

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Pedro de Castro Diniz

**Estado fundamental e modos coletivos de um
condensado de Bose-Einstein dipolar aprisionado em uma
casca esférica**

São Carlos

2020

Pedro de Castro Diniz

**Estado fundamental e modos coletivos de um
condensado de Bose-Einstein dipolar aprisionado em uma
casca esférica**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica

Orientador: Prof. Dr. Emanuel Alves de Lima
Henn

Versão corrigida
(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2020

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES TRABALHOS, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Diniz, Pedro de Castro

Estado fundamental e modos coletivos de um condensado de Bose-Einstein aprisionado em uma casca esférica / Pedro de Castro Diniz; orientador Emanuel Alves de Lima Henn - versão corrigida -- São Carlos, 2020.

87 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2020.

1. Física atômica . 2. Condensado de Bose-Einstein. 3. Interação Dipolar. 4. Armadilha tipo bolha. I. Henn, Emanuel Alves de Lima, orient. II. Título.

AGRADECIMENTOS

Obrigado Emanuel, Aristeu e Eduardo pela imensa ajuda e direcionamento.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) Código de financiamento 001.

Agradeço também as agências de fomento CNPq e FAPESP.

RESUMO

DINIZ, P. **Estado fundamental e modos coletivos de um condensado de Bose-Einstein dipolar aprisionado em uma casca esférica.** 2020. 87p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

Consideramos o estado fundamental e as excitações coletivas de um condensado de Bose-Einstein dipolar numa armadilha tipo bolha, isto é, um potencial de confinamento esféricamente simétrico em forma de casca. Por meio de um ansatz gaussiano para a parte radial da função de onda e uma expansão em harmônicos esféricos para a parte angular, fomos capazes de obter expressões analíticas para a energia total do sistema, que foram minimizadas em relação aos parâmetros variacionais. Determinamos as propriedades do estado fundamental no caso em que as partículas interagem por interação de contato isotrópica de curto alcance e também por interações dipolares anisotrópicas de longo alcance no limite de casca fina, demonstrando a existência de perfis de densidade anisotrópicos em regimes fortemente dipolares. Ademais, com o estado fundamental em mãos, empregamos a abordagem de *Sum Rules* para estudar os modos de monopolo, quadrupolo bidimensional, tridimensional e dipolo. Encontramos desvios significativos em relação aos casos não dipolares, identificando assim traços úteis para a detecção experimental das propriedades de excitação do sistema e da interação de dipolo-dipolo.

Palavras-chave: Física atômica. Condensado de Bose-Einstein. Interação dipolar. Armadilha tipo bolha.

ABSTRACT

DINIZ, P. **Ground state and collective modes of a dipolar Bose-Einstein condensate trapped in a spherical shell.** 2020. 87p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

We consider the ground state and collective excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap, i.e., a potential for spherically symmetric shell-shaped confinement. By means of a gaussian ansatz for the radial part of the wave function and an expansion in spherical harmonics for the angular part, we were able to obtain analytical expressions for the total energy of the system, which were minimized in relation to the variational parameters. We determined the properties of the ground state in the case where particles interact by short range isotropic contact interaction and also by long range anisotropic dipolar interactions at the thin shell limit, demonstrating the existence of anisotropic density profiles in strongly dipolar regimes. In addition, with the ground state at hand, we employ the *Sum Rules* approach in order to study the monopole, two-dimensional, three-dimensional quadrupole and dipole modes. We found significant deviations from non-dipolar cases, thus identifying useful features for the experimental detection of the excitation properties of the system and the dipole-dipole interaction.

Keywords: Atomic physics. Bose-Einstein condensate. Dipolar interactions. Bubble Trap.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Átomos se concentrando no fundo da armadilha para diferentes valores de gravidade	15
Figura 2 – Interação entre dois dipolos	24
Figura 3 – Representação do <i>bubble</i> com os dipolos alinhados na direção z	45
Figura 4 – Energia como função de L_{max}	47
Figura 5 – Distribuição angular da densidade para diversos valores de ϵ_{dd}	48
Figura 6 – Átomos se concentrando em torno do equador devido à interação de dipolo-dipolo	49
Figura 7 – Representação esquemática do nosso toy model	50
Figura 8 – Comparando os resultados do <i>toy model</i> com o <i>bubble</i> dipolar	53
Figura 9 – Frequências dos modos de quadrupolo e do modo de monopolo	65
Figura 10 – Frequências dos modos de dipolo	67
Figura 11 – Oscilações do centro de massa são afetadas pela geometria do sistema	68

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	TEORIA BÁSICA	19
2.1	Gases de Bose Ideais	19
2.2	Gases Bosônicos Inomogêneos	21
2.3	Interações	22
3	ESTADO FUNDAMENTAL	27
3.1	<i>Bubble Ansatz</i>	27
3.2	Energia de Confinamento	29
3.3	Energia Cinética	30
3.4	Energia de contato	33
3.5	Energia de interação dipolar	35
3.6	Cálculo de $V(k)$	35
3.7	Cálculo de $n(k)$	37
3.8	Cálculo de E_{dd}	38
4	RESULTADOS: ESTADO FUNDAMENTAL	45
4.1	Simetrias	46
4.2	Critério de truncamento do ansatz	46
4.3	Distribuição Angular	47
4.4	Toy Model	49
5	MODOS COLETIVOS	55
5.1	Descrição do Método	55
5.2	Modo de Monopolo	56
5.3	Modo de Dipolo	59
5.4	Operador de Quadrupolo 2D ($ m = 2$)	61
5.5	Modo de Quadrupolo 3D ($m=0$)	63
6	RESULTADOS: FREQUÊNCIAS DOS MODOS COLETIVOS	65
6.1	Modos de quadrupolo	65
6.2	Modos de dipolo	67
7	CONCLUSÃO	71
	REFERÊNCIAS	73

APÊNDICE A – SÍMBOLOS 3-J DE WIGNER	77
APÊNDICE B – INTEGRAIS ENVOLVENDO DERIVADAS DA δ .	79
APÊNDICE C – MOTIVAÇÃO E TRANSFORMADA DE FOURIER	81
APÊNDICE D – APLICAÇÃO A TERMOS DERIVADOS EM PRIMEIRA ORDEM	83
APÊNDICE E – APLICAÇÃO A TERMOS DERIVADOS EM SEGUNDA ORDEM	85
APÊNDICE F – RESULTADO	87

1 INTRODUÇÃO

O fenômeno de condensação de Bose-Einstein tem se mostrado uma área rica de crescente interesse. Desde sua proposição, feita em 1925 por Albert Einstein baseado em trabalhos anteriores de Satyendra Nath Bose,¹ até sua primeira realização experimental em 1995,^{2,3} o conceito de condensados de Bose-Einstein (abreviados como *BEC* em inglês) teve um papel valioso no desenvolvimento da física moderna. Dentre os numerosos avanços feitos ao longo dos anos, podemos citar as observações de redes de vórtices,⁴ a transição de fase quântica Mott-superfluido em redes óticas,⁵ a transição BCS-BEC,⁶ o colapso Bose-nova⁷ e, mais recentemente, a observação de um supersólido em gases dipolares.⁸⁻¹⁰ Para mais, tratamentos que consideram interações mais gerais que as de campo médio possibilitaram a investigação da influência que flutuações quânticas exercem no estado fundamental e excitações coletivas de BECs dipolares,¹¹⁻¹³ assim como revelaram o caráter auto-ligado¹⁴ das soluções de *droplets*.

De um ponto de vista prático, dispomos hoje de técnicas que nos permitem manipular gases quânticos de diversas formas. Dentre estas, começarei citando o aspecto geométrico de BECs, que pode ser modificado por meio de técnicas de aprisionamento com grande liberdade. Conceitualmente, é simples notar que a escolha de uma armadilha determina o formato da nuvem atômica. O caso em que isso se mostra de forma mais evidente é no regime de Thomas-Fermi, situação na qual a energia cinética dos átomos pode ser desprezada quando comparada com a energia de confinamento. É bem sabido que, neste limite, a função de onda do condensado herda a dependência espacial do potencial da armadilha.¹⁵

Como um primeiro exemplo da importância da exploração de aspectos geométricos em BECs podemos citar um assunto de atual interesse na comunidade que é o estudo da influência que topologia exerce nas propriedades da matéria.^{16,17} Dada sua grande versatilidade, condensados possuem neste contexto a vantagem de que sua topologia pode ser alterada meramente via deformações geométricas ao passo que em outros sistemas estas transições topológicas frequentemente realizam-se em espaços de natureza mais abstrata.^{18,19}

Outro fator do qual temos grande controle e que também exerce um papel na propriedades geométricas de BECs são as interações interatômicas. O primeiro passo natural ao se dar quando consideramos gases de Bose não ideais é a inclusão da interação de contato, que nada mais é que a parte de curto alcance da interação de Van-der-Walls. Em virtude de sua natureza, por meio de teoria de espalhamento é possível mostrar que o parâmetro mais relevante na descrição deste tipo de sistema quântico é o comprimento de espalhamento de ondas-s, costumeiramente denotado por a_s . De uma perspectiva

experimental, somos capazes de manipular este parâmetro fazendo uso de *Ressonância de Feshbach*.^{20,21} Fundamental no estudo de BECs, por meio da aplicação de campos magnéticos uniformes na nuvem atômica esta técnica nos permite alterar a magnitude da interação de contato, alternar entre caracteres repulsivos e atrativos e até "desligar" a interação.

Por uma outra perspectiva, em gases polarizados de espécies atômicas de altos valores de momento de dipolo como Érbio, Cromo ou Disprósio a interação de dipolo-dipolo exerce importante influência. Diferentemente das interações usuais de curto alcance, a interação dipolar é de longo alcance e portanto exerce um efeito global no condensado. Disto e de sua anisotropia segue que gases dipolares aprisionados em armadilhas isotrópicas em geral tendem a assumir um formato anisotrópico. Por exemplo, sabe-se que gases dipolares harmonicamente aprisionados tem a tendência de se alongar na direção de polarização.²²

Estas características dos gases dipolares se mostram ainda mais interessantes quando combinados com o controle que temos sobre as forças de contato *via* ressonâncias de Feshbach. Visto que para um determinado valor de campo magnético as interações de contato são "desligadas", o condensado é dominado pela interação dipolar. Um outro ponto é que condensados não dipolares tornam-se instáveis para valores negativos de comprimento de espalhamento, o que faz com que estes colapsem, produzindo assim o fenômeno de Bosenova.²³ Já condensados dipolares, por terem essa tendência de se alongar na direção de polarização, quando aprisionados em armadilhas tipo "panqueca" ainda apresentam estabilidade para $a_s < 0$, possibilitando o estudo de condensados neste tipo de regime de interações de curto alcance atrativas.

Uma conclusão que podemos tirar disso tudo é que a investigação de geometrias não convencionais é particularmente interessante no caso de gases polarizados. Da anisotropia da interação dipolar associada com as inúmeras possibilidades de armadilhamento, uma vastidão de fenômenos fascinantes emergem. Apesar dessa versatilidade a realidade é que esse tipo de pesquisa é relativamente recente de modo que um amplo relevo de problemas analiticamente simples ainda está para ser explorado.

Neste trabalho focaremos nossa atenção a um tipo exótico de armadilha, a armadilha tipo bolha ou, em inglês, *bubble trap*. Como o nome sugere, esta é uma armadilha que restringe os átomos a uma região espacial no formato de casca esférica. Veja que, nessa geometria a densidade da nuvem atômica é nula no centro distinguindo-a, no que tange à topologia, de condensados cuja geometria é aquela da esfera cheia, produto de armadilhas harmônicas. Visto que cascas de condensado são esperadas em misturas de Bose-Fermi²⁴⁻²⁶ e redes ópticas²⁷⁻²⁹ esta é uma geometria que vem ganhando crescente interesse no decorrer dos últimos anos.

A pouco tempo foi conduzida uma tentativa de produzir um condensado em forma de bolha por meio uma técnica de aprisionamento que efetua uma deformação adiabática

de uma armadilha magnética por meio de emissões de radio-frequência.^{30–32} Concluiu-se, de acordo com as previsões teóricas, que tal geometria não é alcançável em experimentos realizados na Terra em virtude da ausência de mecanismos que compensem a força gravitacional, que leva os átomos a se concentrarem no "fundo" da região esférica.

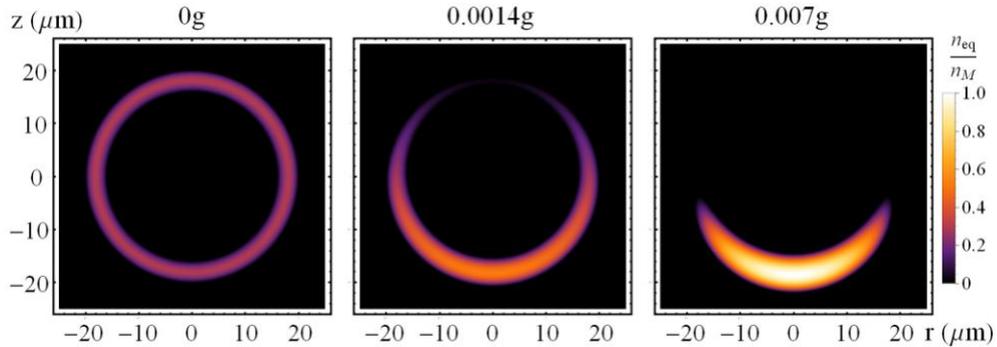


Figura 1 – Átomos se concentrando no fundo da armadilha para diferentes valores de gravidade

Fonte: SUN; PDAVIC; YANG; VISHVESHWARA; LANNERT.³³

Apesar desta complicação, um grande avanço experimental foi dado recentemente: foi enviado um laboratório de átomos frios para a Estação Espacial Internacional, assim expandindo certos limites inerentes a experimentos realizados na Terra. Dentre um vasto conjunto de experimentos planejados para ambientes de micro-gravidade está a realização do *bubble*. A disponibilidade de tal ambiente desencadeou uma série de esforços teóricos com o intuito de desvendar as dinâmicas de expansão e modos coletivos deste sistema.^{33–35}

Foi apontado que a transição topológica na qual o condensado torna-se oco evidencia-se na forma de uma clara assinatura em diversas frequências de modos coletivos.³³ Isto ocorre pois na situação em que o condensado passa a ser oco, e portanto adquire uma superfície de contorno adicional, as frequências de excitação são redistribuídas entre as duas superfícies externa e interna. Tal descoberta proporciona uma estratégia sólida para a detecção experimental da mudança topológica, visto que técnicas padrão de imageamento não seriam capazes de detectar uma região oca.

Neste mesmo trabalho foi feita uma investigação teórica acerca das mudanças no estado fundamental e modos coletivos da nuvem atômica sujeita a uma transição geométrica contínua de uma esfera cheia para uma superfície esférica aproximadamente bidimensional. Foi demonstrado que de acordo com que a casca vai ficando mais fina, modos coletivos angulares de baixa frequência manifestam-se. Notavelmente, estes modos tanto não ocorrem em armadilhas cheias como voltam a desaparecer quando o condensado se torna bidimensional, sendo este um traço exclusivo do regime em que a casca tem

espessura finita. Vale notar que apesar de ser bem sabido que condensação de Bose-Einstein não ocorre em sistemas bidimensionais planos³⁶ foi demonstrado teoricamente que sistemas 2D curvos não só podem apresentar temperaturas críticas finitas positivas³⁷ como que no limite bidimensional a temperatura crítica é de fato superior à da casca fina.³⁸

Nota-se que estes trabalhos que miram num entendimento mais profundo de condensados em forma de casca compartilham um importante traço: os átomos interagem somente via interação de contato, que é isotrópica e de curto alcance. A investigação de BECs que apresentam interações anisotrópicas de dipolo-dipolo aprisionados em cascas esféricamente simétricas não só é uma extensão natural de tal problema como nos apresenta características únicas: ao mesmo tempo que o armadilhamento é aproximadamente bidimensional, a interação de dipolo-dipolo tem caráter tridimensional. Além disso, por esta se tratar de uma interação de longo alcance e, portanto, global, de sua anisotropia segue que a simetria esférica do sistema é quebrada. O estado fundamental e os parâmetros de estabilidade de tal configuração foram investigados numericamente³⁹ para um conjunto muito específico de parâmetros de aprisionamento em um contexto mais geral que focou-se em anéis e vórtices.

Nesta dissertação investigamos o estado fundamental e os modos coletivos mais importantes de BECs em formato de casca com interações dipolares anisotrópicas e de longo alcance no limite de casca fina em uma armadilha *bubble* forte sem a presença de gravidade. Escolhemos nos focar neste limite pois este evidencia as consequências particulares trazidas pelo efeito recíproco entre a *bubble trap* e a interação de dipolo-dipolo.

Esta dissertação se organiza da seguinte maneira: o segundo capítulo consiste numa breve revisão de conceitos básicos como o fenômeno de condensação, o método variacional e as interações que serão utilizadas. No terceiro capítulo estabelecemos o nosso ansatz e calculamos detalhadamente a energia total do sistema. No quarto capítulo mostramos os resultados do procedimento de minimização da energia e obtenção do estado fundamental para diversos regimes de interação dipolar. No quinto capítulo fazemos uma breve revisão do método de *Sum Rules* e, por meio deste, calculamos a frequência dos modos coletivos mais importantes. No sexto capítulo exibimos os resultados para as frequências dos modos coletivos calculados também para diferentes regimes de interação dipolar.

Como um resumo dos resultados obtidos, mostramos que o estado fundamental exhibe simetria azimutal e que para regimes fortemente dipolares os átomos tendem a se concentrar na região equatorial. Notamos também que, devido à natureza da interação de dipolo-dipolo, a espessura da distribuição angular satura-se a partir de um certo valor de interação dipolar, comportamento que foi confirmado por meio de um modelo simplificado de geometria plana. No que diz respeito aos modos coletivos, observamos grandes desvios em relação aos casos não dipolares, obtendo assim importantes evidências úteis na detecção experimental das propriedades de excitação do sistema. Ademais, nossos

resultados numéricos mostraram boa concordância com os resultados obtidos por meio da abordagem hidrodinâmica para regimes não dipolares.³³

2 TEORIA BÁSICA

2.1 Gases de Bose Ideais

Considere um sistema homogêneo de N partículas bosônicas e volume V . Seja $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ o operador destruição de partícula na posição \mathbf{r} satisfazendo as relações de comutação de bósons. Este operador, denominado operador de campo, desempenha o mesmo papel da função de onda em teoria de primeira quantização e, portanto, quando considerado juntamente com as relações de comutação apropriadas constitui todo o ferramentário necessário na descrição de um sistema quântico arbitrário. Em sistemas de muitas partículas, no entanto, é mais conveniente a utilização de um objeto mais sofisticado construído a partir de $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$, a *matriz densidade de uma partícula*. Sua definição é

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \rangle$$

sendo que todas as partículas do sistema devem ser levadas em conta no cálculo da média e, por isto, o produto final deste processo mimetiza um objeto de uma única partícula. Fundamentando-nos neste novo operador somos tanto capazes de estabelecer uma definição precisa da noção de condensação de Bose-Einstein como também da obtenção de relações que iluminam algumas consequências deste fenômeno e como exatamente este equivale a conceitos como função de onda macroscópica e estados coerentes da matéria. Primeiramente notemos que no limite termodinâmico, por argumentos de simetria de translação temos que, em geral, os valores da matriz densidade dependem somente da separação $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Segue deste fato e do teorema de Fourier a seguinte identidade

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n^{(1)}(\mathbf{s}) = \frac{1}{V} \int d^3p \, n(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}}$$

onde $n(\mathbf{p})$ representa a distribuição de momentos do sistema. Podemos agora nos restringir a condições de particular interesse.

É crucial termos em mente que no contexto de BEC o termo condensação não implica, como o nome pode erroneamente sugerir, que estamos necessariamente nos referindo a sistemas que possuem altos valores de densidade de matéria. Pelo contrário, a realidade é que BECs frequentemente são realizados em gases extremamente rarefeitos. O real significado de condensação é o de que um número macroscópico das partículas constituintes do sistema ocupam o mesmo estado quântico, isto é, se "condensam" neste estado. Assim, é evidente que tal fenômeno só ocorre em sistemas bosônicos em virtude do princípio de exclusão de Pauli.

Vejamos agora como o fenômeno de condensação de reflete na matriz densidade. Primeiramente, notemos que a ocupação macroscópica de um estado quântico pode ser

facilmente descrita pela seguinte distribuição de momentos

$$n(\mathbf{p}) = N_0\delta(\mathbf{p}) + f(\mathbf{p})$$

onde $N_0 \gg 1$ é o número de ocupação do estado fundamental e $f(\mathbf{p})$ pode ser considerada sem perda de generalidade como sendo uma função suave. Nessas condições é simples notar que o valor da matriz densidade tende a uma constante ao considerarmos coordenadas espaciais arbitrariamente distantes, isto é

$$s \rightarrow \infty \Rightarrow n^{(1)}(s) \rightarrow N_0/V = n_0.$$

A este fenômeno é dado o nome de *ordem de longo alcance fora da diagonal* ou, ODLRO, do inglês *off-diagonal long-range order*. Uma vez que para um sistema infinito ODLRO ocorre se e somente se houver ocupação macroscópica, como é simples de se verificar, segue que estes conceitos são equivalentes.

Mostraremos agora que condensados são estados coerentes. Seja \hat{H} o hamiltoniano do sistema, ψ_i seus autoestados e \hat{a}_i os operadores de criação de uma partícula no autoestado de índice i . O operador de campo pode ser escrito

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{r})\hat{a}_i = \psi_0(\mathbf{r})\hat{a}_0 + \sum_{i \neq 0} \psi_i(\mathbf{r})\hat{a}_i.$$

Note que, uma vez que a grande maioria dos átomos se encontra no estado fundamental é razoável desprezarmos a parte do operador de campo que não corresponde ao condensado, que equivale à aproximação

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) \approx \psi_0(\mathbf{r})\hat{a}_0.$$

Como estamos tratando de um sistema de muitas partículas temos que $N_0 \gg 1$ e, portanto, $N_0 + 1 \approx N_0$. Disto e das propriedades conhecidas dos operadores \hat{a}, \hat{a}^\dagger segue que

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r})|\Psi\rangle \approx \Psi_0(\mathbf{r})|\Psi\rangle$$

onde $\Psi_0 = \sqrt{N_0}\psi_0$. Note que a expressão acima nada mais é que a definição de um estado coerente, mostrando assim que condensados são estados coerentes. Ao autovalor Ψ_0 do operador de campo daremos o nome de *parâmetro de ordem* ou *função de onda do condensado*. Para um condensado de Bose-Einstein ideal homogêneo, é simples obtermos a forma explícita para a função de onda. Fazendo uso do conceito de estado coerente, podemos escrever a matriz densidade como

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Psi_0^*(\mathbf{r}')\Psi_0(\mathbf{r}).$$

Do fato de que o sistema deve exibir ODLRO segue que a função de onda do condensado tem a forma

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0}e^{i\gamma} : \gamma \in \mathbb{R}$$

Veja que este resultado possui uma peculiaridade: a fase γ , apesar de arbitrária, tem um valor definido. Esta é uma característica marcante de estados coerentes, e decorre diretamente do fato de que o número de partículas do sistema é mal definido. Com efeito, é possível demonstrar formalmente que existe um princípio de incerteza envolvendo o número de partículas de um sistema e sua fase complexa.⁴⁰

Assim, vemos que o cálculo da função de onda de um BEC ideal homogêneo é simples. Na próxima seção apresentaremos um método que nos permite obter a função de onda de condensados mais realistas.

2.2 Gases Bosônicos Inhomogêneos

O motivo pelo qual a discussão de BECs não homogêneos é importante é a de que estes são realizados experimentalmente por meio de armadilhas e, conseqüentemente, possuem dependência espacial não trivial. Além disso, precisamos de um tratamento que inclua os efeitos das interações entre os átomos. Num sistema como este, encontrar a função de onda do condensado não é descomplicado como no caso de um gás homogêneo. Mas podemos fazer uso do conceito de estado coerente para derivar de maneira simples um método que nos permite encontrar o parâmetro de ordem. A este procedimento é dado o nome de *método variacional*.

Sabe-se que o hamiltoniano de um sistema quântico geral pode ser escrito em termos dos operadores criação e aniquilação da seguinte forma

$$\hat{H} = \int_{R^3} d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{trap} \right) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int_{R^3} d^3r d^3r' V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}')$$

onde V_{trap} corresponde ao potencial de aprisionamento e V_{int} é o potencial das interações interatômicas. Da suposição de que o sistema em questão trata-se de um condensado e, portanto, de um estado coerente, segue imediatamente que a energia variacional $E_0 = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ corresponde a

$$E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{R^3} d^3r \Psi_0^* \nabla^2 \Psi_0 + \int_{R^3} d^3r V_{trap} |\Psi_0|^2 + \int_{R^3} d^3r d^3r' V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 |\Psi_0(\mathbf{r}')|^2.$$

Note que por meio de um ansatz adequado para Ψ_0 , que conterá os parâmetros relevantes na descrição do sistema, podemos calcular as expressões acima explicitamente, de forma que no fim do procedimento a energia E_0 dependerá unicamente destes parâmetros. Ora, por estarmos tratando do estado fundamental, basta minimizarmos a expressão para a energia em relação aos parâmetros variacionais, obtendo assim não só a forma explícita do estado fundamental como também sua energia. Esta será a estratégia que utilizaremos nesta dissertação na obtenção da função de onda do condensado.

Vale citar que esta técnica pode ser aplicada para uma função de onda arbitrária. Para tal, visto que o processo de minimização deve respeitar a condição de normalização $N = \int |\psi_0|^2 d^3r$ é necessário considerar o multiplicador de Lagrange μ . Esta quantidade μ tem a interpretação física de potencial químico, isto é, se trata do custo energético associado ao acréscimo de uma partícula no sistema. Ao resultado deste procedimento de minimização dá-se o nome de *Equação de Gross-Pitaevskii*, sendo esta a equação central no estudo de condensados de Bose-Einstein:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{trap} + V_{eff} - \mu\right)\psi_0 = 0$$

onde

$$V_{eff} = \int_{R^3} d^3r V_{int} |\psi_0|^2$$

Frequentemente, o potencial de aprisionamento utilizado é o potencial harmônico $V_{trap} \propto r^2$. Neste trabalho, utilizaremos a armadilha tipo bolha, ou *bubble trap*, cujo potencial corresponde a

$$V_{Bubble} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 (r - r_0)^2. \quad (2.1)$$

que nada mais é que um potencial harmônico esfericamente simétrico cujo ponto de mínimo está deslocado de uma distância r_0 . Nesta expressão temos dois parâmetros importantes na descrição do sistema: a frequência da armadilha ω_0 define a espessura da casca esférica, enquanto que r_0 define o raio médio do condensado.

A seguir definiremos os demais potenciais associados ao nosso caso de estudo.

2.3 Interações

Em gases rarefeitos o alcance das forças interatômicas é muito menor que a distância média entre partículas, fixada pela densidade $n = N/V$. Isso faz com que possamos considerar arranjos de apenas duas partículas interagindo com boa aproximação. Outra consequência importante é a de que a distância entre partículas é suficientemente grande de tal modo que a utilização da expressão assintótica para a função de onda, fixada pela amplitude de espalhamento, é sempre justificada. Esse tratamento tem a vantagem de que todas as propriedades ligadas à interação de contato em um dado sistema podem ser expressas unicamente em termos da amplitude de espalhamento de forma que uma descrição mais detalhada destas interações de curto alcance é desnecessária. Ademais, dado que estamos interessados no estudo de BEC devemos considerar temperaturas abaixo da temperatura crítica T_C . Nesse regime de temperaturas os valores de momento relevantes são limitados superiormente de tal forma que a amplitude de espalhamento independe da energia do sistema e portanto pode ser aproximado pelo seu valor de baixa energia que de acordo com a teoria de espalhamento é determinado unicamente pelo comprimento de

espalhamento de ondas-s a_s enquanto que ondas orbitais mais elevadas como p, d ou f são suprimidas devido à barreira centrífuga presente nestes sistemas ultra-frios. O potencial que é tipicamente utilizado na descrição desse tipo de interação tem a forma

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

e é chamado pseudopotencial de contato.

Note que V_δ , por construção, corresponde a um potencial isotrópico e de curto alcance. É importante ressaltar que o parâmetro a_s pode ser variado experimentalmente via a aplicação de campos magnéticos. Essa técnica, denominada ressonância de Feshbach, fornece grande controle experimental sobre a interação de contato, de forma que em princípio podemos tanto alternar entre comportamentos repulsivos e atrativos quanto "desligar" essa interação.

Nos últimos anos considerável interesse surgiu no estudo de outro aspecto da estrutura interna das partículas constituintes de gases ultra frios: o momento de dipolo. Se este for suficientemente grande, as resultantes forças provenientes da interação de dipolo-dipolo podem influenciar ou até mudar completamente as propriedades de BEC em gases bosônicos. A interação entre dois dipolos é descrita pelo potencial

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

Neste trabalho consideraremos um gás monoatômico com $\mathbf{m}_1 = \mu = \mathbf{m}_2$. Além disso consideraremos o caso em que todos os dipolos apontam na mesma direção. Escolhendo nosso sistema de coordenadas como aquele cuja direção do versor $\hat{\mathbf{z}}$ coincide com a direção de polarização obtemos

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

sendo que θ representa o ângulo entre a direção de polarização e o vetor que liga os dipolos, como ilustrado na figura a seguir:

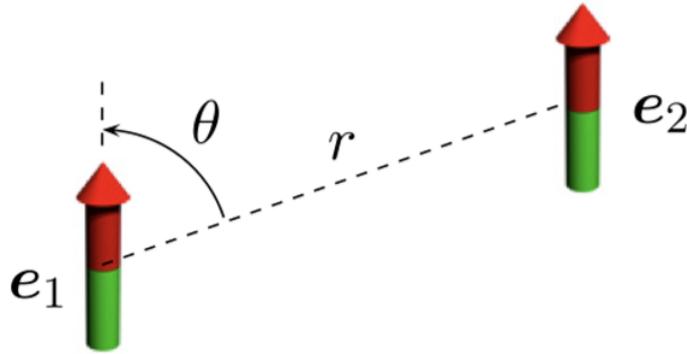


Figura 2 – Interação entre dois dipolos
 Fonte: LAHAYE; MENOTTI; SANTOS; LEWENSTEIN; PFAU.²²

Com o fim de quantificarmos a força da interação dipolar para uma dada espécie atômica é útil a definição de alguns parâmetros. Primeiramente, podemos definir

$$a_{dd} \doteq \frac{C_{dd}m}{12\pi\hbar^2}$$

onde $C_{dd} = \mu_0\mu^2$. Note que este objeto, que possui dimensão de distância, nos dá uma medida do valor absoluto da força da interação dipolar. Contudo, visto que os sistemas físicos de interesse também apresentam interação de contato, a grandeza que realmente determina as propriedades destes deve ser uma medida da força relativa entre estas duas interações. Assim, é natural definirmos a quantidade

$$\epsilon_{dd} \doteq \frac{a_{dd}}{a_s} = \frac{C_{dd}}{3g}.$$

Dessa forma, para que fenômenos ligados à interação dipolar possam ser detectados é necessário que ϵ_{dd} seja um número apreciável. Vale apontar que as constantes introduzidas na definição de a_{dd} são tais que um condensado dipolar homogêneo com $\epsilon_{dd} \geq 1$ apresenta instabilidade e colapsa. Valores típicos de ϵ_{dd} são 0.007 para Rubídio, 0.16 para Cromo e 1.3 para Disprósio. Neste ponto, é crucial ressaltarmos que apesar de estes valores serem fixos para uma dada espécie atômica, dado que possuímos controle experimental do comprimento de espalhamento de ondas-s por meio de *Ressonância de Feshbach*, segue automaticamente da definição de ϵ_{dd} que temos liberdade em controlar os efeitos dipolares no condensado.

Comentemos agora sobre alguns destes efeitos, começando pela anisotropia da interação de dipolo-dipolo. É simples notar que dipolos numa configuração "lado a lado" ($\uparrow\uparrow$) experienciam força repulsiva. Já dipolos numa configuração "head to tail" ($\rightarrow\rightarrow$) experienciam força atrativa. Ademais, visto que a interação dipolar é de longo alcance da forma r^{-3} segue que mesmo para temperaturas próximas do zero absoluto as componentes de ondas

parciais não só são finitas como acoplam-se umas as outras devido à anisotropia. Por isto, tal potencial não pode ser simplificado para um potencial de contato. Estas duas características acarretam em interessantes dependências nas propriedades de BECs dipolares. Em particular, a geometria de um condensado, determinada pelo armadilhamento, é uma característica de grande relevância. Por exemplo, sabe-se que condensados não dipolares se tornam instáveis para comprimentos de espalhamento negativos, produzindo assim o fenômeno de Bosenova, que se trata do colapso do condensado e da dinâmica subsequente. Ao confinarmos um condensado dipolar numa armadilha harmônica este tende a se alongar na direção de polarização. Uma consequência interessante disto é a de que condensados aprisionados em armadilhas do tipo "panqueca" mantém sua estabilidade para uma faixa de valores negativos de a_s .

3 ESTADO FUNDAMENTAL

3.1 *Bubble Ansatz*

A fim de utilizarmos o método variacional na obtenção do estado fundamental precisamos determinar *a priori* um ansatz que ao mesmo tempo descreva adequadamente a geometria de casca fina e também permita as acomodações angulares da densidade do condensado ao longo da superfície esférica devido às interações anisotrópicas dipolares. Primeiramente, note que de modo geral a geometria de casca esférica isotrópica pode ser facilmente descrita por uma função pico da forma

$$\Psi_{Trial}(\mathbf{r}) = \mathcal{A} \mathcal{F} \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right]$$

sendo R_0 o raio médio da nuvem atômica, R_1 sua espessura e \mathcal{A} uma constante de normalização. Tipicamente a forma específica de \mathcal{F} é aquela obtida via aproximação de Thomas-Fermi que, no caso de uma armadilha harmônica corresponde à porção positiva de uma parábola invertida. No entanto, dado que estamos interessados no limite de casca fina, situação na qual a contribuição da energia cinética é apreciavelmente maior à das outras energias, segue que esta aproximação não é adequada. Por este motivo utilizaremos um ansatz gaussiano que não só é mais adequado neste regime de energia cinética como também foi a função teste utilizada em trabalhos aos quais compararemos nossos resultados para limites não dipolares.^{33,35} Sendo nosso ansatz radial da forma $\mathcal{F}(x) = e^{-x^2/2}$ segue que no limite de casca fina, isto é, $R_0 \gg R_1$ este possui a importante propriedade

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

sendo $u = r/R_0$ e δ a função delta de Dirac.

Tendo estabelecido a dependência radial do nosso problema podemos agora definir a forma da dependência angular. Note que diferentemente da imposição feita no comportamento radial, que queremos que apresente simetria esférica explícita, desejamos expressar o comportamento angular de forma completamente arbitrária de maneira que este nos será revelado após o processo de minimização. O modo mais simples e prático de expressarmos qualquer dependência angular na superfície de uma esfera é através das autofunções do operador momento angular ao quadrado, os esféricos harmônicos. Assim, a função teste a ser utilizada no decorrer deste trabalho é escrita como

$$\Psi_{Trial}(\mathbf{r}) = \mathcal{A} \exp \left[-\frac{R_0^2}{2R_1^2} (u - 1)^2 \right] \times h(\theta, \phi)$$

sendo h expressa como a combinação linear dos harmônicos esféricos Y_l^m

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

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

$$\sum_{l,m} a_{l,m}^* a_{l,m} = 1 \quad (3.2)$$

requisitada pela regra de Born. É importante notarmos que como os $a_{l,m}$ definem completamente a distribuição angular de Ψ_{Trial} segue que nestes estão toda a informação necessária na obtenção do estado fundamental e portanto estes serão os parâmetros variacionais. Note que, uma vez estabelecidas todas as características relevantes do nosso sistema, como espécie atômica, frequência da armadilha, etc, a energia do sistema dependerá exclusivamente dos $a_{l,m}$. A última etapa necessária para o estabelecimento da nossa função teste é a determinação da constante \mathcal{A} , que obteremos a seguir via condição de normalização

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

sendo N o número de átomos presentes no condensado. A partir de agora expressaremos todas as integrais envolvendo a função de onda em coordenadas esféricas. Nestas coordenadas e substituindo $\Psi(\mathbf{x})$ por $\Psi_{Trial}(\mathbf{x})$ a expressão acima se torna

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

sendo Ω o ângulo sólido total delimitado pela superfície esférica e \mathbb{R}^+ o conjunto dos números reais positivos. Ademais, note que do fato bem conhecido de que podemos, sem perda de generalidade, adicionar uma fase complexa arbitrária à função de onda segue que \mathcal{A} pode ser considerado um número real positivo por conveniência. Rearranjando a expressão acima obtemos

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

Neste trabalho sempre utilizaremos a seguinte convenção de normalização de harmônicos esféricos

$$\int_{\Omega} d\Omega (Y_{l'}^{m'})^* Y_l^m = \delta_{l',m'} \delta_{l,m}$$

onde $\delta_{l,m}$ simboliza a delta de Kronecker. Desta convenção e da restrição (3.2) imposta aos $a_{l,m}$ segue que

$$\begin{aligned} N &= \mathcal{A}^2 \sum_{l,m} \sum_{l',m'} a_{l',m'}^* a_{l,m} \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right] \delta_{l',m'} \delta_{l,m} \\ &= \mathcal{A}^2 \sum_{l,m} a_{l,m}^* a_{l,m} \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right] \\ &= \mathcal{A}^2 \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right]. \end{aligned}$$

Aplicando a mudança de variáveis $r = R_0 u$ e substituindo a forma funcional de \mathcal{F} obtemos

$$N = \mathcal{A}^2 R_0^3 \int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \exp\left[-\frac{R_0^2}{R_1^2}(u-1)^2\right]$$

Aplicaremos agora o limite de casca fina. Fazendo uso da identidade (3.1) temos

$$\begin{aligned} N &= \mathcal{A}^2 R_0^3 \int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \frac{R_1 \sqrt{\pi}}{R_0} \delta(u-1) \\ &= \mathcal{A}^2 R_0^3 \frac{R_1 \sqrt{\pi}}{R_0} = \mathcal{A}^2 R_0^2 R_1 \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

donde concluímos que no limite de casca fina a constante de normalização \mathcal{A} é

$$\mathcal{A} = \frac{\sqrt{N}}{R_0 \sqrt{R_1} \pi^{1/4}}$$

e podemos finalmente escrever a forma final de Ψ_{Trial} :

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

Tendo nossa função teste em mãos podemos prosseguir com o cálculo da energia total do sistema.

3.2 Energia de Confinamento

Começaremos pelo termo mais simples, a energia de armadilhamento. O procedimento que será apresentado a seguir é praticamente o mesmo que foi feito na seção de normalização. Isso se dá pelo fato de estarmos lidando com um potencial de aprisionamento isotrópico. A energia da armadilha é dada por

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

Ao substituírmos a expressão para V_{Bubble} , dada por (2.1), e $\Psi(\mathbf{x})$ obtemos

$$E_{Bubble} = \mathcal{A}^2 \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr \int_{\Omega} d\Omega \left(\frac{1}{2} M \omega_0^2 (r - r_0)^2\right) \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1}\right] \left(\sum_{l',m'} a_{l',m'} Y_{l'}^{m'}\right)^* \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m$$

veja que, pelos mesmos argumentos utilizados na seção anterior, a parte angular desta expressão é trivial. Logo, temos que

$$E_{Bubble} = \frac{1}{2} \mathcal{A}^2 M \omega_0^2 \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr (r - r_0)^2 \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1}\right]$$

substituindo a forma funcional de \mathcal{F} e realizando a mudança de variáveis $r = u R_0$ obtemos

$$\frac{1}{2} \mathcal{A}^2 M \omega_0^2 R_0^3 \int_{\mathbb{R}^+} u^2 dr \left(u - \frac{r_0}{R_0}\right)^2 \exp\left[-\frac{R_0^2}{R_1^2}(u-1)^2\right].$$

Aplicaremos agora o limite de casca fina e substituiremos a exponencial por uma delta de Dirac

$$\frac{1}{2} \mathcal{A}^2 M \omega_0^2 R_0^5 \frac{R_1 \sqrt{\pi}}{R_0} \int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \left(u - \frac{r_0}{R_0}\right)^2 \delta(u - 1)$$

donde segue imediatamente que

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

Substituindo a constante \mathcal{A} obtemos a expressão final para a energia de aprisionamento:

$$E_{Bubble} = \frac{N}{2} M \omega_0^2 R_0^2 \left(1 - \frac{r_0}{R_0}\right)^2$$

É importante que ressaltemos a diferença entre r_0 e R_0 . O primeiro se trata do mínimo de potencial da armadilha enquanto que o segundo é o raio médio da nuvem atômica.

3.3 Energia Cinética

Para o cálculo da energia cinética utilizaremos a seguinte expressão

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

onde $\|v\|$ deve ser entendido como a norma do vetor complexo v definida como sendo

$$\|v\| = \sqrt{\sum_i v_i^* v_i}.$$

Em coordenadas esféricas temos

$$\|\nabla\Psi(\mathbf{r})\|^2 = \left|\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r}\right|^2 + \frac{1}{r^2} \left|\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\theta}\right|^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \left|\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\phi}\right|^2$$

sendo $|z|^2 = z^* z$ a norma usual de números complexos. Assim, a energia cinética se expressa como uma soma de três integrais correspondentes a cada uma das derivadas parciais da função de onda. A seguir calcularemos cada um desses termos começando pelo termo da derivada radial. Avaliando esta diretamente obtemos

$$\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r} = -\mathcal{A} \frac{(r - R_0)}{R_1^2} \exp\left[-\frac{(r - R_0)^2}{2R_1^2}\right] \times h(\theta, \phi).$$

Logo

$$\begin{aligned} \int d^3x \left|\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r}\right|^2 &= \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr \int_{\Omega} d\Omega \left|-\mathcal{A} \frac{(r - R_0)}{R_1^2} \exp\left[-\frac{(r - R_0)^2}{2R_1^2}\right] \times h(\theta, \phi)\right|^2 = \\ &= \mathcal{A}^2 \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr \frac{(r - R_0)^2}{R_1^4} \exp\left[-\frac{(r - R_0)^2}{R_1^2}\right] \times \underbrace{\int_{\Omega} d\Omega |h(\theta, \phi)|^2}_{=1} \end{aligned}$$

onde mais uma vez a integral angular é trivialmente igual à unidade. Trocando para coordenadas radiais sem dimensão obtemos

$$\frac{N}{\sqrt{\pi}} \frac{R_0^3}{R_1^5} \int_{\mathbb{R}^+} u^2 du (u-1)^2 \exp \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2} (u-1)^2 \right].$$

A estratégia a ser utilizada neste passo será a de primeiro obtermos a expressão analítica desta integral e depois analisaremos seu comportamento no limite de casca fina. É relativamente simples verificar que a integral acima resulta em

$$\frac{N}{\sqrt{\pi}} \frac{R_0^3}{R_1^5} \left[\frac{\sqrt{\pi} (2\alpha^2 + 3) (\operatorname{erf}(\alpha) + 1) + 2e^{-\alpha^2} \alpha}{8\alpha^5} \right]$$

onde $\alpha = R_0/R_1$. No limite casca fina, isto é, no regime em que $\alpha \gg 1$ é razoável considerarmos as seguintes aproximações

$$\frac{N}{\sqrt{\pi}} \frac{R_0^3}{R_1^5} \left[\frac{\sqrt{\pi} \alpha^2 (2 + 3/\alpha^2) (\operatorname{erf}(\alpha) + 1) + 2e^{-\alpha^2} \alpha}{8\alpha^5} \right]$$

resultando em

$$\frac{N}{\sqrt{\pi}} \frac{R_0^3}{R_1^5} \times \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^3} = \frac{N}{2R_1^2}$$

e, portanto

$$\int d^3x \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right|^2 = \frac{N}{2R_1^2}.$$

Faremos agora o segundo termo, correspondente à derivada na direção polar:

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

Neste caso, a integral radial é elementar. Aplicando o limite de casca fina em sua expressão analítica obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^2 R_0 \left(\frac{\sqrt{\pi} R_1 (\operatorname{erf}[R_0/R_1] + 1)}{2R_0} \right) \int_{\Omega} d\Omega |\partial_{\theta} h(\theta, \phi)|^2 &\approx \\ \mathcal{A}^2 \sqrt{\pi} R_1 \int_{\Omega} d\Omega |\partial_{\theta} h(\theta, \phi)|^2 &= \frac{N}{R_0^2} \int_{\Omega} d\Omega |\partial_{\theta} h(\theta, \phi)|^2 \end{aligned}$$

o que nos leva a

$$\int d^3x \frac{1}{r^2} \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \theta} \right|^2 = \frac{N}{R_0^2} \int_{\Omega} d\Omega |\partial_{\theta} h(\theta, \phi)|^2$$

Antes de tratarmos da integral angular notemos que a parte radial do próximo termo a ser calculado, aquele resultante da diferenciação de Ψ com respeito a ϕ , possui esta mesma dependência radial que acabamos de calcular. Segue imediatamente que o termo azimutal tem a forma

$$\int d^3x \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left| \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \phi} \right|^2 = \frac{N}{R_0^2} \int_{\Omega} d\Omega \frac{|\partial_{\phi} h(\theta, \phi)|^2}{\sin^2 \theta}.$$

Podemos agora escrever o resultado preliminar

$$E_{Kin} = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{N}{R_0^2} \left\{ \frac{R_0^2}{2R_1^2} + \int_{\Omega} d\Omega \left[|\partial_{\theta} h(\theta, \phi)|^2 + \frac{|\partial_{\phi} h(\theta, \phi)|^2}{\sin^2 \theta} \right] \right\} \quad (3.3)$$

A seguir resolveremos a parte angular da expressão acima. Substituindo a forma explícita de $h(\theta, \phi)$ obtemos

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} d\Omega \left[|\partial_{\theta} h(\theta, \phi)|^2 + \frac{|\partial_{\phi} h(\theta, \phi)|^2}{\sin^2 \theta} \right] = \\ & \sum_{l', m'} \sum_{l, m} a_{l', m'}^* a_{l, m} \int_{\Omega} d\Omega \left[(\partial_{\theta} Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\theta} Y_l^m + \frac{(\partial_{\phi} Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\phi} Y_l^m}{\sin^2 \theta} \right] \end{aligned}$$

Utilizaremos agora as seguintes identidades facilmente verificáveis via regras elementares de diferenciação:

$$(\partial_{\theta} Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\theta} Y_l^m = \frac{1}{\sin \theta} \partial_{\theta} [\sin \theta (Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\theta} Y_l^m] - \frac{(Y_{l'}^{m'})^*}{\sin \theta} \partial_{\theta} [\sin \theta \partial_{\theta} Y_l^m]$$

$$(\partial_{\phi} Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\phi} Y_l^m = \partial_{\phi} [(Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\phi} Y_l^m] - (Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\phi}^2 Y_l^m$$

Note que os primeiros termos de cada uma das identidades acima resultam em zero quando integrados no ângulo sólido. Isto decorre trivialmente do teorema fundamental do cálculo associado à natureza periódica dos integrandos. Consequentemente

$$\int_{\Omega} d\Omega \left[(\partial_{\theta} Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\theta} Y_l^m + \frac{(\partial_{\phi} Y_{l'}^{m'})^* \partial_{\phi} Y_l^m}{\sin^2 \theta} \right] = \int_{\Omega} d\Omega (Y_{l'}^{m'})^* \left[-\frac{\partial_{\theta} [\sin \theta \partial_{\theta} Y_l^m]}{\sin \theta} - \frac{\partial_{\phi}^2 Y_l^m}{\sin^2 \theta} \right]$$

A seguir o motivo destas manipulações ficará claro. Veja que o termo entre colchetes do lado direito da equação acima nada mais é que a representação espacial do operador momento angular ao quadrado aplicado no seu autovetor, o harmônico esférico Y_l^m

$$\hat{\mathcal{L}}^2 Y_l^m = l(l+1) Y_l^m.$$

Substituindo a equação acima na integral angular obtemos

$$\int_{\Omega} d\Omega (Y_{l'}^{m'})^* l(l+1) Y_l^m = l(l+1) \delta_{l',m'} \delta_{l,m}$$

que nos leva à solução surpreendentemente simples

$$\int_{\Omega} d\Omega \left[|\partial_{\theta} h(\theta, \phi)|^2 + \frac{|\partial_{\phi} h(\theta, \phi)|^2}{\sin^2 \theta} \right] = \sum_{l',m'} \sum_{l,m} a_{l',m'}^* a_{l,m} \delta_{l',m'} \delta_{l,m} l(l+1) = \sum_{l,m} a_{l,m}^* a_{l,m} l(l+1).$$

Substituindo o resultado acima em (3.3) obtemos, finalmente, a energia cinética do sistema:

$$E_{Kin} = \frac{N\hbar^2}{2MR_0^2} \left\{ \frac{R_0^2}{2R_1^2} + \sum_{l,m} a_{l,m}^* a_{l,m} l(l+1) \right\}$$

3.4 Energia de contato

A energia de contato é dada por

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

substituindo nosso ansatz e passando pra coordenadas esféricas fica

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

O resultado analítico da integral radial é

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \exp \left[-2\frac{R_0^2}{R_1^2} (u-1)^2 \right] = \\ & \frac{R_1}{16R_0^3} \left(\sqrt{2\pi} (4R_0^2 + R_1^2) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}R_0}{R_1} \right) + 1 \right) + 4e^{-\frac{2R_0^2}{R_1^2}} R_0 R_1 \right) \end{aligned}$$

que no limite de casca fina se reduz a

$$\int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \exp \left[-2\frac{R_0^2}{R_1^2} (u-1)^2 \right] \rightarrow \frac{\sqrt{2\pi} R_1}{2R_0}$$

e portanto

$$\begin{aligned} E_{\delta} &= \frac{g}{2} \mathcal{A}^4 R_0^3 \frac{\sqrt{2\pi} R_1}{2R_0} \times \int_{\Omega} d\Omega \left| \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \right|^4 \\ &= \frac{\sqrt{2\pi} g N^2}{4\pi R_0^2 R_1} \int_{\Omega} d\Omega \left| \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \right|^4 \end{aligned}$$

Tratemos agora da integral angular. Primeiro, expandiremos o integrando da seguinte forma

$$\left| \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \right|^4 = \sum_{l_1, m_1} \sum_{l_2, m_2} \sum_{l_3, m_3} \sum_{l_4, m_4} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2} a_{l_3, m_3}^* a_{l_4, m_4}^* Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} (Y_{l_3}^{m_3} Y_{l_4}^{m_4})^*$$

de maneira que a integral angular é expressa

$$\int_{\Omega} d\Omega \left| \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \right|^4 = \sum_{l_1, m_1} \sum_{l_2, m_2} \sum_{l_3, m_3} \sum_{l_4, m_4} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2} a_{l_3, m_3}^* a_{l_4, m_4}^* \Delta_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{m_1 m_2 m_3 m_4}$$

onde

$$\Delta_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{m_1 m_2 m_3 m_4} = \int_{\Omega} d\Omega Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} (Y_{l_3}^{m_3} Y_{l_4}^{m_4})^*$$

Precisamos, portanto, calcular os números Δ . Com este fim, utilizaremos a propriedade do produto de harmônicos esféricos

$$\begin{aligned} Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) &= \sum_{l,m} \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l+1)}{4\pi}} \times \\ &\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} (-1)^m Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (3.4)$$

sendo os objetos entre parênteses os símbolos 3-J de Wigner, cujas propriedades encontram-se no apêndice. Veja que ao substituirmos esta identidade na definição dos Δ reduzimos a integral de um produto de quatro harmônicos esféricos a uma soma envolvendo a integral de apenas dois harmônicos esféricos, sendo esta simplesmente igual ao produto de deltas de Kronecker devido à condição de normalização. É fácil verificar que este procedimento resulta em

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

Devido às propriedades dos símbolos de Wigner podemos nos livrar do índice de soma m obtendo

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

Segue que a energia de contato é dada por

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

3.5 Energia de interação dipolar

Dedicaremos esta seção para o cálculo da energia de interação dipolar. A partir de agora utilizaremos a seguinte notação para a densidade do condensado

$$n(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$$

Assim, a energia de interação de dipolo-dipolo tem a forma

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

A seguir conduziremos algumas manipulações matemáticas que simplificarão enormemente o cálculo de E_{dd} . Seja $V_{dd}(\mathbf{k})$ a transformada de Fourier do potencial de interação $V_{dd}(\mathbf{x})$ sendo $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$. Segue do teorema de Fourier que

$$V_{dd}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}$$

Note que estamos usando a convenção que concentra os fatores de 2π somente na transformada direta. Substituindo a expressão acima na fórmula de E_{dd} obtemos

$$\begin{aligned} E_{dd} &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x d^3x' n(\mathbf{x}) V_{dd}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') n(\mathbf{x}') \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x d^3x' n(\mathbf{x}) \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \right) n(\mathbf{x}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' n(\mathbf{x}') e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x n(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) n(\mathbf{k}) n(-\mathbf{k}) \end{aligned}$$

onde $n(\mathbf{k})$ denota a transformada de Fourier da densidade $n(\mathbf{r})$. A grande vantagem que temos ao expressarmos a energia dipolar no espaço de Fourier é a de que um símbolo de integração é eliminado. O preço a se pagar é o de que precisamos calcular $V_{dd}(\mathbf{k})$ e $n(\mathbf{k})$ explicitamente. Começemos pela transformada de Fourier do potencial de interação.

3.6 Cálculo de $V(\mathbf{k})$

Nesta etapa utilizaremos a seguinte identidade de operadores, sendo esta frequentemente utilizada no estudo de interações dipolares

$$-\partial_i \partial_j \frac{1}{4\pi x} = \frac{\delta_{ij} - 3\hat{x}_i \hat{x}_j}{4\pi x^3} + \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}) \quad (3.5)$$

onde ∂_i representa a operação de diferenciação parcial em relação à coordenada x_i , $x = |\mathbf{x}|$ e $\hat{x}_i = |\hat{\mathbf{x}}_i|$. É interessante notar que a identidade acima expressa a relação entre o potencial de Coulomb, no lado esquerdo da equação, e o potencial de interação de dipolo-dipolo no lado direito. A demonstração segue do teorema da divergência Gauss. Aplicando o operador transformada de Fourier \mathbb{F} em ambos os lados desta equação obtemos

$$\mathbb{F} \left[-\partial_i \partial_j \frac{1}{4\pi x} \right] = \mathbb{F} \left[\frac{\delta_{ij} - 3\hat{x}_i \hat{x}_j}{4\pi x^3} + \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}) \right].$$

Rearranjando os termos e fazendo uso da propriedade $\mathbb{F}[\partial_i f] = -ik_i \mathbb{F}[f]$ temos que

$$\mathbb{F} \left[\frac{\delta_{ij} - 3\hat{x}_i \hat{x}_j}{4\pi x^3} \right] = k_i k_j \mathbb{F} \left[\frac{1}{4\pi x} \right] - \frac{1}{3} \delta_{ij}$$

Como já foi dito anteriormente estamos interessados no caso em que todos os dipolos se encontram alinhados com a direção \hat{z} . Fazendo portanto a restrição $i = j = z$ e comparando com (3.5) obtemos

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

de maneira que o problema de calcularmos a transformada de Fourier do potencial de interação dipolar se reduz ao cálculo da transformada de Fourier do potencial de Coulomb. Para este fim utilizaremos a identidade de Schwinger

$$\frac{1}{a^\nu} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{\mathbb{R}^+} d\xi \xi^{\nu-1} e^{-a\xi}.$$

Ao substituírmos esta em $\mathbb{F}[1/x]$ o cálculo se torna elementar

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

$$\therefore \mathbb{F} \left[\frac{1}{4\pi x} \right] = \frac{1}{\mathbf{k}^2}.$$

Consequentemente

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

Finalmente, ao expressarmos a fórmula acima em coordenadas esféricas (k, θ_k, ϕ_k) e notando que

$$3 \cos^2 \theta_k - 1 = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_2^0(\theta_k, \phi_k)$$

obtemos o simples resultado

$$V(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{16\pi}{45}} C_{dd} Y_2^0(\theta_k, \phi_k) \quad (3.6)$$

Calcularemos a seguir a transformada de Fourier da distribuição de densidade do condensado

3.7 Cálculo de $n(\mathbf{k})$

Neste passo utilizaremos a expansão

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

sendo j_l a função esférica de Bessel e Ω uma abreviação para as coordenadas angulares (θ, ϕ) de ambos os espaços direto e de Fourier. Tal resultado é imediatamente verificável via aplicação do teorema de adição de harmônicos esféricos na expansão em ondas planas de Rayleigh. Fazendo uso desta relação e já substituindo $\Psi(\mathbf{r})$ explicitamente temos que a transformada de Fourier da densidade $n(\mathbf{x})$ fica

$$\begin{aligned} n(\mathbf{k}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x n(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \Psi(\mathbf{r})^* \Psi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \left(\mathcal{A}^2 \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right] \sum_{l_1, m_1} \sum_{l_2, m_2} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2}^* Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2*}(\Omega) \right) \times \\ &\quad \left(4\pi \sum_{l_3, m_3} i^{l_3} j_{l_3}(kr) Y_{l_3}^{m_3*}(\Omega) Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) \right) \\ &= 4\pi \mathcal{A}^2 \sum_{\{l_i, m_i\}} i^{l_3} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2}^* Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) \times \\ &\quad \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x j_{l_3}(kr) \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right] Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2*}(\Omega) Y_{l_3}^{m_3*}(\Omega) \right) \\ &= 4\pi \mathcal{A}^2 \sum_{\{l_i, m_i\}} i^{l_3} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2}^* Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) \times \\ &\quad \left(\int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr j_{l_3}(kr) \mathcal{F}^2 \left[\frac{r - R_0}{R_1} \right] \right) \left(\int_{\Omega} d\Omega Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2*}(\Omega) Y_{l_3}^{m_3*}(\Omega) \right) \end{aligned}$$

onde escolhemos denotar $\{l_i, m_i\} = l_1, m_1, l_2, m_2, l_3, m_3$ por compacidade. Resolveremos agora a integral angular, que a partir de agora será denotada por Λ . Utilizando novamente

a propriedade (3.4) obtemos

$$\begin{aligned}
\Lambda_{l_1 l_2 l_3}^{m_1 m_2 m_3} &\doteq \int_{\Omega} d\Omega Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2*}(\Omega) Y_{l_3}^{m_3*}(\Omega) \\
&= \int_{\Omega} d\Omega Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) \sum_{l,m} \sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_3+1)(2l+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l \\ m_2 & m_3 & -m \end{pmatrix} \\
&\quad \times (-1)^m Y_l^{m*}(\Omega) \\
&= \sum_{l,m} \sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_3+1)(2l+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l \\ m_2 & m_3 & -m \end{pmatrix} \\
&\quad \times (-1)^m \underbrace{\int_{\Omega} d\Omega Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) Y_l^{m*}(\Omega)}_{=\delta_{m_1,m}\delta_{l_1,l}} \\
&= (-1)^{m_1} \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^3 (2l_i+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & l_1 \\ m_2 & m_3 & -m_1 \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{m_1} \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^3 (2l_i+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ -m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{m_2+m_3} \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^3 (2l_i+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ -(m_2+m_3) & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \delta_{m_1, m_2+m_3}
\end{aligned}$$

sendo os dois últimos passos consequências das propriedades dos símbolos de Wigner. Resumindo os cálculos acima, temos

$$\Lambda_{l_1 l_2 l_3}^{m_1 m_2 m_3} = (-1)^{m_2+m_3} \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^3 (2l_i+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ -(m_2+m_3) & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \delta_{m_1, m_2+m_3} \quad (3.7)$$

Concluimos assim o cálculo da parte angular. Embora ainda reste a parte radial a ser resolvida não o faremos no momento. Ao invés disso, a compactaremos como

$$\mathcal{J}_l(k) \doteq \int_{\mathbb{R}^+} r^2 dr j_l(kr) \mathcal{F}^2 \left[\frac{r-R_0}{R_1} \right] \quad (3.8)$$

e assim, podemos escrever $n(\mathbf{k})$

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

Tendo em mãos todas as transformadas de Fourier necessárias podemos agora conduzir o cálculo da energia de interação dipolar.

3.8 Cálculo de E_{dd}

Antes de prosseguirmos será conveniente compactarmos nossa notação visto que as expressões que surgirão serão demasiadamente grandes. Primeiramente, lembremos da

expressão para a energia dipolar

$$E_{dd} = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) n(\mathbf{k}) n(-\mathbf{k}). \quad (3.9)$$

segue do cálculo feito na subseção anterior que

$$n(\mathbf{k}) n(-\mathbf{k}) = \left(4\pi \mathcal{A}^2 \sum_{\{l_i, m_i\}} i^{l_3} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2}^* \Lambda_{l_1 l_2 l_3}^{m_1 m_2 m_3} \mathcal{J}_{l_3}(k) Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) \right) \times \\ \left(4\pi \mathcal{A}^2 \sum_{\{l_j, m_j\}} (-i)^{l_6} a_{l_4, m_4} a_{l_5, m_5}^* \Lambda_{l_4 l_5 l_6}^{m_4 m_5 m_6} \mathcal{J}_{l_6}(k) Y_{l_6}^{m_6}(\Omega_k) \right)$$

Reorganizando o lado direito da expressão acima obtemos

$$16\pi^2 \mathcal{A}^4 \sum_{\{l_i, m_i\}} \sum_{\{l_j, m_j\}} i^{l_3} (-i)^{l_6} a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2}^* a_{l_4, m_4} a_{l_5, m_5}^* \times \\ \Lambda_{l_1 l_2 l_3}^{m_1 m_2 m_3} \Lambda_{l_4 l_5 l_6}^{m_4 m_5 m_6} \mathcal{J}_{l_3}(k) \mathcal{J}_{l_6}(k) Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) Y_{l_6}^{m_6}(\Omega_k).$$

Agora, renomearemos todos os coeficientes da expressão acima da seguinte forma:

$$\mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} \doteq a_{l_1, m_1} a_{l_2, m_2}^* a_{l_4, m_4} a_{l_5, m_5}^* \Lambda_{l_1 l_2 l_3}^{m_1 m_2 m_3} \Lambda_{l_4 l_5 l_6}^{m_4 m_5 m_6}$$

sendo $\{l_k, m_k\}$ uma abreviação para a coleção de todos os doze índices l_i, m_i . Dessa forma, podemos escrever

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

Assim, segue da relação acima, de (3.6) e de (3.9) que a energia dipolar é

$$E_{dd} = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) n(\mathbf{k}) n(-\mathbf{k}) \\ = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \left(\sqrt{\frac{16\pi}{45}} C_{dd} Y_2^0(\Omega_k) \right) \\ \times \left(16\pi^2 \mathcal{A}^4 \sum_{\{l_k, m_k\}} i^{l_3} (-i)^{l_6} \mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} \mathcal{J}_{l_3}(k) \mathcal{J}_{l_6}(k) Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) Y_{l_6}^{m_6}(\Omega_k) \right) \\ = \frac{C_{dd} N^2}{\pi^2 R_0^4 R_1^2} \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{\{l_k, m_k\}} i^{l_3} (-i)^{l_6} \mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} \int_{\mathbb{R}^+} k^2 dk \mathcal{J}_{l_3}(k) \mathcal{J}_{l_6}(k) \times \\ \int_{\Omega_k} d\Omega_k Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) Y_{l_6}^{m_6}(\Omega_k) Y_2^0(\Omega_k).$$

Note que como Y_2^0 apresenta simetria azimutal sendo portanto uma função real temos que a parte angular da expressão acima possui a mesma forma dos Λ , definidos por (3.7). Segue imediatamente que

$$\int_{\Omega_k} d\Omega_k Y_{l_3}^{m_3}(\Omega_k) Y_{l_6}^{m_6}(\Omega_k) Y_2^0(\Omega_k) = \Lambda_{l_3 l_6 2}^{m_3 m_6 0}.$$

Ademais, das propriedades dos símbolos de Wigner (Apêndice A) temos

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

Logo

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

sendo que na última igualdade foi usado que

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

Trabalharemos agora nas integrais radiais, o último passo do cálculo das energias. Primeiramente, veja que embora estas dependam dos índices (l_3, l_6) não há necessidade de calcularmos tal integral geral visto que as deltas de Kronecker só são diferentes de zero nos três casos correspondentes a $l_6 = l_3$ e $l_6 = l_3 \pm 2$. A seguir calcularemos as integrais radiais correspondentes a cada uma destas situações começando pelo caso mais simples,

isto é, aquele em que $l_6 = l_3$. Da definição (3.8) dos \mathcal{J}_l temos

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

sendo que a única manipulação significativa feita foi a de trocar as coordenadas de integração para variáveis adimensionais. Utilizaremos agora a identidade

$$\int_{\mathbb{R}^+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_l(\xi v) = \frac{\pi}{2u^2} \delta(u - v) \quad (3.10)$$

donde segue que

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_l(k) &= R_0^3 \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^+} dudv v^2 u^2 \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1}(u - 1) \right] \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1}(v - 1) \right] \times \\
&\quad \int_{\mathbb{R}^+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_l(\xi v) \\
&= R_0^3 \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^+} dudv v^2 u^2 \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1}(u - 1) \right] \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1}(v - 1) \right] \times \\
&\quad \frac{\pi}{2u^2} \delta(u - v) \\
&= \frac{\pi R_0^3}{2} \int_{\mathbb{R}^+} du u^2 \mathcal{F}^4 \left[\frac{R_0}{R_1}(u - 1) \right] \\
&= \frac{\pi R_0^3}{2} \int_{\mathbb{R}^+} du u^2 \exp \left[-2 \frac{R_0^2}{R_1^2} (u - 1)^2 \right] \\
&= \frac{\pi R_0^3}{2} \frac{R_1}{16 R_0^3} \left(\sqrt{2\pi} (4R_0^2 + R_1^2) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2} R_0}{R_1} \right) + 1 \right) + 4e^{-\frac{2R_0^2}{R_1^2}} R_0 R_1 \right)
\end{aligned}$$

que no limite de casca fina se reduz a

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

Trataremos agora do caso $l_6 = l_3 - 2$. De forma semelhante ao caso anterior temos

$$\int_{\mathbb{R}^+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_{l-2}(k) = R_0^3 \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^+} dudv v^2 u^2 \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1}(u-1) \right] \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1}(v-1) \right] \int_{\mathbb{R}^+} \xi^2 d\xi j_l(\xi u) j_{l-2}(\xi v)$$

Utilizaremos agora a propriedade

$$j_{l-2}(x) = \frac{2l-1}{x} j_{l-1}(x) - j_l(x)$$

que implica em

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

A primeira integral da última igualdade pode ser solucionada analiticamente resultando em $\pi/4$ enquanto que a segunda se trata da identidade (3.10). Fazendo uso disto e do procedimento realizado no caso $l_6 = l_3$ observamos que

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

restando apenas as integrais triviais envolvendo as gaussianas \mathcal{F} . A primeira delas corresponde a

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1}(u-1) \right] &= \int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \exp \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2}(u-1)^2 \right] \\ &= \frac{R_1}{4R_0^3} \left(\sqrt{\pi} (2R_0^2 + R_1^2) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{R_0}{R_1} \right) + 1 \right) + 2e^{-\frac{R_0^2}{R_1^2}} R_0 R_1 \right) \end{aligned}$$

que no limite de casca fina aproxima-se

$$\int_{\mathbb{R}^+} u^2 du \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1} (u-1) \right] \approx \frac{\sqrt{\pi} R_1}{R_0}$$

enquanto que a segunda é

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^+} v dv \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1} (u-1) \right] &= \int_{\mathbb{R}^+} v dv \exp^2 \left[-\frac{R_0^2}{R_1^2} (v-1)^2 \right] \\ &= -\frac{\sqrt{\pi} R_1}{2R_0} \left(Q \left(-\frac{1}{2}, \frac{R_0^2}{R_1^2} \right) - 2 \right) \end{aligned}$$

sendo Q a função Gamma regularizada. Esta dispõe da propriedade

$$\lim_{x \rightarrow \infty} Q \left(-\frac{1}{2}, x \right) = 0$$

donde segue que no limite de casca fina temos

$$\int_{\mathbb{R}^+} v dv \mathcal{F}^2 \left[\frac{R_0}{R_1} (u-1) \right] \approx \frac{\sqrt{\pi} R_1}{R_0}$$

Assim, concluimos que, no limite de casca fina

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^+} k^2 dk \mathcal{J}_l(k) \mathcal{J}_{l-2}(k) &\approx \frac{R_0^3 \pi (2l-1)}{4} \times \frac{\pi R_1^2}{R_0^2} - \frac{\pi^{3/2} \sqrt{2} R_0^2 R_1}{4} \\ &= \frac{\pi^2 R_0^2 R_1 (2l-1)}{4} \frac{R_1}{R_0} - \frac{\pi^{3/2} \sqrt{2} R_0^2 R_1}{4} \\ &= \frac{\sqrt{2} R_0^2 R_1 \pi^{3/2}}{4} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l-1) \frac{R_1}{R_0} - 1 \right) \end{aligned}$$

O último caso a ser considerado, aquele em que $l_6 = l_3 + 2$, segue imediatamente do anterior. Basta substituímos a variável muda l por $l + 2$ e obtemos

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

Podemos agora substituir as integrais envolvendo os \mathcal{J} na expressão da energia dipolar obtendo

$$\begin{aligned}
E_{dd} &= \frac{C_{dd}N^2}{\pi^2 R_0^4 R_1^2} \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{\{l_k, m_k\}} \mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} \Lambda_{l_3 l_6}^{m_3 m_6 0} \times \\
&\quad \left(\int_{\mathbb{R}^+} k^2 dk \mathcal{J}_{l_3}(k) \mathcal{J}_{l_6}(k) \right) (\delta_{l_3, l_6} - \delta_{l_3+2, l_6} - \delta_{l_3-2, l_6}) \\
&= \frac{C_{dd}N^2}{\pi^2 R_0^4 R_1^2} \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \frac{\pi^{3/2} \sqrt{2} R_0^2 R_1}{4} \sum_{\{l_k, m_k\}} \mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} \Lambda_{l_3 l_6}^{m_3 m_6 0} \times \\
&\quad \left[\delta_{l_3, l_6} - \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l+3) \frac{R_1}{R_0} - 1 \right) \delta_{l_3+2, l_6} - \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l-1) \frac{R_1}{R_0} - 1 \right) \delta_{l_3-2, l_6} \right] \\
&= \frac{2C_{dd}N^2}{3\sqrt{10} R_0^2 R_1} \sum_{\{l_k, m_k\}} \mathcal{C}_{\{l_k, m_k\}} \Lambda_{l_3 l_6}^{m_3 m_6 0} \times \\
&\quad \left[\delta_{l_3, l_6} + \left(1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l+3) \frac{R_1}{R_0} \right) \delta_{l_3+2, l_6} + \left(1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l-1) \frac{R_1}{R_0} \right) \delta_{l_3-2, l_6} \right].
\end{aligned}$$

Finalmente, temos que a expressão para a energia dipolar no limite de casca fina é

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

E assim, concluímos todos os cálculos das energias. Deste ponto podemos somar todos os resultados parciais de forma que a energia total

$$E_{total} = E_{bubble} + E_{Kin} + E_{\delta} + E_{dd}$$

pode ser minimizada numericamente. Note que uma vez estabelecidos todos os parâmetros relevantes do sistema restarão apenas os coeficientes $a_{l,m}$ a serem determinados. Como uma última observação, é simples notar que a energia total do sistema trata-se de um polinômio de ordem 4 dos coeficientes $a_{l,m}$ e, portanto, algoritmos simples de minimização podem ser aplicados. O método de minimização utilizado foi o método de ponto interior.⁴¹

4 RESULTADOS: ESTADO FUNDAMENTAL

Antes de apresentarmos os resultados será conveniente ganharmos um pouco de intuição sobre o nosso sistema, em particular, sua distribuição angular. Ao reconhecermos que o parâmetro de ordem deve exibir certas simetrias decorrentes da natureza das interações presentes, simplificações na expressão da energia total são não só possíveis como de grande conveniência no que concerne ao custo computacional requerido no processo de minimização.

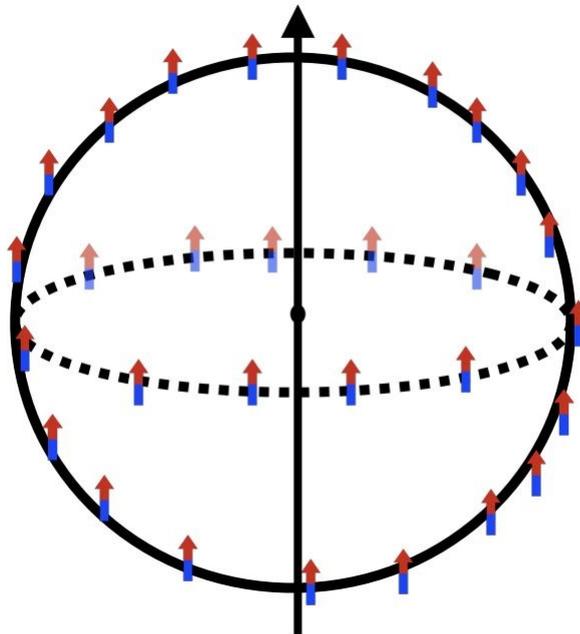


Figura 3 – Representação do *bubble* com os dipolos alinhados na direção z
Fonte: Elaborada pelo autor

Em todos os resultados obtidos nessa sessão utilizaremos os seguintes parâmetros:

- Massa atômica do disprósio : $M \approx 2,5 \times 10^{-25}$ kg
- Frequência de armadilhamento: $\omega_0 = 200 \times 2\pi$ Hz $\approx 1,2$ kHz
- Espessura da casca: $R_1 = a_{osc} \doteq \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_0}} \approx 5,7 \times 10^{-7}$ m
- Mínimo de potencial da armadilha : $R_0 = 20R_1 \approx 1,1 \times 10^{-5}$ m
- Número de átomos : $N = 10^4$

4.1 Simetrias

Sabe-se que tanto a interação de contato quanto a armadilha relacionam-se a potenciais isotrópicos e, portanto, se estas fossem as únicas interações presentes no sistema esperaríamos observar distribuições igualmente isotrópicas, isto é, esfericamente simétricas. Contudo, uma vez que estamos tratando de átomos que possuem momento de dipolo apreciável, é natural inferirmos que a configuração do estado fundamental apresentará anisotropia similar a do potencial de interação dipolar.

A primeira característica mais evidente é a de que V_{dd} apresenta simetria azimutal, ou seja, não depende de ϕ . Ora, visto que a distribuição angular se trata de uma combinação linear de harmônicos esféricos, da suposição de que esta reflete as simetrias de V_{dd} segue imediatamente que os coeficientes $a_{l,m}$ com $m \neq 0$ devem ser identicamente nulos, ou seja

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

Além disso, é igualmente simples notar que a interação de dipolo-dipolo também apresenta simetria de reflexão em torno do plano $z = 0$ e, à vista disso, devemos observar os coeficientes com índice l ímpar anularem-se

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

Para testar ambas hipóteses, minimizamos a energia sem restrição aos valores de l e m para $l \leq 4$ e foi observado que, de fato, *todos estes coeficientes são nulos*. Dessa forma, deste ponto em diante, consideraremos apenas coeficientes $a_{l,0}$ com l par ao invés de considerar $m \in [-l, l]$ para cada índice $l \in \mathbb{N}$ em todos os somatórios o que resultaria numa grande ineficiência computacional visto que a maioria dos termos calculados não contribuiria no valor da energia. Vale apontar também que, além destes últimos, outros termos anulam-se como consequência das propriedades dos símbolos de Wigner.

4.2 Critério de truncamento do ansatz

Conduziremos agora uma aproximação necessária na obtenção dos resultados numéricos por este método. Esta baseia-se no fato de que todas as somas presentes na expressão da energia são, em princípio, séries. Uma vez que, evidentemente, não é possível somarmos infinitos termos, precisamos de um critério para escolhermos um bom L_{max} a partir do qual contribuições irrelevantes na energia podem ser seguramente descartadas de maneira que a distribuição angular pode ser escrita como

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

O critério utilizado foi o de minimizar a energia para diferentes regimes de interação dipolar e para valores crescentes de L_{max} até o ponto em que o resultado deixa de variar.

A seguir, exibimos os valores mínimos de energia como função de L_{max} :

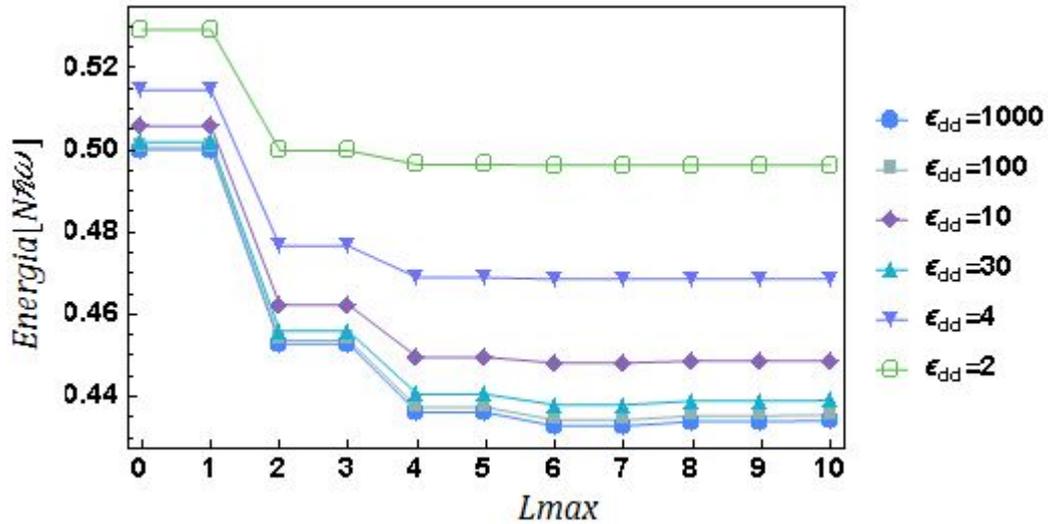


Figura 4 – Energia como função de L_{max}

Fonte: Elaborada pelo autor

Baseando-nos no gráfico acima concluímos que as contribuições com $L_{max} > 6$ deixam de ser relevantes para qualquer valor positivo de ϵ_{dd} . De fato, não há motivo para se esperar contribuições na energia para valores muito elevados de l dado que as interações possuem apenas componentes Y_0^0 e Y_2^0 , sendo sensível esperar $l = 0, 2$ como sendo os mais relevantes, de acordo com os resultados.

4.3 Distribuição Angular

Podemos finalmente observar o estado fundamental do sistema. A seguir, exibimos os resultados para o estado fundamental calculados para $L_{max} = 6$ em diversos regimes de interação dipolar. Como nosso ansatz define a distribuição radial como uma gaussiana centrada em R_0 e a distribuição azimutal é homogênea, mostramos apenas a distribuição ao longo de uma linha que percorre o ângulo polar θ .

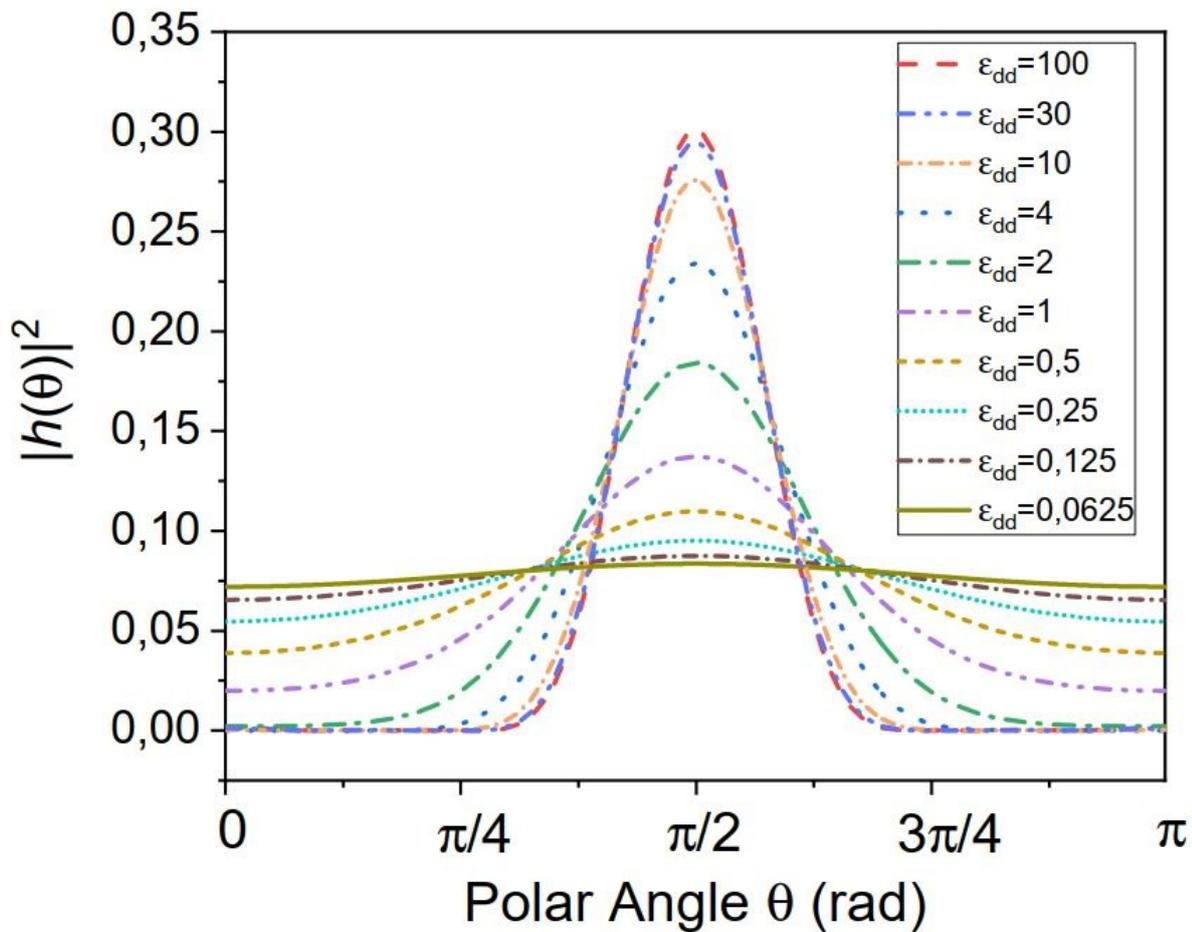


Figura 5 – Distribuição angular da densidade para diversos valores de ϵ_{dd}
 Fonte: Elaborada pelo autor

Veja que de acordo com que ϵ_{dd} se aproxima de zero temos que a distribuição angular tende a uma função constante assinalando o caráter isotrópico da distribuição de densidade do condensado no limite não dipolar. Ademais, à medida em que ϵ_{dd} aumenta observamos uma deformação contínua da distribuição angular até uma função pico centrada em $\theta = \pi/2$.

O motivo pelo qual se dá o estreitamento da distribuição angular é de simples compreensão: decorre da anisotropia da interação dipolar. Em primeiro lugar, sabemos que um par de dipolos dispostos lado a lado experienciam força de repulsão. Ora, visto que restringimos os dipolos a se orientarem paralelamente ao versor \hat{z} segue que átomos localizados nas redondezas dos pólos da superfície esférica, isto é, $\theta = \pi$ e $\theta = 0$, terão a proclividade de afastarem-se uns dos outros de forma que a partir de um certo valor de ϵ_{dd} a densidade tende a anular-se nestas regiões. Para mais, nas proximidades da região equatorial $\theta = \pi/2$ os dipolos tendem a configurar-se "um em cima do outro" de forma que a interação por eles experimentada tem agora caráter atrativo promovendo uma acomodação

em torno desta região. A figura abaixo ilustra estas situações:

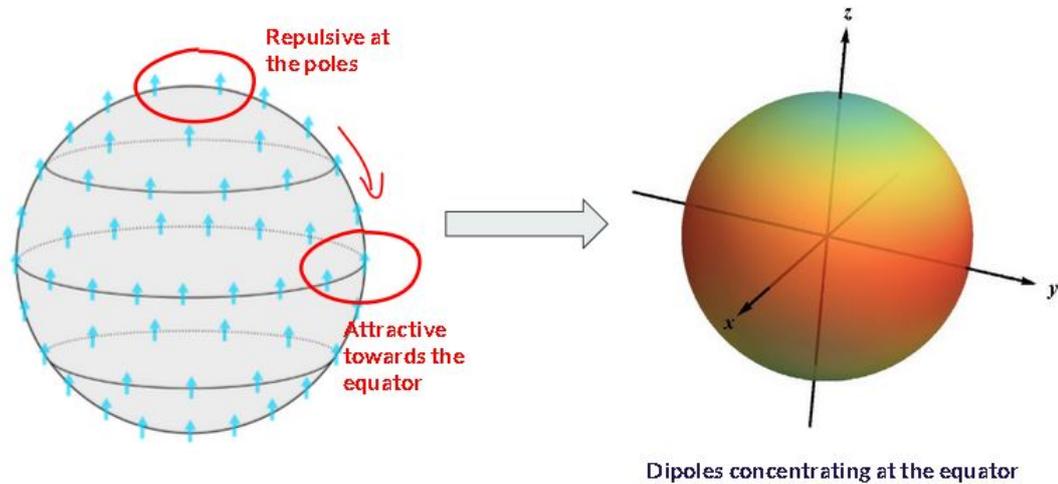


Figura 6 – Átomos se concentrando em torno do equador devido à interação de dipolo-dipolo

Fonte: Elaborada pelo autor

É importante salientarmos que tal comportamento da acomodação dos átomos em torno da região equatorial distingue-se do que ocorre em gases quânticos dipolares em armadilhas harmônicas dado que nestes últimos a nuvem atômica tende a alongar-se na direção de polarização. Logo, temos neste resultado uma demonstração da relevância da geometria nas propriedades de condensados dipolares.

Uma outra característica notável é a de que a largura da distribuição angular satura-se para regimes dipolares muito fortes. Note que as curvas correspondentes a $\epsilon_{dd} = 100$ e $\epsilon_{dd} = 1000$ são praticamente iguais, sugerindo assim a existência de uma largura mínima a partir da qual a aglomeração de átomos em torno do equador deixa de ser energeticamente favorável. Este efeito advém do caráter repulsivo da interação de dipolo-dipolo. Para mostrar que, de fato, este comportamento ocorre exclusivamente devido à interação dipolar, dedicaremos a próxima seção no desenvolvimento de um modelo simplificado cujo propósito consiste em reobter o efeito de saturação da espessura da nuvem para regimes fortemente dipolares.

4.4 Toy Model

O modelo consiste num BEC confinado em uma geometria quasi-bidimensional, onde a distribuição de densidade é homogênea na direção x e tem perfil gaussiano nas direções y e z , sendo y a direção mais confinada com largura β . Começaremos com uma faixa de tamanho $2L$ na direção x com o intuito de fazer $L \rightarrow \infty$ quando for conveniente.

Podemos entender, de forma pictórica, que este modelo é como se cortássemos a região "equatorial" do *bubble* e a "desenrolássemos" de forma a criar uma região planar. A figura a seguir ilustra este conceito

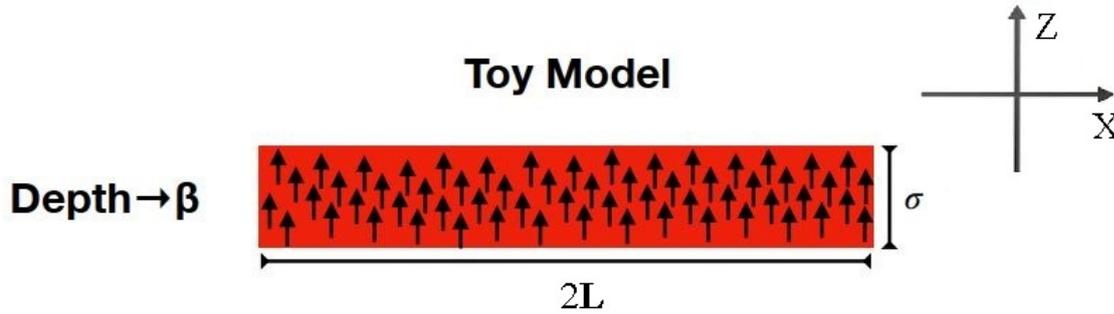


Figura 7 – Representação esquemática do nosso toy model
Fonte: Elaborada pelo autor

Para descrevermos este sistema, utilizaremos o ansatz

$$n(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathcal{A} \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right] \exp\left[-\frac{y^2}{2\beta^2}\right] & \text{se } x \in [-L, L] \\ 0 & \text{se } x \notin [-L, L] \end{cases}$$

A condição de normalização fica

$$\begin{aligned} N(L) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x n(\mathbf{x}) = \mathcal{A} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dz \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right]}_{\sqrt{2\pi}\sigma} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dy \exp\left[-\frac{y^2}{2\beta^2}\right]}_{\sqrt{2\pi}\beta} \underbrace{\int_{-L}^L dx}_{2L} \\ &= 4\pi\sigma\beta L\mathcal{A} \end{aligned}$$

Note que escolhemos denotar o número de partículas N como uma função de L . O motivo disso é o de que, como já dissemos, queremos que o sistema exiba densidade constante ao longo da direção x . Definimos, então, a densidade de átomos na direção x como sendo

$$\lambda \doteq \frac{N(L)}{L} = 4\pi\sigma\beta$$

e impomos a restrição de que λ é uma constante. Dessa definição segue que a constante de normalização é

$$\mathcal{A} = \frac{\lambda}{4\pi\sigma\beta}.$$

Seguiremos agora com o cálculo das energias do sistema, começando pela energia de interação dipolo-dipolo. Como já vimos, a maneira mais simples de efetuarmos esse cálculo é fazendo uso da expressão (3.9). Devemos, portanto, calcular a transformadas de Fourier da densidade do condensado:

$$\begin{aligned}
n(\mathbf{k}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x n(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
&= \mathcal{A} \int_{\mathbb{R}} dz \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right] e^{ik_z z} \int_{\mathbb{R}} dy \exp\left[-\frac{y^2}{2\beta^2}\right] e^{ik_y y} \int_{-L}^L e^{ik_x x} \\
&= \mathcal{A} \left(\sigma e^{-\sigma^2 k_z^2/2} \sqrt{2\pi}\right) \left(\beta e^{-\beta^2 k_y^2/2} \sqrt{2\pi}\right) \frac{2 \sin k_x L}{k_x} \\
&= \lambda e^{-\sigma^2 k_z^2/2} e^{-\beta^2 k_y^2/2} \times \frac{\sin k_x L}{k_x}
\end{aligned}$$

Note que $n(\mathbf{k})$ é uma função par, ou seja, $n(\mathbf{k}) = n(-\mathbf{k})$. Feito isso, podemos agora facilmente computar a expressão para a energia dipolar

$$\begin{aligned}
E_{dd} &= \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) n(\mathbf{k}) n(-\mathbf{k}) \\
&= \frac{1}{2(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k V_{dd}(\mathbf{k}) n(\mathbf{k})^2 \\
&= \frac{\lambda^2}{2(2\pi)^3} \frac{C_{dd}}{3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \left(\frac{3k_z^2}{k^2} - 1\right) e^{-\sigma^2 k_z^2} e^{-\beta^2 k_y^2} \times \frac{\sin^2 k_x L}{k_x^2}
\end{aligned}$$

Neste ponto, com o intuito de simular condições periódicas de contorno consideraremos $L \rightarrow \infty$. Com este fim, será útil definirmos a densidade de energia

$$\mathcal{U}_{dd} \doteq \frac{E_{dd}}{L}$$

donde segue que

$$\mathcal{U}_{dd} = \frac{\lambda^2}{2(2\pi)^3} \frac{C_{dd}}{3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \left(\frac{3k_z^2}{k^2} - 1\right) e^{-\sigma^2 k_z^2} e^{-\beta^2 k_y^2} \times \frac{\sin^2 k_x L}{k_x^2 L}$$

Perceba que a função senoidal presente no integrando da expressão acima trata-se de uma função pico. De fato, é possível demonstrar formalmente que vale a seguinte identidade

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\alpha x)}{x^2 \alpha} = \pi \delta(x).$$

Isto posto, é natural considerarmos a aproximação

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_{dd} &\approx \frac{\lambda^2}{2(2\pi)^3} \frac{C_{dd}}{3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k \left(\frac{3k_z^2}{k^2} - 1\right) e^{-\sigma^2 k_z^2} e^{-\beta^2 k_y^2} \times \pi \delta(k_x) \\
&= \frac{\lambda^2}{16\pi^2} \frac{C_{dd}}{3} \int_{\mathbb{R}^2} dk_z dk_y \left(\frac{3k_z^2}{k_z^2 + k_y^2} - 1\right) e^{-\sigma^2 k_z^2} e^{-\beta^2 k_y^2}
\end{aligned}$$

Esta última integral pode ser resolvida analiticamente, provendo a expressão para a energia de interação dipolar.

$$\mathcal{U}_{dd} \approx \frac{\lambda^2}{16\pi} \frac{C_{dd}}{3} \frac{2\beta - \sigma}{\sigma\beta(\sigma + \beta)}$$

Calcularemos agora a energia de contato. Temos

$$\begin{aligned} E_\delta &= \frac{g}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x n(\mathbf{x})^2 \\ &= \frac{g\mathcal{A}^2}{2} \int_{\mathbb{R}} dz e^{-z^2/\sigma^2} \int_{\mathbb{R}} dy e^{-y^2/\beta^2} \int_{-L}^L dx \\ &= \frac{g\lambda^2 L}{16\pi^2 \sigma^2 \beta^2} (\sigma\sqrt{\pi}) (\beta\sqrt{\pi}) \\ &= \frac{g\lambda^2 L}{16\pi\sigma\beta} \\ \therefore \mathcal{U}_\delta &\doteq \frac{E_\delta}{L} = \frac{g\lambda^2}{16\pi\sigma\beta} \end{aligned}$$

Por conseguinte, temos que a energia total de interação é

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{int} &= \mathcal{U}_\delta + \mathcal{U}_{dd} \\ &= \frac{g\lambda^2}{16\pi\sigma\beta} + \frac{\lambda^2}{16\pi} \frac{C_{dd}}{3} \frac{2\beta - \sigma}{\sigma\beta(\sigma + \beta)} \\ &= \frac{g\lambda^2}{16\pi} \left(\frac{1}{\sigma\beta} + \epsilon_{dd} \frac{2\beta - \sigma}{\sigma\beta(\sigma + \beta)} \right) \end{aligned}$$

Desejamos agora encontrar o valor de σ que minimiza a energia. Ora, basta resolvermos

$$\partial_\sigma \left(\frac{1}{\sigma\beta} + \epsilon_{dd} \frac{2\beta - \sigma}{\sigma\beta(\sigma + \beta)} \right) \Big|_{\sigma=\sigma_{min}} = 0$$

que resulta em

$$\sigma_{min} = \beta \left(\frac{1 + 2\epsilon_{dd} + \sqrt{3\epsilon_{dd}(1 + 2\epsilon_{dd})}}{\epsilon_{dd} - 1} \right)$$

É interessante notar que este resultado aponta a existência de uma relação linear de proporcionalidade entre o valor de σ_{min} e o valor de espessura β do quasi-plano. Além disso e, de maior importância para a nossa análise, é o fato de que a razão entre estas duas quantidades tende a um valor finito ao aplicarmos o limite de $\epsilon_{dd} \rightarrow \infty$, que é exatamente o resultado qualitativo que esperávamos obter. Outra característica que vale a pena salientar é de que σ_{min} só está definido para $\epsilon_{dd} > 1$, sendo que para $\epsilon_{dd} = 1$ encontramos uma divergência.

Com este resultado em mãos podemos agora compará-lo com os resultados numéricos. Para tal, fizemos a seguinte análise: primeiro, foi feito um ajuste gaussiano nas curvas correspondentes à distribuição angular do condensado na armadilha tipo bolha de maneira que para cada valor de ϵ_{dd} pudemos extrair a largura a meia altura de cada uma dessas gaussianas, sendo estas representativas da espessura angular do condensado *bubble* em todos os regimes dipolares considerados. Com estes valores, foi feito um gráfico da largura à meia altura em unidades de $\pi \times FWHM$ versus ϵ_{dd} . A estes pontos foram sobrepostos os resultados para σ_{min} que acabamos de obter para o quasi-plano dipolar. Feitas as devidas adaptações, isto é, convertendo σ_{min} em unidades adequadas e identificando $\beta = R_1$ obtemos os seguintes resultados

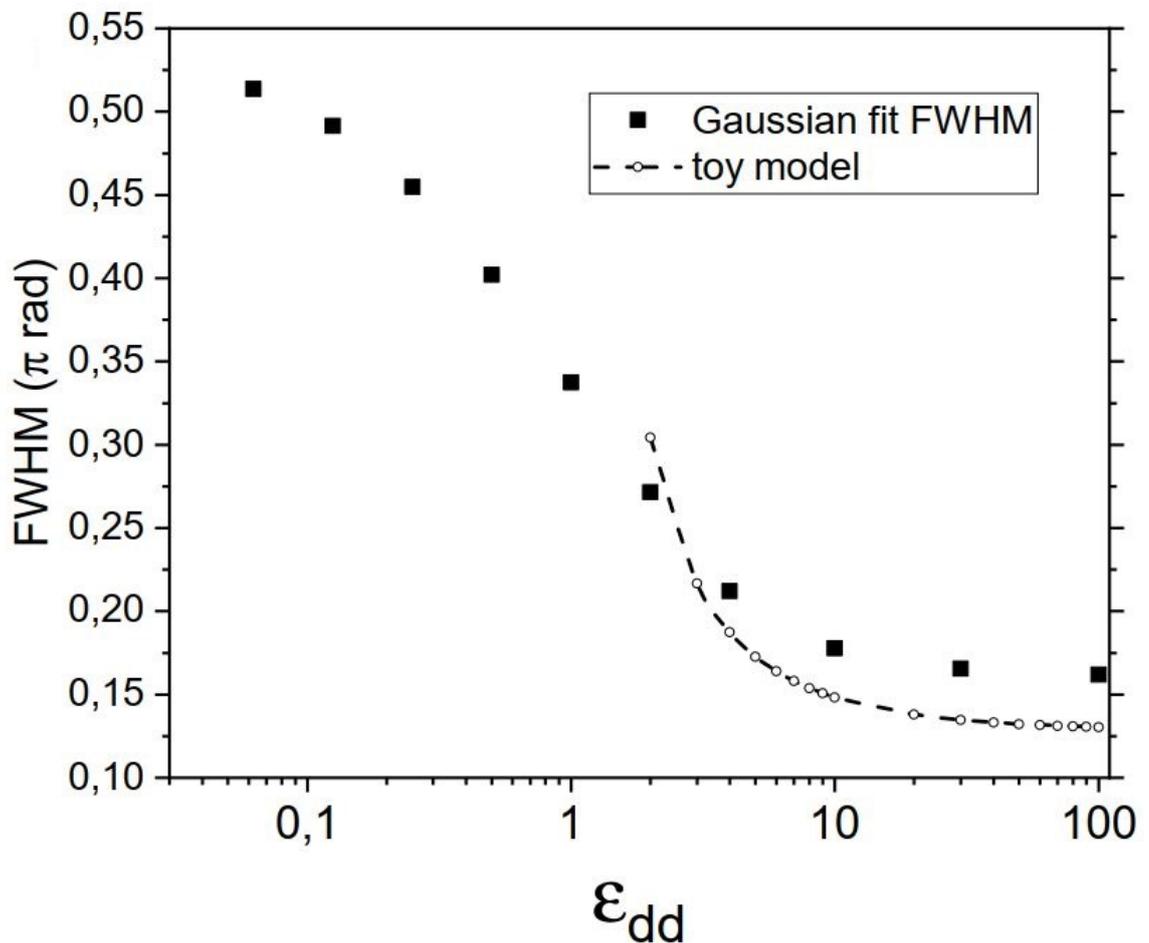


Figura 8 – Comparando os resultados do *toy model* com o *bubble* dipolar
 Fonte: Elaborada pelo autor

Vemos assim que este modelo simplificado não só concorda qualitativamente com os resultados do *bubble* como também apresenta boa concordância quantitativa, sendo que a pequena discrepância encontrada é naturalmente justificada pela diferença das

características geométricas dos dois objetos em questão, o plano e a esfera, uma vez que, obviamente, quanto maior for a espessura angular do condensado na superfície esférica pior é a aproximação deste para um segmento plano.

Concluimos então que o fenômeno de saturação da espessura do condensado não se restringe apenas ao caso do *bubble*, mas apresenta-se também numa geometria planar. Ademais, devido à concordância quantitativa presente nos dois casos, inferimos que tal comportamento advém da natureza dipolar das interações. É natural esperarmos tal saturação, dado que a interação de dipolo-dipolo possui tanto caráter repulsivo como atrativo e, portanto, não seria energeticamente favorável o colapso do condensado na região equatorial. Em outras palavras, a estabilização da espessura angular do condensado nada mais é que uma consequência do balanceamento espontâneo dos caracteres atrativos e repulsivos presentes em interações dipolares.

Terminamos, assim, todas as considerações a serem feitas a respeito do estado fundamental do sistema. Dedicaremos o restante dessa dissertação ao cálculo e análise de alguns modos de vibração do nosso sistema, levando em conta como estes se modificam concomitantemente à interação dipolar.

5 MODOS COLETIVOS

5.1 Descrição do Método

Tendo em mãos o estado fundamental do sistema podemos utilizá-lo na obtenção de frequências correspondentes a certos modos coletivos de oscilação em torno do equilíbrio. Para este fim utilizaremos o método denominado *Linear Response Function*, sendo este válido no caso de modos de baixa energia. A seguir discorreremos brevemente acerca da metodologia. Mais detalhes do formalismo podem ser encontrados em.^{42,43} Primeiramente, será conveniente expressarmos o operador hamiltoniano da seguinte maneira

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

onde o índice i identifica o i -ésimo átomo e V_{dd} é o potencial de interação dipolo-dipolo, dado por

$$V_{dd}(\mathbf{x}) = \frac{3g\epsilon_{dd}}{4\pi|\mathbf{x}|^3} \left(1 - 3 \frac{z^2}{|\mathbf{x}|^2} \right).$$

Denotaremos os autoestados do sistema por $|n\rangle$, de forma que a equação de autovalores é

$$\hat{\mathbf{H}} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad : \quad E_n \leq E_{n+1} \quad \forall n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$$

e utilizaremos a notação usual para a frequência de transição entre dois estados $\hbar\omega_{mn} \equiv E_m - E_n$. Consideremos agora um operador de excitação arbitrário F , a partir do qual definimos o p -ésimo momento de excitação como sendo

$$m_p \equiv \sum_n |\langle 0|F|n\rangle|^2 (\hbar\omega_{n0})^p.$$

O primeiro passo para o entendimento do método a ser utilizado é reconhecer que como $\omega_{10} \leq \omega_{n0} \quad \forall n \leq 1$ por construção, temos que a razão entre os momentos m_3 e m_1 é, a menos de um fator multiplicativo, sempre maior ou igual ao quadrado da frequência de excitação do estado fundamental ao primeiro estado excitado, isto é

$$\omega_{10}^2 \leq \omega_{10}^2 \frac{|\langle 0|F|1\rangle|^2 + \sum_{n \neq 1} |\langle 0|F|n\rangle|^2 (\omega_{n0}/\omega_{10})^3}{|\langle 0|F|1\rangle|^2 + \sum_{n \neq 1} |\langle 0|F|n\rangle|^2 (\omega_{n0}/\omega_{10})} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{m_3}{m_1}$$

e portanto é natural definirmos a quantidade

$$\hbar\omega^{upper} = \sqrt{\frac{m_3}{m_1}}$$

como representando um limite superior para a energia de excitação E_{10} correspondente ao operador F . Saliento que embora a quantidade ω^{upper} não seja rigorosamente idêntica à frequência de excitação a realidade é que seus valores apresentam excelente concordância com os cálculos hidrodinâmicos e medições experimentais para gases quânticos com e sem interação de dipolo-dipolo aprisionados em armadilhas harmônicas. Com base nisso, identificaremos ω^{upper} com a frequência real de excitação. Contudo, perceba que para calcularmos o momento m_p segundo sua definição precisamos ter conhecimento de todos os estados $|n\rangle$ e suas respectivas energias, de forma que tal procedimento é, em geral, impraticável. Felizmente, foi demonstrado⁴² que podemos reescrever os momentos m_1 e m_3 da seguinte forma:

$$m_1 = \frac{1}{2}\langle 0|[F^\dagger, [H, F]]|0\rangle$$

$$m_3 = \frac{1}{2}\langle 0|[[F^\dagger, H], [H, [H, F]]]|0\rangle$$

Assim, os únicos objetos necessários na obtenção dos momentos de excitação e, consequentemente, de ω^{upper} são o estado fundamental, o operador hamiltoniano e o operador de excitação. Agora, estando estabelecidas as bases metodológicas, podemos prosseguir com os cálculos para as frequências de interesse.

5.2 Modo de Monopolo

Começaremos pelo padrão de oscilação mais simples, o modo de monopolo. Este modo corresponde à contrações e expansões do condensado ao longo das três direções espaciais que se dão de forma que a simetria esférica do sistema é preservada para qualquer instante de tempo. Por este motivo, este modo também é informalmente conhecido como "breathing mode". O correspondente operador hermitiano de excitação é simplesmente

$$F_0 = \sum_i r_i^2.$$

Prosseguiremos agora com os cálculos dos momentos de excitação relacionados a este operador. A fim de obtermos o momento m_1 precisamos primeiro calcular o comutador

$$[H, F_0] = \frac{1}{2M} \sum_i [\mathbf{p}_i^2, r_i^2] = -\frac{2i\hbar}{M} \sum_i \left\{ \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{p}_i + \frac{\hbar}{2i} \right\}$$

Feito isso, basta calcularmos

$$\begin{aligned} [F_0^\dagger, [H, F_0]] &= \frac{2i\hbar}{M} \sum_i \mathbf{x}_i \cdot [\mathbf{p}_i, r_i^2] \\ &= \frac{2i\hbar}{M} (-2i\hbar) \sum_i \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_i \\ &= \frac{4\hbar^2}{M} \sum_i r_i^2 \end{aligned}$$

donde segue que m_1 é

$$m_1 = \frac{1}{2} \langle [F_0^\dagger, [H, F_0]] \rangle = \frac{2\hbar^2}{M} \sum_i \langle r_i^2 \rangle = \frac{2\hbar^2}{M} N \langle r^2 \rangle$$

que no limite de casca fina se reduz a

$$m_1 \approx \frac{2\hbar^2}{M} N r_0^2$$

Perceba que neste cálculo não foi necessário considerar o potencial de armadilha dado que este possui apenas dependência espacial e, por conseguinte, comuta com o operador de excitação. Já para o momento m_3 , este não é o caso. Precisamos do comutador

$$\begin{aligned} [H, [H, F_0]] &= -\frac{2i\hbar}{M} \left[\sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2M} + \frac{1}{2} M\omega^2 (r_i - r_0)^2 + g \sum_{j<i} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right), \sum_k \mathbf{x}_k \cdot \mathbf{p}_k \right] \\ &= -\frac{2i\hbar}{M} \left(\frac{1}{2M} \sum_i [\mathbf{p}_i^2, \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{p}_i] - \frac{1}{2} M\omega^2 \sum_i \mathbf{x}_i \cdot [\mathbf{p}_i^2, (r_i - r_0)^2] \right. \\ &\quad \left. - g \sum_{i<j} (\mathbf{x}_i \cdot [\mathbf{p}_i, \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)] + \mathbf{x}_j \cdot [\mathbf{p}_j, \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)]) \right) \\ &= \frac{2\hbar^2}{M} \left(-\frac{1}{M} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + M\omega^2 \sum_i (r_i^2 - r_i r_0) + g \sum_{i<j} \sum_k (\mathbf{x}_k \cdot \nabla_k \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) \right) \end{aligned}$$

Consequentemente

$$\begin{aligned} [[F_0^\dagger, H], [H, [H, F_0]]] &= \frac{4\hbar^3}{M^2} i \left(\frac{1}{M} \sum_i [\mathbf{p}_i^2, \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{p}_i] + M\omega^2 \sum_i \mathbf{x}_i \cdot [\mathbf{p}_i, (r_i - r_0)^2] \right. \\ &\quad \left. + g \sum_{i<j} \sum_{k,l} (\mathbf{x}_i \cdot [\mathbf{p}_i, \mathbf{x}_k \cdot \nabla_k \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)]) \right) \\ &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left(\frac{2}{M} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + M\omega^2 \sum_i (2r_i^2 - r_0 r_i) \right. \\ &\quad \left. + g \sum_{i<j} \sum_{k,l} \{ \mathbf{x}_i \cdot \nabla_l (\mathbf{x}_k \cdot \nabla_k \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) \} \right) \\ &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left(\frac{2}{M} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + M\omega^2 \sum_i (2r_i^2 - r_0 r_i) \right. \\ &\quad \left. + g \sum_{i<j} \{ (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla \left((\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right) \} \right) \end{aligned}$$

Observando esse resultado, constatamos que o momento m_3 é dado por

$$m_3 \doteq \frac{1}{2} \langle [[F_0^\dagger, H], [H, [H, F_0]]] \rangle = \frac{2\hbar^4}{M^2} (4\langle T \rangle + 2M\omega^2 N \langle r^2 \rangle - M\omega^2 r_0 \langle r \rangle + I)$$

Onde

$$\begin{aligned} I &= g \sum_{i < j} \int d^3 x_i n(\mathbf{x}_i) \int d^3 x_j n(\mathbf{x}_j) [(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla ((\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j))] \\ &= g \sum_{i < j} \int d^3 R \int d^3 X n(\mathbf{R} + \mathbf{X}/2) n(\mathbf{R} - \mathbf{X}/2) [\mathbf{X} \cdot \nabla (\mathbf{X} \cdot \nabla \delta(\mathbf{X}))] \end{aligned}$$

sendo $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j)$ a coordenada de centro de massa e $\mathbf{X} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ a coordenada relativa. Deixaremos o tratamento desta integral para o apêndice visto que as manipulações necessárias para tal são demasiadamente extensas. Somando os resultados (B.6) e (B.8) do Apêndice B, temos que

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

Substituindo o resultado acima na expressão de m_3 obtemos

$$m_3 = \frac{2\hbar^4}{M^2} \left[4\langle T \rangle + M\omega^2 N (2\langle r^2 \rangle - r_0 \langle r \rangle) + 9\langle H_s \rangle \right].$$

Desejamos agora aplicar o limite de casca fina. Como base na experiência adquirida ao calcularmos os termos de energia é simples notar que, neste limite, $\langle r^n \rangle \approx r_0^n \forall n \in \mathbb{N}$. Logo, temos que

$$m_3 \approx \frac{2\hbar^4}{M^2} \left[4\langle T \rangle + M\omega^2 N r_0^2 + 9\langle H_s \rangle \right]$$

E assim, podemos escrever a expressão para a frequência de excitação de monopolo no limite de casca fina:

$$\omega_{mon} \doteq \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m_3}{m_1}} \approx \omega \sqrt{\frac{4\langle T \rangle + M\omega^2 N r_0^2 + 9\langle H_s \rangle}{NM r_0^2 \omega^2}}.$$

Neste ponto devemos salientar que apesar de termos realizado os cálculos levando em consideração apenas a interação de contato podemos simplesmente substituir $\langle H_s \rangle$ por $\langle H_s + H_{dd} \rangle$ no resultado final. Em vista disso, temos que a frequência de monopolo do bubble dipolar é dada por

$$\omega_{mon} \doteq \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m_3}{m_1}} \approx \omega \sqrt{\frac{4\langle T \rangle + M\omega^2 N r_0^2 + 9\langle H_{int} \rangle}{NM r_0^2 \omega^2}}.$$

5.3 Modo de Dipolo

Consideraremos agora oscilações do centro de massa do condensado nas três direções espaciais, x, y e z . Os correspondentes operadores hermitianos de excitação são

$$F_{x_\alpha} \propto \sum_i (x_\alpha)_i$$

com $\alpha = x, y, z$. Notavelmente, sabe-se que as frequências associadas ao modo de dipolo independem das interações interatômicas. Ora, assim como nos cálculos do modo de monopolo, é evidente que os comutadores associados a m_1 independem da interação visto que estes contém apenas operadores espaciais. Já nos comutadores relacionados a m_3 isso não é tão direto. Todavia, ao realizarmos o cálculo direto de $[H_{int}, [H_{int}, F]]$ vemos que

$$\begin{aligned} -\frac{i\hbar}{M} \left[\sum_{i<j} V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \sum_k p_{x_k} \right] &= \frac{i\hbar}{M} \sum_{i<j;k} [p_{x_k}, V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)] \\ &= \frac{\hbar^2}{M} \sum_{i<j;k} \frac{\partial}{\partial x_k} (V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) \\ &= \frac{\hbar^2}{M} \sum_{i<j} \left[\sum_k (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \frac{\partial}{\partial X} V(\mathbf{X}) \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

onde o somatório em k trivialmente se anula no último passo, pois há um termo com $k = i$ e um com $k = j$. Assim sendo, podemos ignorar os termos de interação nos cálculos referentes a este modo. Seguiremos agora com o cálculo de m_1 para oscilações na direção x . Temos

$$\begin{aligned} [H, F_x] &= \frac{1}{2M} \sum_i [p_{x_i}^2, x_i] = -\frac{i\hbar}{M} \sum_i p_{x_i} \\ [F_x^\dagger, [H, F_x]] &= \frac{i\hbar}{M} \sum_i [p_{x_i}, x_i] = \frac{\hbar^2}{M} N \\ \therefore m_1 &\equiv \frac{1}{2} \langle [F_0^\dagger, [H, F_0]] \rangle = \frac{N\hbar^2}{2M} \end{aligned}$$

E agora, para calcularmos m_3 precisamos do comutador

$$\begin{aligned}
[H, [H, F]] &= \frac{i\hbar\omega^2}{2} \sum_i [p_{x_i}, (r_i - r_0)^2] \\
&= \hbar^2\omega^2(r_i - r_0) \frac{x_i}{r_i} \\
&= \hbar^2\omega^2\left(1 - \frac{r_0}{r_i}\right)x_i
\end{aligned}$$

donde segue que

$$\begin{aligned}
[[F^\dagger, H], [H, [H, F]]] &= \frac{i\hbar^3\omega^2}{M} \sum_i \left([p_{x_i}, x_i] - r_0 [p_{x_i}, \frac{x_i}{r_i}] \right) \\
&= \frac{\hbar^4\omega^2}{M} \sum_i \left(1 - r_0 \frac{r_i^2 - x_i^2}{r_i^3} \right) \\
&= \frac{\hbar^4\omega^2}{M} \left(N - r_0 \sum_i \frac{y_i^2 + z_i^2}{r_i^3} \right) \\
&= \frac{\hbar^4\omega^2}{M} (N - J_x)
\end{aligned}$$

sendo que utilizamos a definição

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

Disto segue que o momento m_3 é

$$m_3 = \frac{1}{2} \langle [[F_x^\dagger, H], [H, [H, F_x]]] \rangle = \frac{N\hbar^4\omega^2}{2M} \left(1 - \frac{1}{N} \langle 0 | J_x | 0 \rangle \right)$$

e portanto temos que a frequência de excitação é dada por

$$\hbar^2\omega_x^2 = \frac{m_3}{m_1} \Rightarrow \omega_x = \omega \left(1 - \frac{1}{N} \langle 0 | J_x | 0 \rangle \right)^{1/2}$$

Evidentemente, podemos generalizar o resultado para oscilações em y e z , bastando substituir o operador J_x por J_α ($\alpha = x, y, z$), definido por

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

Note que, em todos os casos, a frequência de oscilação é estritamente menor que a frequência da armadilha ($\omega_x, \omega_y, \omega_z < \omega$). Além disso, em virtude da simetria azimutal do estado fundamental, temos que $\omega_x = \omega_y$, mas espera-se, em geral, que ω_z seja distinta das outras duas.

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

Esse modo corresponde a uma excitação em que a componente z permanece estática, enquanto as componentes x e y expandem e contraem fora de fase e, em face deste caráter essencialmente bidimensional, nomearemos este modo de "modo de quadrupolo 2D". O operador associado é da forma

$$F_{|m|=2} = \sum_i \left[\left((\omega + \delta\omega)^2 - \omega^2 \right) x_i^2 + \left((\omega - \delta\omega)^2 - \omega^2 \right) y_i^2 \right] \approx 2\omega \delta\omega \sum_i (x_i^2 - y_i^2)$$

Ignorando constantes multiplicativas temos:

$$F_{|m|=2} = \sum_i (x_i^2 - y_i^2)$$

Façamos agora os cálculos dos comutadores. Temos

$$\begin{aligned} [H, F] &= \frac{1}{2M} \sum_i \left([p_{x_i}^2, x_i^2] - [p_{y_i}^2, y_i^2] \right) \\ &= -\frac{2i\hbar}{M} \sum_i (x_i p_{x_i} - y_i p_{y_i}) \\ [F^\dagger, [H, F]] &= \frac{2i\hbar}{M} \sum_i \left(x_i [p_{x_i}, x_i^2] + y_i [p_{y_i}, y_i^2] \right) \\ &= \frac{4\hbar^2}{M} \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \end{aligned}$$

de maneira que o momento m_1 é

$$m_1 \equiv \frac{1}{2} \langle [F^\dagger, [H, F]] \rangle = \frac{2\hbar^2}{M} \left\langle \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \right\rangle$$

que, ao reconhecermos a simetria azimutal do sistema, reduz-se a

$$m_1 = \frac{4\hbar^2}{M} N \langle x^2 \rangle$$

Já os demais comutadores são

$$\begin{aligned}
[H, [H, F]] &= -\frac{2i\hbar}{M} \left[\sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 r_i^2 + g \sum_{j<i} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right), \sum_k (x_k p_{x_k} - y_k p_{y_k}) \right] \\
&= -\frac{2i\hbar}{M} \left\{ \frac{1}{2M} \sum_i \left([p_{x_i}^2, x_i p_{x_i}] - [p_{y_i}^2, y_i p_{y_i}] \right) - \frac{1}{2}M\omega^2 \sum_i \left(x_i [p_{x_i}, x_i^2] - y_i [p_{y_i}, y_i^2] \right) \right. \\
&\quad \left. - g \sum_{i<j} \sum_k \left(x_k [p_{x_k}, \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)] - y_k [p_{y_k}, \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)] \right) \right\} \\
&= \frac{2\hbar^2}{M} \left\{ -\frac{1}{2M} \sum_i (p_{x_i}^2 - p_{y_i}^2) + M\omega^2 \sum_i (x_i^2 - y_i^2) \left(1 - \frac{r_0}{r_i} \right) \right. \\
&\quad \left. + g \sum_{i<j} \left(X \frac{\partial}{\partial X} \delta(\mathbf{X}) - Y \frac{\partial}{\partial Y} \delta(\mathbf{X}) \right) \right\}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
[[F^\dagger, H], [H, [H, F]]] &= \frac{4i\hbar^3}{M^2} \left[\sum_k (x_k p_{x_k} - y_k p_{y_k}), \sum_i \left\{ \frac{1}{M} (p_{x_i}^2 - p_{y_i}^2) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + M\omega^2 (x_i^2 - y_i^2) + g \sum_{i<j} \left(X \frac{\partial}{\partial X} \delta(\mathbf{X}) - Y \frac{\partial}{\partial Y} \delta(\mathbf{X}) \right) \right\} \right] \\
&= \frac{4i\hbar^3}{M^2} \left\{ \frac{1}{M} \sum_i \left([p_{x_i}^2, x_i p_{x_i}] + [p_{y_i}^2, y_i p_{y_i}] \right) + M\omega^2 \sum_i \left(x_i [p_{x_i}, x_i^2] + y_i [p_{y_i}, y_i^2] \right) \right. \\
&\quad \left. + g \sum_{i<j} \left(X [P_X, X \frac{\partial}{\partial X} \delta(\mathbf{X})] + Y [P_Y, Y \frac{\partial}{\partial Y} \delta(\mathbf{X})] - \text{crossterms} \right) \right\} \\
&= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left\{ \frac{2}{M} \sum_i (p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2) + 2M\omega^2 \sum_i \left[r_{i\perp}^2 \left(1 - \frac{r_0}{r_i} \right) + r_0 \frac{x_i^2 - y_i^2}{2r_i^3} \right] \right. \\
&\quad \left. + g \sum_{i<j} \left(X \frac{\partial}{\partial X} [X \frac{\partial}{\partial X} \delta(\mathbf{X})] + Y \frac{\partial}{\partial Y} [Y \frac{\partial}{\partial Y} \delta(\mathbf{X})] - 2XY \frac{\partial^2}{\partial X \partial Y} \delta(\mathbf{X}) \right) \right\}
\end{aligned}$$

onde $r_{i\perp}^2 = x_i^2 + y_i^2$. Note que, pela simetria azimutal do problema, o valor médio do último termo se anula, de maneira que ele não contribui para m_3 . Acrescente-se, ainda, que o mesmo argumento aplica-se para termos de interação dipolar e, em virtude disso, não precisamos considerá-lo. Temos então que m_3 vale

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

que no limite de casca fina fica

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

Segue que a frequência de excitação para o modo de quadrupolo 2D é

$$\omega_{|m|=2} \approx 2\sqrt{\frac{\langle T_{\perp} \rangle}{NM\langle x^2 \rangle}}$$

5.5 Modo de Quadrupolo 3D (m=0)

Por fim, o último modo de oscilação que consideraremos será o modo de quadrupolo 3D, correspondente ao movimento de expansão e contração do condensado na direções x, y acompanhados de expansões e contrações na direção axial z em oposição de fase e de diferente amplitude. Neste ponto é importante ressaltar que na ausência de simetria esférica, que é removida pela interação de dipolo-dipolo, existe um acoplamento entre o modo de quadrupolo 3D e o modo de monopolo. Para transpormos essa dificuldade seguimos o procedimento feito em,⁴⁴ que consiste basicamente em escrever um operador de excitação mais geral que engloba os dois modos, como será exibido a seguir. A parte radial, isto é, as componentes simétricas x, y do operador são escritas como

$$F_{\perp} = \frac{M}{2} \sum_i [(\omega + \delta\omega)^2 - \omega^2] (x_i^2 + y_i^2) \approx M\omega \delta\omega \sum_i (x_i^2 + y_i^2).$$

Já a parte axial é

$$F_z \approx M\omega \delta\omega \sum_i (-\alpha z_i^2)$$

sendo o papel da constante α o de diferenciar a amplitude relativa das oscilações radial e axial. Tal parâmetro será determinado *a posteriori* de modo que ao maximizarmos a expressão final para a frequência em relação a α obtemos a frequência de monopolo e, analogamente, ao minimizarmos em relação a α obtemos a frequência de quadrupolo 3D. Aponto aqui que embora exibiremos somente o resultado numérico do processo de minimização, a frequência de monopolo também foi obtida por este método e os resultados são essencialmente os mesmos obtidos segundo o procedimento descrito na [seção 5.2](#).

Sendo assim, podemos agora somar as duas partes, ignorando constantes multiplicativas, obtendo

$$F_{m=0} = \sum_i (x_i^2 + y_i^2 - \alpha z_i^2)$$

Ao contrário dos outros modos, não exibiremos aqui o cálculo dos comutadores associados a este operador visto que as resultantes expressões são por demais extensas e,

ainda, decorrem do mesmo algoritmo utilizado para os demais casos. A expressão para a frequência do modo de quadrupolo 3D resulta em

$$\omega_{|m|=0} \approx \omega_0 \sqrt{\frac{4(2\langle T_{\perp} \rangle + \alpha^2 \langle T_z \rangle) + 2M\omega_0^2 N(2\langle x^2 \rangle + \alpha^2 \langle z^2 \rangle - \langle \Omega \rangle) + 4(\alpha/2 - 1)^2 \langle V_{int} \rangle}{2M\omega_0^2 N(\langle x^2 \rangle + \alpha^2 \langle z^2 \rangle)}}$$

onde

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

Concluimos assim todos os cálculos teóricos relativos às frequências de excitação. Podemos agora contemplar os resultados.

6 RESULTADOS: FREQUÊNCIAS DOS MODOS COLETIVOS

6.1 Modos de quadrupolo

A seguir exibimos os resultados para as frequências de três modos coletivos. A linha pontilhada preta representa o modo de monopolo e a linha contínua preta o modo de quadrupolo 3D. Visto que para regimes não dipolares espera-se que estas frequências sejam da ordem da frequência de armadilhamento escolhemos representar o eixo vertical como ω/ω_0 , sendo este o eixo vertical à esquerda na imagem. Já para a frequência de quadrupolo 2D escolhemos utilizar valores absolutos de frequência dado que este modo de oscilação exibe frequências muito menores que ω_0 na armadilha *bubble*, como discutiremos sem demora. Para mais, em todos os casos o eixo horizontal representa ϵ_{dd}^{-1} de forma que pontos à direita correspondem ao regime não dipolar enquanto que pontos próximos da origem correspondem a $\epsilon_{dd} \rightarrow \infty$.

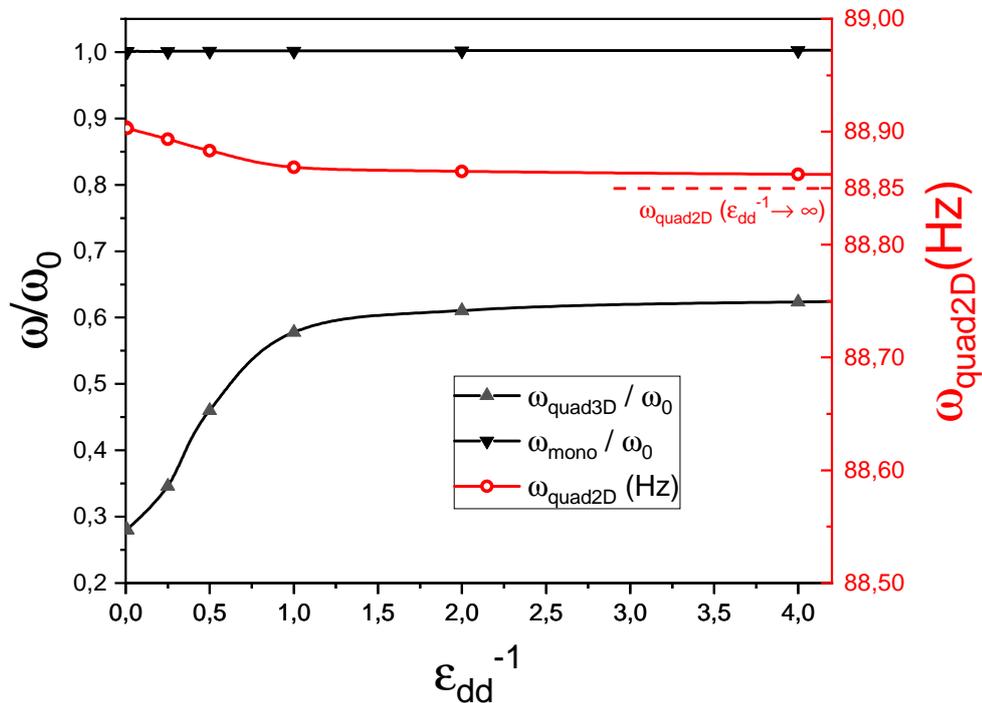


Figura 9 – Frequências dos modos de quadrupolo e do modo de monopolo

Fonte: Elaborada pelo autor

Começaremos discutindo o modo de quadrupolo 2D. Certamente, o aspecto mais notável a respeito deste modo é o de que sua frequência é substancialmente menor do

que a frequência de armadilhamento uma vez que tais valores tão baixos não ocorrem em geometrias convencionais, como a da armadilha harmônica cujos modos apresentam frequências da ordem de ω_0 . De fato, foi demonstrado³³ que ao utilizarmos o formalismo hidrodinâmico para o caso de uma casca fina não dipolar de espessura finita observamos o surgimento de modo coletivos puramente angulares e de baixas frequências dadas por

$$\frac{\omega(l)}{\omega_0} = \frac{R_1}{R_0} \sqrt{l(l+1)/3},$$

onde a frequência de quadrupolo, com $l = 2$, resulta em aproximadamente $88,8 Hz$ em excelente concordância com os resultados numéricos do *bubble* no limite não dipolar, como pode ser observado no gráfico.

É interessante ressaltar que tais modos de baixa frequência não só não ocorrem em armadilhas harmônicas como também não ocorrem no caso em que a espessura da casca tende a zero, como pode ser facilmente verificado na expressão acima. Assim, tais modos de vibração ocorrem exclusivamente em condensados em forma de casca fina, porém de espessura finita. Temos neste resultado, portanto, uma fascinante demonstração da relevância que a geometria pode exercer nas propriedades de gases quânticos assim como uma confirmação teórica da existência desse tipo de fenômeno não trivial por meio de uma metodologia alternativa à hidrodinâmica. Como uma última observação acerca deste modo, aponto que a detecção da influência da interação dipolar neste não é promissora visto que a variação de sua frequência como função de ϵ_{dd} é sutil.

Passemos agora para o modo de monopolo. Vemos que este de fato exibe frequências muito próximas da frequência da armadilha, com desvios de até 1 por cento, em boa concordância com os resultados obtidos³³ para o *bubble* não dipolar, este estando representado como a linha pontilhada logo abaixo dos pontos do monopolo. Assim como o modo de quadrupolo 2D, embora exista uma variação da frequência de monopolo que acompanha a mudança na força de interação dipolar, esta é muito tênue e, portanto, este modo não é um bom candidato para a detecção de interação dipolar em BECs. No entanto, é necessário enfatizar que a diminuição da frequência de monopolo que acompanha o aumento da força de interação dipolar é um comportamento notavelmente diferente do que ocorre em gases quânticos dipolares em armadilhas harmônicas visto que, neste casos, a frequência de monopolo é sempre maior para um gás dipolar do que para um gás não dipolar.

Por fim, vemos que o modo de quadrupolo 3D distingui-se dos outros dois modos apresentados no que concerne à influência da interação dipolar: no limite não dipolar observamos uma frequência muito menor do que a frequência da armadilha, em contraste com o que ocorre em armadilhas harmônicas. Além disso, este modo exibe uma variação substancial de acordo com que ϵ_{dd} aumenta, marcando um sinal claro da interação dipolar e,

por isto, concluímos que este modo é o mais promissor com respeito à detecção da interação de dipolo-dipolo em condensados de Bose-Einstein em armadilhas *bubble*. Infelizmente, neste caso não temos cálculos hidrodinâmicos para comparar nossos resultados.

Acreditamos que as variações nas frequências que acompanham a mudança na interação dipolar se tratem principalmente de um efeito geométrico. Explicaremos em detalhes o porque disso, mas antes, será instrutivo olharmos para os resultados dos modos de dipolo uma vez que que nestes a interpretação geométrica é de entendimento mais simples que nos demais casos.

6.2 Modos de dipolo

Exibimos a seguir um gráfico contendo duas curvas: a curva preta corresponde a oscilações do centro de massa do condensado nas direções x, y que, pela simetria azimutal do sistema, coincidem, e a curva vermelha corresponde a oscilações do centro de massa na direção z .

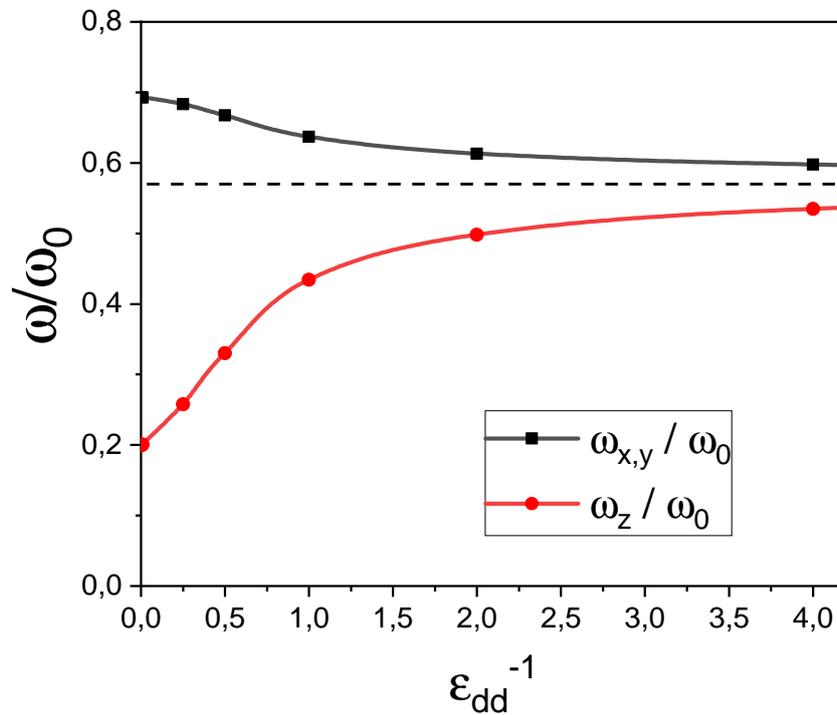


Figura 10 – Frequências dos modos de dipolo
Fonte: Elaborada pelo autor

Note que devido às simetrias do sistema os modos em x, y se diferenciam fortemente do modo de oscilação em z . Os modos radiais tendem a apresentar uma frequência

crescente com o aumento da interação dipolar enquanto que o modo em z apresenta uma frequência decrescente. Naturalmente, os dois modos tendem a coincidir no regime não-dipolar dado que, neste caso, o sistema passa a ser esfericamente simétrico e não temos, portanto, nenhuma direção espacial privilegiada. Como já aludimos na seção anterior, tal efeito se dá por motivos geométricos, e a explicação é a seguinte: como já vimos, o aumento da interação dipolar causa um estreitamento da densidade do condensado em torno da região equatorial da superfície esférica. Por outro lado, temos um armadilhamento isotrópico e, conseqüentemente, a força restauradora causada pelo aprisionamento é esfericamente radial em todos os pontos do condensado. A mistura destas duas características é o que dá a variação nas frequências de oscilação, como ilustrado na figura a seguir:

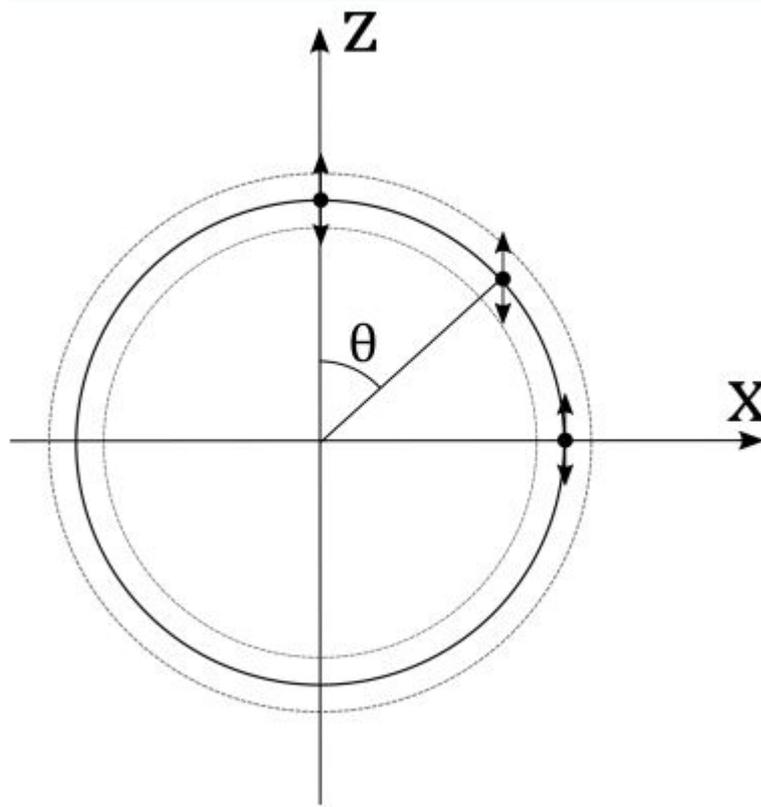


Figura 11 – Oscilações do centro de massa são afetadas pela geometria do sistema
Fonte: Elaborada pelo autor

Voltemos nossa atenção à oscilação na direção z . Note que, quando os átomos se concentram em torno do equador e pequenas oscilações ocorrem nesta direção, temos que as forças restauradoras da armadilha configuram-se perpendicularmente ao movimento de oscilação, de forma que o armadilhamento efetivo é mais fraco. Uma outra maneira de se entender isso é o de que localmente os átomos próximos do equador "enxergam" um

potencial mais achatado na direção z e, conseqüentemente, de menor frequência associada.

O caso das oscilações em x, y é perfeitamente análogo. Visto que quanto mais próximas do equador oscilações cilíndricamente radiais ocorrerem, mais alinhado com as forças restauradoras será o movimento e, por conseguinte, quanto mais átomos próximos do equador oscilando nesta direção, maior torna-se a curvatura da parábola efetiva influenciando o condensado como um todo. Ressalto aqui que, no caso dos modos de dipolo, é claro que estas variações nas frequências ocorrem devido às deformações geométricas sem qualquer relação direta com a interação dipolar em si visto que as expressões para estas frequências de dipolo não carregam dependência explícita da interação dipolar, somente do estado fundamental que, por sua vez, é afetado pela interação dipolar essencialmente no aspecto geométrico. Este mesmo raciocínio aplica-se para todos os modos de oscilação visto que a forma do estado fundamental é crucial no cálculo destes.

É interessante notar que este mesmo efeito de alteração nas frequências de oscilação devido à alterações geométricas também é evidenciada no estudo da transição da armadilha harmônica para a armadilha do tipo *bubble*.³³ Embora neste trabalho a transição topológica tenha um papel crucial nas propriedades dos modos coletivos, esta mesma importância não se evidencia nos casos de estudo aqui apresentados, o que é razoável uma vez que a relevância física da transição topológica armadilha harmônica \rightarrow *bubble* é a do surgimento de uma nova superfície interna no condensado que, por sua vez, promove uma redistribuição das frequências de oscilação tanto radiais quanto superficiais. Veja que, embora haja uma transição topológica no *bubble* dipolar na situação em que a densidade torna-se nula nos pólos, esta mudança não se evidencia nas frequências de oscilação pois estamos trabalhando exclusivamente no limite de casca fina e, portanto, não temos um surgimento de novas superfícies.

Por último, ressaltaremos o aspecto mais interessante dos resultados obtidos para os modos de dipolo que é o de que estes distinguem-se substancialmente dos resultados obtidos para uma armadilha harmônica. De acordo com o teorema de Kohn, oscilações do centro de massa em BECs aprisionados em armadilhas harmônicas sempre apresentam frequências iguais à frequência da armadilha independentemente das interações inter-atômicas. Além disso, foi demonstrado via equações hidrodinâmicas que para o *bubble* sem interação dipolar estas frequências tendem a zero no limite de casca fina,³³ também em desacordo com nossas observações. Com o intuito de entendermos melhor nosso resultado, este modo foi investigado por meio da linearização das oscilações do condensado em torno da densidade de Thomas-Fermi no contexto hidrodinâmico. Com esta abordagem foi possível obter fórmulas analíticas para as frequências de dipolo associadas às três direções espaciais:

$$\frac{\omega_{x,y,z}}{\omega_0} = \sqrt{1 - \frac{R_0}{N} \langle 0 | \frac{1}{r} | 0 \rangle}.$$

Note que não só as três frequências são idênticas como estas tendem a zero no limite de

casca fina. A diferença entre a expressão acima e o resultado obtido na seção [seção 5.3](#) consiste num termo aditivo dentro da raiz da forma $\langle x_i^2/r^3 \rangle$. Por um lado, este termo nos mostra que a solução obtida via *Sum Rules* dá uma frequência de excitação diferente de zero mesmo no limite de casca fina e, por outro lado, garante que esta é maior que a solução hidrodinâmica, como o esperado.

7 CONCLUSÃO

Os condensados de Bose-Einstein em armadilhas *bubble* representam uma importante conquista experimental recente, assim estimulando importantes desenvolvimentos teóricos no contexto da interação de contato isotrópica e de curto alcance. Expandimos o entendimento dos gases quânticos ultra-frios, investigando a influência da interação de dipolo-dipolo de longo alcance e anisotrópica no limite de uma casca fina, com os dipolos alinhados com a direção z . Por meio de um ansatz gaussiano para a parte radial da função de onda e uma expansão em harmônicos esféricos para a parte angular, fomos capazes de obter expressões analíticas para a energia total do sistema, que foram minimizadas em relação aos parâmetros variacionais. A respeito do estado fundamental, descobrimos que a configuração de equilíbrio exhibe simetria azimutal e as partículas tendem a se acumular ao longo da região equatorial da superfície esférica. Tal fenômeno nada mais é que um reflexo do fato de que a interação de dipolo-dipolo distingue apenas uma direção, aquela em relação a qual os dipolos estão alinhados. Essa é uma característica fundamental do limite de casca fina, visto que no caso de uma armadilha harmônica, os átomos tendem a se acomodar "um em cima do outro", de forma que a nuvem adquire a tendência de se alongar ao longo da direção de polarização. Confirmamos esta propensão por meio de um modelo simplificado de geometria plana quasi-2D, mimetizando a vizinhança do equador na situação de uma casca esférica cuja razão entre seu raio e sua espessura tende a infinito. As excitações coletivas foram investigadas com a ajuda da abordagem de *Sum Rules*. Desvios apreciáveis em relação aos casos não dipolares foram evidenciados, provendo evidências importantes para a detecção experimental das propriedades de excitação do sistema e do início do limite de casca fina. Como resultado, a primeira demonstração de efeitos dipolares em gases bosônicos aprisionados em *bubbles*, como realizada aqui, pode servir como um guia para futuras investigações teóricas e experimentais.

Sobre as perspectivas futuras, temos como primeiro objetivo estender o limite de casca fina, investigando o comportamento do estado fundamental do condensado dipolar ao longo de toda a transição de esfera cheia até o limite casca fina, de forma similar ao que foi feito em.³³ Esperamos ver neste estudo situações intermediárias entre a acumulação de átomos em torno do equador, característico do limite de casca fina, e a situação em que a nuvem tende aos pólos da casca, como o que acontece em armadilhas cheias. Assim, o próximo passo natural será a investigação dos modos coletivos ao longo desta transição geométrica, mas para este fim, será necessário a utilização de uma abordagem hidrodinâmica, de modo que obteremos não só as frequências dos modos coletivos como também as variações de densidade associadas a cada modo de vibração. No presente momento, estamos trabalhando na mesma análise que está descrita nesta dissertação, mas

para gases fermiônicos.

REFERÊNCIAS

- 1 BOSE. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. **Zeitschrift für Physik**, v. 26, p. 178–181, Dec. 1924. doi:10.1007/BF01327326.
- 2 ANDERSON, M. H.; ENSHER, J. R.; MATTHEWS, M. R.; WIEMAN, C. E.; CORNELL, E. A. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. **Science**, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995.
- 3 DAVIS, K. B.; MEWES, M. O.; ANDREWS, M. R.; VANDRUTEN, N. J.; DURFEE, D. S.; KURN, D. M.; KETTERLE, W. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. **Physical Review Letters**, v. 75, n. 22, p. 3969–3973, Nov. 1995.
- 4 ABO-SHAEER, J. R.; RAMAN, C.; VOGELS, J. M.; KETTERLE, W. Observation of vortex lattices in Bose-Einstein condensates. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 292, n. 5516, p. 476–479, April 2001.
- 5 GREINER, M.; MANDEL, O.; ESSLINGER, T.; HANSCH, T. W.; BLOCH, I. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 415, n. 6867, p. 39–44, Jan. 2002.
- 6 GREINER, M.; REGAL, C. A.; JIN, D. S. Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a fermi gas. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 426, n. 6966, p. 537–540, Nov. 2003.
- 7 ROBERTS, J. L.; CLAUSSEN, N. R.; CORNISH, S. L.; DONLEY, E. A.; CORNELL, E. A.; WIEMAN, C. E. Controlled collapse of a Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 86, n. 19, p. 4211–4214, May 2001.
- 8 TANZI, L.; LUCIONI, E.; FAMÀ, F.; CATANI, J.; FIORETTI, A.; GABBANINI, C.; BISSET, R.; SANTOS, L.; MODUGNO, G. Observation of a dipolar quantum gas with metastable supersolid properties. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 122, n. 13, p. 130405, April 2019.
- 9 BÖTTCHER, F.; SCHMIDT, J.-N.; WENZEL, M.; HERTKORN, J.; GUO, M.; LANGEN, T.; PFAU, T. Transient supersolid properties in an array of dipolar quantum droplets. **Physical Review X**, American Physical Society, v. 9, n. 1, March 2019. doi: 10.1103/PhysRevX.9.011051.
- 10 CHOMAZ, L.; PETTER, D.; ILZHÖFER, P.; NATALE, G.; TRAUTMANN, A.; POLITI, C.; DURASTANTE, G.; BIJNEN, R. van; PATSCHEIDER, A.; SOHMEN, M.; MARK, M.; FERLAINO, F. Long-lived and transient supersolid behaviors in dipolar quantum gases. **Physical Review X**, American Physical Society, v. 9, n. 2, p. 021012, April 2019.
- 11 LIMA, A. R. P.; PELSTER, A. Quantum fluctuations in dipolar Bose gases. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 84, n. 4, Oct. 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.041604.

- 12 LIMA, A. R. P.; PELSTER, A. Beyond mean-field low-lying excitations of dipolar Bose gases. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 86, n. 6, p. 063609, Dec. 2012.
- 13 WÄCHTLER, F.; SANTOS, L. Ground-state properties and elementary excitations of quantum droplets in dipolar Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 94, n. 4, p. 043618, Oct. 2016.
- 14 BAILLIE, D.; WILSON, R. M.; BISSET, R. N.; BLAKIE, P. B. Self-bound dipolar droplet: a localized matter wave in free space. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 94, n. 2, Aug. 2016.
- 15 PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. **Bose-Einstein condensation and superfluidity**. Oxford: Oxford University Press, 2016. (International Series of Monographs on Physics).
- 16 KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. **Journal of Physics C: solid state physics**, v. 6, n. 7, p. 1181–1203, April 1973. doi: 10.1088/0022-3719/6/7/010.
- 17 ATALA, M.; AIDELSBURGER, M.; BARREIRO, J. T.; ABANIN, D.; KITAGAWA, T.; DEMLER, E.; BLOCH, I. Direct measurement of the zak phase in topological bloch bands. **Nature Physics**, Springer Science and Business Media LLC, v. 9, n. 12, p. 795–800, Nov. 2013.
- 18 HASAN, M. Z.; KANE, C. L. Colloquium: topological insulators. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 82, n. 4, p. 3045–3067, Nov. 2010.
- 19 CHIU, C.-K.; TEO, J. C.; SCHNYDER, A. P.; RYU, S. Classification of topological quantum matter with symmetries. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 88, n. 3, p. 035005, Aug. 2016.
- 20 CHIN, C.; GRIMM, R.; JULIENNE, P.; TIESINGA, E. Feshbach resonances in ultracold gases. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 82, n. 2, p. 1225–1286, April 2010.
- 21 INOUE, S.; ANDREWS, M. R.; STENGER, J.; MIESNER, H.-J.; STAMPER-KURN, D. M.; KETTERLE, W. Observation of feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 392, n. 6672, p. 151–154, March 1998.
- 22 LAHAYE, T.; MENOTTI, C.; SANTOS, L.; LEWENSTEIN, M.; PFAU, T. The physics of dipolar bosonic quantum gases. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 72, n. 12, p. 126401, Nov. 2009.
- 23 DONLEY, E. A.; CLAUSSEN, N. R.; CORNISH, S. L.; ROBERTS, J. L.; CORNELL, E. A.; WIEMAN, C. E. Dynamics of collapsing and exploding Bose-Einstein condensates. **Nature**, Springer Science and Business Media, v. 412, n. 6844, p. 295–299, July 2001.
- 24 MØLMER, K. Bose condensates and Fermi gases at zero temperature. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 80, n. 9, p. 1804–1807, March 1998.

-
- 25 OSPELKAUS, S.; OSPELKAUS, C.; HUMBERT, L.; SENGSTOCK, K.; BONGS, K. Tuning of heteronuclear interactions in a degenerate Fermi-Bose mixture. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 97, n. 12, p. 120403, Sept. 2006.
- 26 SCHAEYBROECK, B. V.; LAZARIDES, A. Trapped phase-segregated Bose-Fermi mixtures and their collective excitations. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 79, n. 3, March 2009. doi: 10.1103/PhysRevA.79.033618.
- 27 BATROUNI, G. G.; ROUSSEAU, V.; SCALETTAR, R. T.; RIGOL, M.; MURAMATSU, A.; DENTENEER, P. J. H.; TROYER, M. Mott domains of bosons confined on optical lattices. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 89, n. 11, p. 117203, Aug. 2002.
- 28 DEMARCO, B.; LANNERT, C.; VISHVESHWARA, S.; WEI, T.-C. Structure and stability of mott-insulator shells of bosons trapped in an optical lattice. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 71, n. 6, p. 063601, June 2005.
- 29 CAMPBELL, G. K. Imaging the mott insulator shells by using atomic clock shifts. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 313, n. 5787, p. 649–652, Aug 2006.
- 30 COLOMBE, Y.; KNYAZCHYAN, E.; MORIZOT, O.; MERCIER, B.; LORENT, V.; PERRIN, H. Ultracold atoms confined in rf-induced two-dimensional trapping potentials. **Europhysics Letters**, IOP Publishing, v. 67, n. 4, p. 593–599, Aug. 2004.
- 31 SINUCO-LEÓN, G. A.; GARRAWAY, B. M. Radio-frequency dressed lattices for ultracold alkali atoms. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 17, n. 5, p. 053037, May 2015.
- 32 WHITE, M.; GAO, H.; PASIENSKI, M.; DEMARCO, B. Bose-Einstein condensates in rf-dressed adiabatic potentials. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 74, n. 2, p. 023616, Aug. 2006.
- 33 SUN, K.; P ADAVIĆ, K.; YANG, F.; VISHVESHWARA, S.; LANNERT, C. Static and dynamic properties of shell-shaped condensates. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 98, n. 1, p. 013609, 2018.
- 34 LUNDBLAD, N.; CAROLLO, R. A.; LANNERT, C.; GOLD, M. J.; JIANG, X.; PASELTINER, D.; SERGAY, N.; AVELINE, D. C. Shell potentials for microgravity Bose-Einstein condensates. **npj Microgravity**, Springer Science and Business Media LLC, v. 5, n. 1, Dec. 2019. doi: 10.1038/s41526-019-0087-y.
- 35 LANNERT, C.; WEI, T.-C.; VISHVESHWARA, S. Dynamics of condensate shells: collective modes and expansion. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 75, n. 1, p. 013611, Jan. 2007.
- 36 MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 17, n. 22, p. 1133–1136, Nov. 1966.
- 37 TONONI, A.; SALASNICH, L. Bose-Einstein condensation on the surface of a sphere. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 123, n. 16, p. 160403, Oct. 2019.

- 38 BERETA, S. J.; MADEIRA, L.; BAGNATO, V. S.; CARACANHAS, M. A. Bose-Einstein condensation in spherically symmetric traps. **American Journal of Physics**, American Association of Physics Teachers, v. 87, n. 11, p. 924–934, Nov. 2019.
- 39 ADHIKARI, S. K. Dipolar Bose-Einstein condensate in a ring or in a shell. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 85, n. 5, p. 053631, May 2012.
- 40 ANNET, J. F. **Superconductivity, superfluids and condensates**. Oxford: Oxford University Press, 2004.
- 41 FORSGREN, A.; GILL, P. E.; WRIGHT, M. H. Interior methods for nonlinear optimization. **SIAM Review**, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 44, n. 4, p. 525–597, Jan. 2002.
- 42 KUBO, R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. **Journal of the Physical Society of Japan**, Physical Society of Japan, v. 12, n. 6, p. 570–586, 1957.
- 43 STRINGARI, S. Collective excitations of a trapped Bose-condensed gas. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 77, n. 12, p. 2360–2363, Sept. 1996.
- 44 KIMURA, T.; SAITO, H.; UEDA, M. A variational sum-rule approach to collective excitations of a trapped Bose-Einstein condensate. **Journal of the Physical Society of Japan**, Physical Society of Japan, v. 68, n. 5, p. 1477–1480, 1999.

APÊNDICE A – SÍMBOLOS 3-J DE WIGNER

Lembramos aqui que os símbolos 3-j de Wigner

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

são iguais a zero a menos que:

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

Ademais, os mesmos possuem a propriedade de permutação de índices

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

APÊNDICE B – INTEGRAIS ENVOLVENDO DERIVADAS DA δ

Para calcular alguns momentos, é necessário resolvermos integrais do tipo:

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

Para tentar resolver essas integrais, comecemos com os casos unidimensionais:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_j \frac{d}{dx_k} (\delta(x_i - x_j)) f(x_j)$$

Definindo a coordenada relativa $X \equiv x_i - x_j$, temos os casos:

$$k = i : \int_{+\infty}^{-\infty} -dX \frac{d}{dX} (\delta(X)) \frac{dX}{dx_i} f(x_i - X) = f'(x_i) \quad (\text{B.1})$$

$$k = j : \int_{+\infty}^{-\infty} -dX \frac{d}{dX} (\delta(X)) \frac{dX}{dx_j} f(x_i - X) = -f'(x_i) \quad (\text{B.2})$$

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

Analogamente, em 3 dimensões:

$$\begin{aligned} & \int d^3x_j \mathbf{x}_k \cdot \nabla_k (\delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) f(\mathbf{x}_j) \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \int d^3X \mathbf{x}_k \cdot \nabla (\delta(\mathbf{X})) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \int d^3X x_{k\alpha} \partial_\alpha (\delta(\mathbf{X})) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \left[\int d^3X \partial_\alpha (x_{k\alpha} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) - \int d^3X \delta(\mathbf{X}) \partial_\alpha (x_{k\alpha} f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X})) \right] \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \left[\int d^3X \nabla \cdot (\mathbf{x}_k \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) - \int d^3X \delta(\mathbf{X}) \nabla \cdot (\mathbf{x}_k f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X})) \right] \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \left[\oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}_k \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}) - \nabla \cdot (\mathbf{x}_k f(\mathbf{x}_i - \mathbf{X})) \Big|_{\mathbf{X}=0} \right] \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \left[0 - 3(\delta_{ik} - \delta_{jk}) f(\mathbf{x}_i) + \mathbf{x}_k \cdot \nabla f(\mathbf{x}_i) \right] \\ &= (\delta_{ik} - \delta_{jk}) \mathbf{x}_k \cdot \nabla f(\mathbf{x}_i) - 3(\delta_{ik} + \delta_{jk}) f(\mathbf{x}_i) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

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

$$\begin{aligned}
\mathbf{X} \cdot \nabla [\mathbf{X} \cdot \nabla \delta(\mathbf{X})] &= X_\alpha \partial_\alpha [X_\beta \partial_\beta \delta(\mathbf{X})] \\
&= X_\alpha (\partial_\alpha X_\beta) \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) + X_\alpha X_\beta \partial_\alpha [\partial_\beta \delta(\mathbf{X})] \\
&= X_\alpha \partial_\alpha \delta(\mathbf{X}) + X_\alpha X_\beta \partial_\alpha \partial_\beta \delta(\mathbf{X})
\end{aligned} \tag{B.5}$$

Integrando o primeiro termo:

$$\begin{aligned}
&\int d^3 X n(+)\,n(-)\,X_\alpha \partial_\alpha \delta(\mathbf{X}) \\
&\oint dS_\alpha n(+)\,n(-)\,X_\alpha \delta(\mathbf{X}) - \int d^3 X \partial_\alpha [X_\alpha n(+)\,n(-)] \delta(\mathbf{X}) \\
&= 0 - (3n^2(\mathbf{R}) + 0) = -3n^2(\mathbf{R})
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Onde usei a notação compacta: $n(\pm) = n(\mathbf{R} \pm \mathbf{X}/2)$. Já o segundo termo envolve derivadas de segunda ordem na $\delta(\mathbf{X})$. Para integrarmos por partes, queremos reduzi-lo a termos com derivadas de primeira ordem (ou ordem zero). Não é difícil verificar que:

$$\begin{aligned}
n(+)\,n(-)\,\partial_\alpha \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) &= -12n(+)\,n(-)\,\delta(\mathbf{X}) - 8n(+)\,n(-)\,X_\alpha \partial_\alpha \delta(\mathbf{X}) \\
&\quad - 2n(+)\,n(-)\,X_\alpha X_\beta \partial_\alpha [n(+)\,n(-)] \partial_\beta \delta(\mathbf{X}) + Z_0
\end{aligned} \tag{B.7}$$

Onde Z_0 são termos cuja integral em $d^3 X$ se anula (de superfície ou da forma $\mathbf{X}\delta(\mathbf{X})$). Finalmente, integrando (e fazendo direto as integrações por partes):

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

APÊNDICE C – MOTIVAÇÃO E TRANSFORMADA DE FOURIER

Queremos estender os resultados do apêndice anterior para o caso de um termo de interação mais genérico que dependa apenas da coordenada relativa $V(\mathbf{X})$, em especial, a interação dipolo-dipolo $V_{dd}(\mathbf{X})$.

Analogamente à interação de contato, aparecem valores médios de operadores da forma

$$\mathbf{X} \cdot \nabla [\mathbf{X} \cdot \nabla V(\mathbf{X})] = X_\alpha \partial_\alpha V(\mathbf{X}) + X_\alpha X_\beta \partial_\alpha \partial_\beta V(\mathbf{X})$$

Novamente, integrando o primeiro termo:

$$\begin{aligned} & \int d^3 X n(+) n(-) X_\alpha \partial_\alpha V(\mathbf{X}) \\ & \oint dS_\alpha n(+) n(-) X_\alpha V(\mathbf{X}) - \int d^3 X \partial_\alpha [X_\alpha n(+) n(-)] V(\mathbf{X}) \\ & = 0 - \left\{ 3 \int d^3 X V(\mathbf{X}) n(+) n(-) + \int d^3 X V(\mathbf{X}) X_\alpha \partial_\alpha [n(+) n(-)] \right\} \quad (\text{C.1}) \end{aligned}$$

Onde o termo de superfície permanece nulo (assumindo que $V(\mathbf{X})$ não exploda para $|\mathbf{X}| \rightarrow \infty$), o primeiro termo entre chaves aparece como um múltiplo do valor médio de $V(\mathbf{X})$, mas o último termo não se anula trivialmente, como no caso particular $V(\mathbf{X}) = \delta(\mathbf{X})$.

Entretanto, é possível verificar o anulamento desses termos através de uma transformada de Fourier. Definimos aqui a transformada direta (e inversa) de uma função $g(\mathbf{x})$ como:

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) \equiv \int \frac{d^3 x}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} g(\mathbf{x}) \quad \Rightarrow \quad g(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \tilde{g}(\mathbf{k})$$

APÊNDICE D – APLICAÇÃO A TERMOS DERIVADOS EM PRIMEIRA ORDEM

Para uma função genérica $f(\mathbf{x})$ temos

$$\begin{aligned}
 \int d^3x V(\mathbf{x}) x_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} [f(\mathbf{x})] &= \int d^3x V(\mathbf{x}) x_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tilde{f}(\mathbf{k}) \\
 &= \iint \frac{d^3x d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{f}(\mathbf{k}) V(\mathbf{x}) x_\alpha (ik_\alpha) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
 &= \iint \frac{d^3x d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{f}(\mathbf{k}) V(\mathbf{x}) (ik_\alpha) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial k_\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
 &= \int d^3k \tilde{f}(\mathbf{k}) k_\alpha \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) \\
 &= \int d^3k \tilde{f}(\mathbf{k}) k_\alpha \frac{\partial}{\partial k_\alpha} [\tilde{V}(-\mathbf{k})] \tag{D.1}
 \end{aligned}$$

Em particular, teremos que essa integral se anula caso $k_\alpha \frac{\partial \tilde{V}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}$ seja identicamente nulo. No caso do potencial dipolo-dipolo ($V = V_{dd}$), temos:

$$\tilde{V}_{dd}(\mathbf{k}) = \frac{c_{dd}}{3} \left(3 \frac{k_z^2}{|\mathbf{k}|^2} - 1 \right)$$

De modo que:

$$k_\alpha \frac{\partial \tilde{V}_{dd}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} = c_{dd} 2k_z^2 \left[\frac{-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 + |\mathbf{k}|^2}{|\mathbf{k}|^4} \right] = 0$$

APÊNDICE E – APLICAÇÃO A TERMOS DERIVADOS EM SEGUNDA ORDEM

Trataremos dos termos do tipo

$$\int d^3 X V(\mathbf{X}) X_\alpha X_\beta \partial_\alpha \partial_\beta [n(+)n(-)]$$

Por compacidade, usarei a notação $\partial_\alpha^{(x)} \equiv \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ e $\partial_\alpha^{(k)} \equiv \frac{\partial}{\partial k_\alpha}$. Temos então:

$$\begin{aligned} & \int d^3 x V(\mathbf{x}) x_\alpha x_\beta \partial_\alpha^{(x)} \partial_\beta^{(x)} [f(\mathbf{x})] \\ &= \int d^3 x V(\mathbf{x}) x_\alpha x_\beta \partial_\alpha^{(x)} \partial_\beta^{(x)} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tilde{f}(\mathbf{k}) \\ &= \iint \frac{d^3 x d^3 k}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{f}(\mathbf{k}) V(\mathbf{x}) x_\alpha x_\beta (ik_\alpha)(ik_\beta) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \iint \frac{d^3 x d^3 k}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{f}(\mathbf{k}) V(\mathbf{x}) (ik_\alpha)(ik_\beta) \frac{1}{i^2} \partial_\alpha^{(k)} \partial_\beta^{(k)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \int d^3 k \tilde{f}(\mathbf{k}) k_\alpha k_\beta \partial_\alpha^{(k)} \partial_\beta^{(k)} \int \frac{d^3 x}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3 k \tilde{f}(\mathbf{k}) k_\alpha k_\beta \partial_\alpha^{(k)} \partial_\beta^{(k)} [\tilde{V}(-\mathbf{k})] \end{aligned} \tag{E.1}$$

Novamente, uma condição suficiente para que essa integral se anule é que $k_\alpha k_\beta \partial_\alpha^{(k)} \partial_\beta^{(k)} [\tilde{V}(\mathbf{k})]$ seja identicamente nulo. No caso $V = V_{dd}$, temos as derivadas:

$$\begin{aligned} \partial_x^{(k)} \tilde{V}_{dd} &= -\frac{2k_z^2}{|\mathbf{k}|^4} k_x & \partial_z^{(k)} \tilde{V}_{dd} &= \frac{2k_z |\mathbf{k}|^2 - 2k_z k_z^2}{|\mathbf{k}|^4} \\ (\partial_x^{(k)})^2 \tilde{V}_{dd} &= \frac{8k_z^2}{|\mathbf{k}|^6} \left(k_x^2 - \frac{1}{4} |\mathbf{k}|^4 \right) & \partial_x^{(k)} \partial_y^{(k)} \tilde{V}_{dd} &= \frac{8k_z^2}{|\mathbf{k}|^6} k_x k_y \\ (\partial_z^{(k)})^2 \tilde{V}_{dd} &= \frac{8k_z^2}{|\mathbf{k}|^6} \left(\frac{1}{4k_z^2} |\mathbf{k}|^2 - \frac{5}{4} |\mathbf{k}|^2 + k_z^2 \right) & \partial_x^{(k)} \partial_z^{(k)} \tilde{V}_{dd} &= \frac{8k_z^2}{|\mathbf{k}|^6} \left(\frac{1}{4k_z^2} |\mathbf{k}|^4 - \frac{5}{4} |\mathbf{k}|^2 + k_z^2 \right) \end{aligned} \tag{E.2}$$

Levando em consideração que as derivadas comutam, e que os resultados são simétricos por troca $x \leftrightarrow y$, ficamos com a expressão:

$$\begin{aligned} k_\alpha k_\beta \partial_\alpha^{(k)} \partial_\beta^{(k)} [\tilde{V}(\mathbf{k})] &= \frac{8k_z^2}{|\mathbf{k}|^6} \left\{ 2k_x^2 k_y^2 + k_x^4 + k_y^4 - \frac{1}{4}(k_x^2 + k_y^2)|\mathbf{k}|^2 + 2(k_x^2 + k_y^2)k_z^2 \right. \\ &\quad \left. - (k_x^2 + k_y^2)|\mathbf{k}|^2 + \frac{1}{4}|\mathbf{k}|^4 - \frac{5}{4}|\mathbf{k}|^2 k_z^2 + k_z^4 \right\} \\ &= \frac{8k_z^2}{|\mathbf{k}|^6} \left\{ ((k_x^2 + k_y^2)^2 + 2(k_x^2 + k_y^2)k_z^2 + k_z^4) - \frac{5}{4}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)|\mathbf{k}|^2 + \frac{1}{4}|\mathbf{k}|^4 \right\} \\ &= \frac{8k_z^2}{|\mathbf{k}|^6} \left\{ (|\mathbf{k}|^4 - \frac{5}{4}|\mathbf{k}|^4 + \frac{1}{4}|\mathbf{k}|^4) \right\} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{E.3}$$

APÊNDICE F – RESULTADO

Dessa maneira, temos que o resultado da integração sobre termos de interação dipolar resulta, de maneira idêntica ao caso da interação de contato (eqs. B.6 e B.8), num múltiplo do valor esperado da energia (dipolar) no estado fundamental:

$$\int d^3 X \mathbf{X} \cdot \nabla [\mathbf{X} \cdot \nabla V_{dd}(\mathbf{X})] = 9 \int d^3 X n(\mathbf{R} + \mathbf{X}/2)n(\mathbf{R} - \mathbf{X}/2)V_{dd}(\mathbf{X})$$

De modo que ao considerar o termo dipolar nas expressões de frequências de excitação, basta substituírmos os valores médios da energia de contato $\langle H_s \rangle$ por valores médios da energia total de interação $\langle H_{int} \rangle$