente. Assim, as equações que regem a dinâmica do sistema são as equações de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial q_r} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \right) = 0 \quad \text{com} \quad 1 \leq r \leq n \quad \text{e} \quad \dot{q}_r = \frac{dq_r}{dt}. \quad (7.15)$$

No caso usual (coordenadas cartesianas não vinculadas e  $n = 3$ ), as equações (7.15) reduzem-se às equações de Newton da mecânica, pois  $T = \sum_{i=1}^3 \left( m_i \dot{x}_i^2 / 2 \right)$  e  $V = V(\mathbf{r}, \mathbf{t})$  geram as equações  $m_i \ddot{x}_i = -\partial V / \partial x_i$  com  $i = 1, 2$  e  $3$ .

### 7.3 Várias variáveis independentes

Outra generalização ocorre quando o integrando é uma função de várias variáveis independentes. O problema então é encontrar a função  $\Psi$ , que extremize a integral

$$J = \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \phi(\Psi, \Psi_x, \Psi_t; x, t) dx dt. \quad (7.16)$$

Neste funcional  $x$  e  $t$  são as variáveis independentes,  $\Psi = \Psi(x, t)$  é a variável dependente, e por definição  $\Psi_x = \partial \Psi / \partial x$ , etc.<sup>†</sup>. De acordo com a teoria exposta, exigimos que

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \delta \phi dx dt = 0 \quad (7.17)$$

Visto que  $\delta x = \delta t = 0$ , temos

$$\delta \phi = \frac{\partial \phi}{\partial \Psi} \delta \Psi + \frac{\partial \phi}{\partial \Psi_x} \delta \Psi_x + \frac{\partial \phi}{\partial \Psi_t} \delta \Psi_t. \quad (7.18)$$

Deste modo, a integral (7.17), contém duas integrais similares,

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \phi}{\partial \Psi} \delta \Psi dx dt + \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \phi}{\partial \Psi_x} \delta \Psi_x dx dt + \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \phi}{\partial \Psi_t} \delta \Psi_t dx dt, \quad (7.19)$$

o que nos leva a calcular apenas uma delas e utilizar o resultado para a outra. De fato, consideremos então a integral em relação à  $x$ ,

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \phi}{\partial \Psi_x} \delta \Psi_x dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \phi}{\partial \Psi_x} \frac{d}{dx} (\delta \Psi) dx = 0 - \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \Psi_x} \right) \delta \Psi dx. \quad (7.20)$$

<sup>†</sup>Aqui, por simplicidade de notação, estamos usando apenas duas variáveis independentes.

Aqui, como no caso de uma variável independente, foi empregado que  $\delta\Psi = 0$  na fronteira do problema variacional. Deste modo, a integral (7.19) torna-se

$$\delta J = \int_V \int_t \delta\Psi \left[ \frac{\partial\phi}{\partial\Psi} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_t} \right) \right] dxdt, \quad (7.21)$$

e a correspondente equação de Euler-Lagrange é

$$\frac{\partial\phi}{\partial\Psi} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_t} \right) = 0. \quad (7.22)$$

Evidentemente, se houverem mais variáveis independentes deverá(ão) ser acrescentado(s) à equação acima o(s) termo(s) correspondente(s). Por exemplo, se o conjunto de variáveis independentes é  $(x, y, z, t)$ , a equação de Euler-Lagrange é

$$\frac{\partial\phi}{\partial\Psi} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial\phi}{\partial\Psi_t} \right) = 0. \quad (7.23)$$

No caso de haverem mais variáveis dependentes, a equação acima torna-se um conjunto de equações, com uma equação para cada variável dependente e, obviamente, substituindo-se o  $\Psi$  pela variável apropriada na equação respectiva.

Como exemplo da generalização acima, apresentamos a extremização da integral

$$J = \int_V \int_t \Psi^* \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \right) \right] \Psi d^3\mathbf{r} dt, \quad (7.24)$$

com  $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$  e  $\Psi^* = \Psi^*(\mathbf{r}, t)$ .

Do cálculo vetorial,  $\int_V \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi) d^3\mathbf{r} = \int_V \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi d^3\mathbf{r} + \int_V \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3\mathbf{r}$  e  $\int_V \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi) d^3\mathbf{r} = \int_S (\Psi^* \nabla \Psi) \cdot d\mathbf{S}$ . Além disto, supondo que  $\Psi$  satisfaz à condição

$$\int_S (\Psi^* \nabla \Psi) \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (7.25)$$

chegamos à

$$J = \int_V \int_t \mathcal{L} d^3\mathbf{r} dt, \quad (7.26)$$

com  $\mathcal{L} = i\hbar \Psi^* (\partial\Psi/\partial t) - (\hbar^2/2m) \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi - \Psi^* V \Psi$ . Em particular, a condição (7.25) ocorre quando  $\Psi \rightarrow 0$  suficientemente rápido para  $|x| \rightarrow \infty$ ,  $|y| \rightarrow \infty$  e  $|z| \rightarrow \infty$ . Deste modo, usando as equações de Euler-Lagrange para  $\Psi$ , obtemos a equação de Schroedinger dependente do tempo para uma partícula de massa  $m$  e sujeita à energia potencial  $V$ ,

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi. \quad (7.27)$$

## 7.4 Problema isoperimétrico

O problema variacional mais simples do tipo isoperimétrico é o de encontrar valores estacionários de uma integral com limites fixos,

$$J = \int_{x_1}^{x_2} \phi(y, y'; x) dx, \quad (7.28)$$

sujeita a uma condição integral,

$$I = \int_{x_1}^{x_2} f(y, y'; x) dx = cte. \quad (7.29)$$

Para tal, formamos a integral

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \delta y \left[ \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y'} \right) \right] dx \quad (7.30)$$

com  $I = cte$ , o que implica, por sua vez,

$$\delta I = \int_{x_1}^{x_2} \delta y \left[ \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial f}{\partial y'} \right) \right] dx = 0. \quad (7.31)$$

Devemos tomar o cuidado, agora, de não mais considerar  $\delta y$  como arbitrário, posto que ele ocorre em duas integrais nulas, mas com integrandos diferentes. Neste caso, multiplicamos a equação (7.31) por  $\lambda$ , sendo  $\lambda$  um parâmetro a determinar, e subtraímos da equação (7.30). Isto conduz a

$$\delta(J - \lambda I) = \int_{x_1}^{x_2} \delta y \left[ \frac{\partial(\phi - \lambda f)}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial(\phi - \lambda f)}{\partial y'} \right) \right] dx. \quad (7.32)$$

Como desejamos que  $J - \lambda I$  seja estacionária, isto implica em  $\delta(J - \lambda I) = 0$ . Assim, escolhendo  $\lambda$  convenientemente e obtendo a equação de Euler-Lagrange para  $J - \lambda I$ , temos

$$\frac{\partial(\phi - \lambda f)}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial(\phi - \lambda f)}{\partial y'} \right) = 0. \quad (7.33)$$

A solução desta equação é  $y = y(x, \lambda)$  e da condição auxiliar poderemos determinar  $\lambda$ . O parâmetro  $\lambda$  é denominado multiplicador de Lagrange. Resultados análogos a (7.33) podem ser obtidos quando existem várias funções  $y$ , vários vínculos e várias variáveis independentes.

### 7.5 Equação de Schroedinger independente do tempo

Como ilustração do problema isoperimétrico, consideremos o problema de extremizar a integral

$$J = \int_V \psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi d^3\mathbf{r} = \int_V \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + V(\mathbf{r}) \psi^* \psi \right] d^3\mathbf{r}, \quad (7.34)$$

sujeita à condição

$$N = \int_V \psi^* \psi d^3\mathbf{r} = cte. \quad (7.35)$$

A última igualdade de (7.34) foi obtida seguindo as mesmas etapas que conduziram a (7.26).

De acordo com o que já vimos sobre extremizar integrais com vínculos, generalizada para várias variáveis independentes, formamos a integral

$$\delta(J - \lambda N) = \int_V \delta K d^3\mathbf{r}, \quad (7.36)$$

onde  $K = \phi - \lambda\psi\psi^*$  e  $\phi = (\hbar^2/2m)(\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi) + V(\mathbf{r})$ . Usando a expressão generalizada da equação de Euler-Lagrange (7.33), temos como consequência da condição de extremo que

$$\frac{\partial K}{\partial \psi^*} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial K}{\partial \psi_x^*} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial K}{\partial \psi_y^*} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial K}{\partial \psi_z^*} \right) = 0 \quad (7.37)$$

e expressão análoga para  $\Psi$ . Empregando a equação (7.37) e calculando as derivadas, assim como no caso da equação de Schroedinger dependente do tempo, obtemos a equação de Schroedinger independente do tempo,

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi, \quad (7.38)$$

onde  $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{r})$ . Assim, interpretamos  $\lambda$  como o autovalor de energia  $E$ , isto é,  $\hat{H}\psi = E\psi$ . As soluções desta equação são as funções  $\psi$  que tornam estacionária a integral  $J$  (7.34) sujeita à condição auxiliar (7.35).

A seguir vamos mostrar que, em vários casos de interesse, o extremo de (7.34) sujeita ao vínculo (7.35) conduz a um mínimo[39]. Seja  $\psi_n$  o  $n$ -ésimo autovetor ortonormalizado de  $\hat{H}$ . A partir daí, consideremos a expansão do vetor  $\psi$  em termos dos  $\psi_n$ ,

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n, \quad (7.39)$$

onde por causa da normalização de  $\psi$ , temos

$$\sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (7.40)$$

Além disto, o valor esperado de  $\hat{H}$  referente ao estado  $\psi$  é

$$\langle \hat{H} \rangle_{\Psi} = \int \psi^* \hat{H} \psi \, d^3 \mathbf{r} = \int \left( \sum_m a_m \psi_m \right)^* \hat{H} \left( \sum_n a_n \psi_n \right) d^3 \mathbf{r} = \sum_n |a_n|^2 E_n, \quad (7.41)$$

pois

$$\hat{H} \left( \sum_n a_n \psi_n \right) = \sum_n a_n \hat{H} \psi_n = \sum_n a_n E_n \psi_n \quad (7.42)$$

e

$$\int \psi_m^* \psi_n d^3 \mathbf{r} = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{se } m = n \\ 0 & \text{se } m \neq n \end{cases}. \quad (7.43)$$

Agora supomos que  $E_0$  é a energia mínima (estado fundamental), então  $E_n \geq E_0$  para qualquer  $n$ . Logo podemos escrever

$$\langle \hat{H} \rangle_{\Psi} \geq \sum_n |a_n|^2 E_0 = E_0. \quad (7.44)$$

Em palavras, a energia aproximada, calculada com a função  $\psi$ , fornece sempre o valor esperado de  $\hat{H}$  maior ou igual<sup>‡</sup> a  $E_0$ . De uma maneira geral, a presença de um funcional  $J$ , ( $\langle \hat{H} \rangle_{\psi}$  por exemplo) sugere um critério variacional baseado numa função teste dependente de parâmetros a ajustar. Neste caso, os parâmetros da função teste devem ser escolhidos de maneira a extremizarem  $J$ . Os resultados obtidos neste trabalho estão alicerçados sobre este procedimento.

---

<sup>‡</sup>  $\langle \hat{H} \rangle_{\psi} = E_0$  somente se  $\psi = \psi_0$ .

## Capítulo 8

### APÊNDICE A2: ENTROPIA DE TSALLIS

Neste apêndice, apresentaremos a generalização da função exponencial empregada no presente trabalho. Em tal apresentação resgataremos o caminho histórico de sua introdução, isto é, reveremos brevemente a generalização do peso estatístico de Boltzmann-Gibbs através da estatística de Tsallis.

#### 8.1 A distribuição de Boltzmann-Gibbs

Um dos métodos empregados no estudo da mecânica estatística de equilíbrio está baseado na adoção de uma forma entrópica  $S$  e de um conjunto de vínculos fisicamente apropriados. Além disto, é postulado que, em qualquer estado final de equilíbrio termodinâmico, a entropia deve ser máxima. Este postulado, intimamente ligado à estabilidade térmica da matéria, conduz a um princípio variacional, a partir do qual as probabilidades relativas aos diversos estados do sistema são obtidos.

Neste contexto, a entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon (B-G-S)[41],

$$S = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln(p_i), \quad (8.1)$$

ocupa um papel fundamental na mecânica estatística usual, onde  $\{p_i\}$  é o conjunto de probabilidades associadas aos  $W$  estados acessíveis ao sistema em estudo, e  $k$  representa a constante de Boltzmann. No *ensemble* canônico, para maximizarmos a entropia acima em relação ao conjunto  $\{p_i\}$ , usamos

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1, \quad (8.2)$$

que indica uma distribuição de probabilidades normalizada, e

$$\sum_{i=1}^W x_i p_i = \gamma, \quad (8.3)$$

representando o valor médio da grandeza física  $x$ . Utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange, construímos a função auxiliar\*

$$R_1(p_i) = - \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i + \lambda_1 \left( 1 - \sum_{i=1}^W p_i \right) + \lambda_2 \left( \gamma - \sum_{i=1}^W x_i p_i \right), \quad (8.4)$$

---

\*Sem perda de generalidade, aqui e nas discussões subsequentes, empregaremos  $k = 1$ .

onde  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são multiplicadores de Lagrange. A extremização desta função em relação a  $p_i$  nos permite escrever

$$\frac{\partial R_1(p_i)}{\partial p_j} = -\ln(p_j) - 1 - \lambda_1 - \lambda_2 x_j = 0, \quad (8.5)$$

que implica

$$p_i = C_1 \exp(-\lambda x_i), \quad (8.6)$$

com

$$C_1 = \frac{1}{\sum_{i=1}^W \exp(-\lambda x_i)} \quad \text{e} \quad \lambda = \lambda_2. \quad (8.7)$$

Ao identificarmos  $x_i$  com o valor particular da energia do  $i$ -ésimo microestado, denominado doravante por  $\epsilon_i$ ,  $\lambda$  com o valor  $\beta = 1/T$ , e  $T$  com a temperatura absoluta, obtemos o peso estatístico de Boltzmann-Gibbs. Deste modo, a probabilidade  $p_i$ , dada pela equação (8.6), assume a forma

$$p_i = \frac{1}{Z_1} \exp(-\beta \epsilon_i), \quad (8.8)$$

onde

$$Z_1 = \sum_{i=1}^W \exp(-\beta \epsilon_i) \quad (8.9)$$

é a função de partição do sistema. Neste contexto,  $\gamma$  representa a energia interna média do sistema macroscópico.

## 8.2 A distribuição de Tsallis

Podemos generalizar a equação (8.1) de tal forma que essa nova entropia possa exibir um carácter não extensivo. Para isto vamos considerar uma nova entropia proposta por Tsallis[26],

$$S_q = \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)^q}{q - 1} \quad (q \in R). \quad (8.10)$$

É interessante notar que esta entropia tem como caso particular a entropia usual (8.1). De fato, verifica-se facilmente que  $S_q$  reduz-se à entropia de B-G-S no limite  $q \rightarrow 1$ , pois

$$S_1 = \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i (p_i)^{q-1}}{q - 1} = \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i \exp((q-1) \ln(p_i))}{q - 1} \quad (8.11)$$

e, expandindo a exponencial em série de potências em  $(q - 1)$ , podemos concluir que

$$S_1 = \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i [1 + (q - 1) \ln(p_i) + \dots]}{q - 1} = - \sum_{i=1}^W p_i \ln(p_i). \quad (8.12)$$

Vamos maximizar a expressão dada pela equação (8.10) mantendo o vínculo (8.2) inalterado, porém modificando o vínculo (8.3) para[42]<sup>†</sup>

$$\gamma_q = \sum_{i=1}^W x_i (p_i)^q. \quad (8.13)$$

De modo análogo ao procedimento empregado para a entropia B-G-S, temos

$$R_q(p_i) = \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)^q}{q - 1} + \lambda_1 \left( \alpha - \sum_{i=1}^W p_i \right) + \lambda_2 \left( \gamma_q - \sum_{i=1}^W x_i (p_i)^q \right) \quad (8.14)$$

e

$$\frac{\partial R_q(p_i)}{\partial p_j} = -\frac{qp_j^{q-1}}{q-1} - \lambda_1 - \lambda_2 x_j qp_j^{q-1} = 0, \quad (8.15)$$

conduzindo a

$$p_i = C_q [1 - (1 - q) \lambda x_i]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (8.16)$$

Nesta expressão,  $C_q = [\lambda_1 (1 - q) / q]^{1/(1-q)}$  e  $\lambda = \lambda_2$ . Levando em conta o vínculo (8.2), obtemos

$$C_q = \frac{1}{\sum_{i=1}^W [1 - (1 - q) \lambda x_i]^{\frac{1}{1-q}}}. \quad (8.17)$$

De forma similar à seção anterior, identificando  $x_i$  com  $\epsilon_i$  e  $\lambda$  com  $\beta = 1/T$ , chegamos a

$$p_i = \frac{1}{Z_q} [1 - (1 - q) \beta \epsilon_i]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (8.18)$$

que representa a distribuição de probabilidades generalizada para o *ensemble* canônico, com

$$Z_q = \sum_{i=1}^W [1 - (1 - q) \beta \epsilon_i]^{\frac{1}{1-q}} \quad (8.19)$$

---

<sup>†</sup>Uma discussão detalhada sobre a escolha dos vínculos é feita na referência [43].

representando a generalização da função de partição. Podemos notar que  $\gamma_q = U_q$  ainda é a energia interna do sistema (generalizada). Uma discussão abrangente sobre a estatística generalizada de Tsallis e suas aplicações pode ser encontrada na referência [44].

A distribuição (8.18) apresenta propriedades interessantes, tais como:

i) Recupera a distribuição de Boltzmann-Gibbs no limite  $q \rightarrow 1$  ( $p_i \propto \exp(-\beta\epsilon_i)$ ), pois a função exponencial pode ser definida através do limite

$$e^x = \exp(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{\alpha}x\right)^\alpha. \quad (8.20)$$

Neste caso, obviamente, estamos considerando  $\alpha = 1/(1 - q)$ , assim  $\alpha \rightarrow \infty$  é equivalente a  $q \rightarrow 1$ . Esta propriedade nos permite generalizar a função exponencial da seguinte forma

$$e_q^x \equiv \exp_q(x) \equiv [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}. \quad (8.21)$$

Esta função, exponencial- $q$  ou exponencial generalizada, é *um objeto de suma importância no trabalho* descrito nesta monografia, pois a partir dela generalizamos a Gaussiana.

ii) Para  $q > 1$  a dependência da distribuição de probabilidades com a energia obedece à uma lei de potência simples para  $\beta\epsilon_i \gg 1/(1 - q)$ , em vez da lei exponencial ( $q \rightarrow 1$ ).

iii) Para  $q < 1$  a distribuição de probabilidades deve apresentar um corte para  $\epsilon_i$  suficientemente grande, isto é, quando  $1 - (1 - q)\beta\epsilon_i < 0$ . Se isto não ocorrer, surge  $p_i$  imaginário para  $\beta\epsilon_i$  suficientemente grande, comportamento incompatível para uma probabilidade.

Estes possíveis comportamentos relativos à exponencial generalizada (8.21), incluindo o corte, estão ilustrados na figura (8.1).

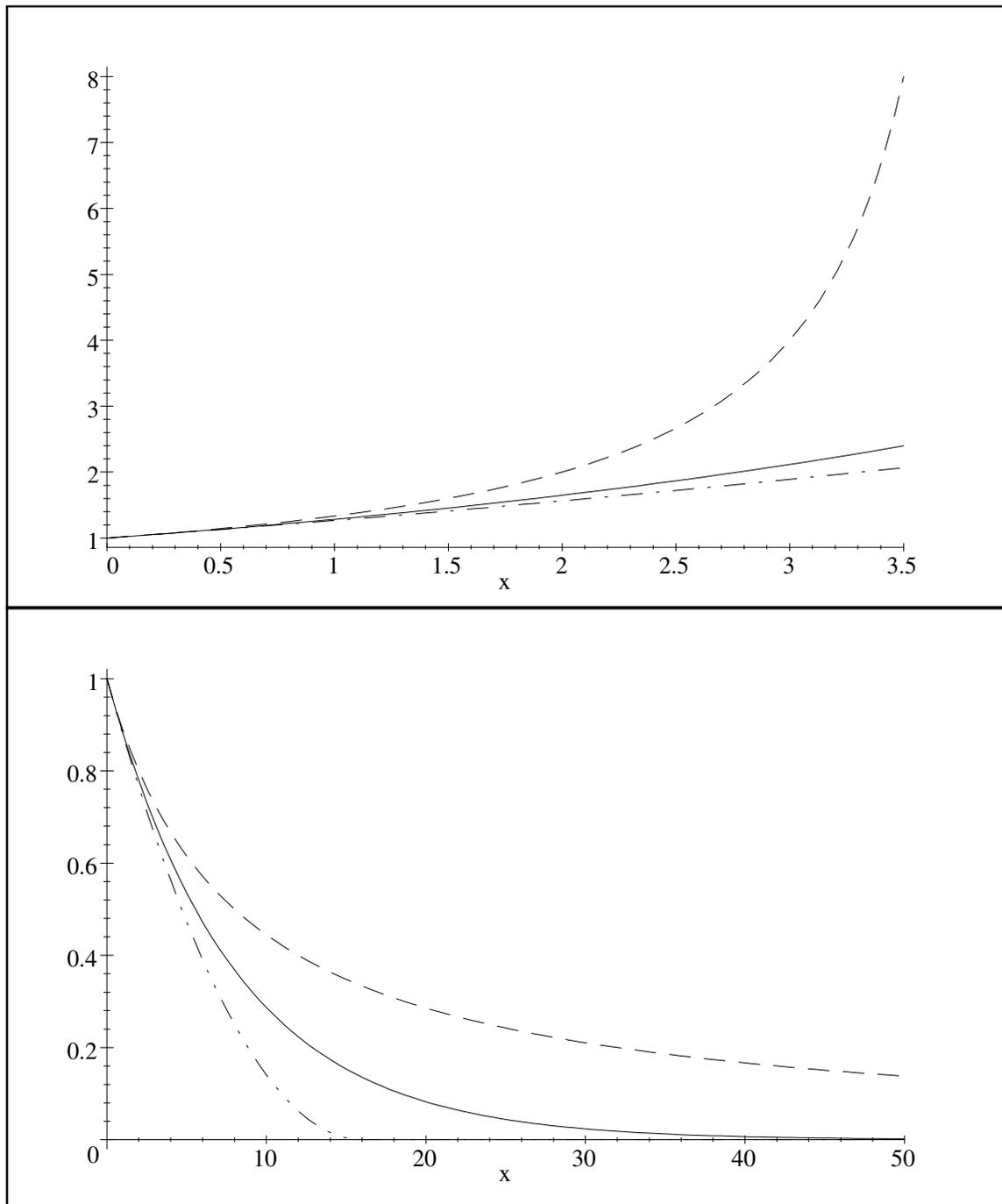


Figura 8.1 - Gráficos da função exponencial- $q$ , ou exponencial generalizada, para alguns valores de  $q$ . A linha tracejada é o gráfico para  $q = 2$ , a linha sólida para  $q = 1$  e a linha ponto-ponto-traço é o gráfico para  $q = 1/2$  ( $e_q^x$  no gráfico superior e  $e_q^{-x}$  no gráfico inferior).

## Referências bibliográficas.

1. <http://jilawww.colorado.edu/www/press/bose-ein.html>
2. M. H. Anderson, J. R. Ensher, M.R. Mathews, C. E. Wieman and E. A. Cornell, *Science* *269*, 198 (1995).
3. S. N. Bose, *Z. Phys.* *26*, 178.
4. A. Einstein, *Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.*, pg. 261, (1924); e pg. 3, (1925).
5. K. B. Davis, M. -O Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn e W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* *75*, 3969 (1995).
6. C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollet e R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* *75*, 1687 (1995).
7. C. C. Bradley, C. A. Sackett e R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* *78*, 985 (1997).
8. D. J. Han, R. H. Wynar, Ph. Courteille e D. J. Heinzen, *Phys. Rev. A* *57*, 4114 (1998).
9. U. Ernst, A. Mate, F. Schreck, J. Schuster e G. Rempe, *Europhys. Lett.* *41*, 1 (1998).
10. L. V. Hau, B. D. Husch, C. Liu, Z. Dutton, M. M. Burns e J. A. Golovchenko, *Phys. Rev. A* *58*, 54, (1998).
11. A. Griffin, *A Brief History of Our Understanding of BEC: From Bose to Beliaev.*, cond-mat/9901123.
12. S. Chu, *Rev. Mod. Phys.* *70*, 685 (1998).
13. C. N. Cohen-Tannoudji, *Rev. Mod. Phys.* *70*, 707 (1998).
14. W. D. Phillips, *Rev. Mod. Phys.* *70*, 721 (1998).
15. M. Randeria em, *Bose-Einstein Condensation*, ed. by A. Griffin, D. W. Snoke and S. Stringari (Cambridge University Press, N. Y. 1995). Este livro contém artigos de revisão sobre condensados de Bose-Einstein em vários sistemas, e a sua publicação é imediatamente anterior ao anúncio do primeiro CBE em gases atômicos esfriados à laser em 1995.
16. L. P. Pitaevskii, *Sov. Phys. JETP* *13*, 451 (1961); E. P. Gross, *Nuovo Cimento* *20*, 454 (1961); *J. Math. Phys.* *4*, 195 (1963).
17. E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics*, 2nd. ed. reprinted (with corrections), (Pergamon press Ltd., Oxford, 1981).
18. M. Edwards e K. Burnett, *Phys. Rev. A* *51*, 1382 (1995).
19. P. A. Ruprecht, M. J. Holland, K. Burnett e M. Edwards, *Phys. Rev. A* *51*, 4704 (1995).
20. M. Edwards, R. J. Dodd, C. W. Clark, C. J. Williams, P. A. Ruprecht e K. Burnett, *Phys. Rev. A* *53*, R1950 (1996).
21. F. Dalfovo e S. Stringari, *Phys. Rev. A* *53*, 4704 (1996).
22. R. J. Dodd, M. Edwards, C. W. Clark, C.J. Williams, P. A. Ruprecht e K. Burnett, *Phys. Rev. A* *54*, 661 (1996).
23. G. Baym e C. J. Pethick, *Phys. Rev. Lett.* *76*, 6 (1996).
24. D. M. Stamper-Kurn, H. -J. Miesner, S. Inouye, M. R. Andrews e W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* *81*, 510 (1998).
25. A. L. Fetter, *J. Low Temp. Phys.* *106*, 643 (1997).

26. C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* *52*, 479 (1998).
27. S. Wolfram, *The Mathematica Book*, 4th ed. (Wolfram Media/Cambridge University Press, 1999).
28. V. S. Bagnato, D. E. Pritchard e D. Klepner, *Phs. Rev. Lett.* *58*, 2194 (1987)
29. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 2nd edition (John Wiley and Sons, Inc.).
30. J. T. M. Walraven, *In: G. -L. Oppo, S. M. Barnett, E. Riis, M. Wilkinson, (Editores), Quantum Dynamics of Simple Systems, Institute of Physics, Bristol (1996).*
31. BEC Homepage: <http://amo.phy.gasou.edu/bec.html>. Este sítio na Internet tem um amplo material sobre a pesquisa do CBE.
32. F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, e S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* *71*, 463 (1999).
33. *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*, Proceedings of International School of Physics “Enrico Fermi”, ed. by M. I. Inguscio, S. Stringari and C. E. Wieman (IOS Press, Amsterdam, 1999).
34. Ver artigo de revisão na ref. [15].
35. *Physycs Today*, pg. 17, October, 1998.
36. I. S. Gradshteyn e I. Ryzhik, *Table of Integral, Series and Products*, (Academic Press, 1989).
37. L. Elsgoltz, *Ecuaciones Diferenciales y cálculo variacional*, (Editorial Mir, Moscu, 1969).
38. H. Goldstein, *Classical Mechanics* , (Mass.: Addison-Wesley, 1950).
39. G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, 3d. edition (W. A. Benjamin Inc., 1974).
40. K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd ed (Wiley, New York, 1987).
41. A. Katz, *Principles of Statistical Mechanics : the information theory approach*, (W. H. Freeman and Co. ,San Francisco, 1967).
42. E. M. F. Curado e C. Tsallis, *J. Phys. A* *24*, L69 (1991); Errata: **24**, 3187 (1991); **25**, 1019 (1992).
43. C. Tsallis, R. S. Mendes e A. R. Plastino, *Physica A* *261*, 534 (1998).
44. *Braz. J. Phys.* *29*, *1*, Fascículo especial: Nonextensive Statistical Mechanics and Thermodynamics, editores S. A. R. Salinas e C. Tsallis (1999).