

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO - MONOGRAFIA
**Modos coletivos de um condensado de Bose-Einstein dipolar em
uma armadilha tipo bolha: uma abordagem via *Sum Rules***

Aluno: Eduardo Amâncio Barbosa Oliveira
Bacharelado em Física
Orientador: Emanuel Alves de Lima Henn

São Carlos
Outubro de 2019

Resumo

Neste trabalho, estudamos oscilações coletivas de um gás quântico bosônico com interações dipolares em uma armadilha tipo bolha, na qual os átomos são fortemente confinados em uma casca esférica. Essa geometria apresenta características bastante distintas do caso de uma armadilha “cheia” devido ao aparecimento de uma fronteira interna: em particular, surgem assinaturas específicas em seus modos de oscilação. Ademais, ao considerarmos interações dipolares, observamos mudanças características no estado fundamental e frequências de oscilação do sistema. Mostramos aqui como, com uma técnica perturbativa particularmente simples, conseguimos obter expressões analíticas de *limites superiores* (i.e. desigualdades) para frequências de diversos modos de oscilação do sistema, as quais dependem somente de suas características no estado de equilíbrio. O que é interessante nesse método é que essas desigualdades são frequentemente saturadas, fornecendo valores que correspondem, em excelente aproximação, às frequências de oscilação de fato. Nossos resultados recuperam expressões conhecidas no caso de uma armadilha cheia [1, 2], e tanto nesse caso quanto para a armadilha tipo bolha sem interação dipolar [3], para os quais existem resultados conhecidos, elas fornecem frequências em excelente acordo com valores medidos experimentalmente ou calculadas por métodos independentes, como equações hidrodinâmicas.

1 Introdução

Há mais de 20 anos, o estudo extensivo de gases quânticos ultrafrios e, em particular, da condensação de Bose-Einstein em tais sistemas tem se mostrado uma área extremamente prolífica, e que permitiu grande avanço no entendimento de uma miríade de fenômenos, tais como superfluidez, supercondutividade e turbulência. Nesse contexto, átomos dipolares, devido à sua interação anisotrópica e de longo alcance, apresentam uma enorme riqueza de novos fenômenos e comportamentos [4].

Armadilhas tipo bolha recentemente se tornaram possíveis experimentalmente graças ao uso de potenciais adiabáticos vestidos de radiofrequência [5]. Estas levantaram muito interesse teórico e experimental no estudo de tais sistemas em geometrias diversas daquelas exploradas em armadilhas usuais: em particular a própria geometria de uma bolha, que difere drasticamente de uma esfera cheia devido ao aparecimento de uma fronteira interna. No entanto, esta última é impraticável de se obter experimentalmente na superfície da Terra, devido à gravidade, que tende a acumular átomos no fundo da armadilha. Não obstante, tanto do ponto de vista puramente teórico (onde é muito fácil “desligar” a gravidade), quanto da realização experimental, com um experimento lançado à estação espacial internacional no último ano [6], essa é uma geometria extremamente interessante de ser explorada.

Nesse contexto, uma extensão natural é investigar o comportamento de condensados de Bose-Einstein sujeitos a interações dipolares numa armadilha tipo bolha, e como a ação conjunta da geometria e da interação influencia suas características. Até o momento não há resultados na literatura sobre esse tipo de sistema.

De fato, esse sistema apresenta grandes dificuldades para um tratamento analítico rigoroso. Entretanto, ele se mostrou um terreno bastante fértil para estudar e aplicar um método perturbativo de amplo escopo, derivado da teoria de resposta linear no formalismo de Kubo [7], recorrendo a *Sum Rules*. Além da multiplicidade de aplicações, que incluem gases quânticos ultrafrios [1, 2, 8], esse método apresenta relativa facilidade técnica.

Neste trabalho, nos propomos a analisar algumas características dinâmicas de condensados dipolares numa bolha, a saber, as frequências e energias de alguns dos seus modos coletivos de oscilação, a partir da teoria de resposta linear. Na seção 2, desenvolvemos as ferramentas necessárias para essa do problema e mostramos como elas podem ser aplicadas a um sistema genérico, especificados apenas seu hamiltoniano e estado de equilíbrio. Na seção 3, usaremos essas ferramentas para calcular explicitamente as frequências de alguns dos principais modos coletivos de interesse no nosso sistema, comparando os resultados com os casos limites conhecidos na literatura [1–3], de uma armadilha cheia ou de uma bolha sem interações dipolares.

2 Fundamentos Teóricos

Na presente abordagem para obter frequências de oscilações coletivas do condensado, precisaremos lançar mão de alguns resultados do formalismo de Kubo [7, 8], que desenvolveremos de um modo bastante geral a seguir. Esses resultados, por sua vez, fornecem expressões perturbativas para as frequências, que são avaliadas no estado de equilíbrio do sistema, de modo que esboçaremos como este foi calculado numa armadilha tipo bolha e quais as suas principais características nessa geometria na presença de interações dipolares.

2.1 Formalismo

Abordaremos os modos coletivos do condensado como uma resposta linear do sistema [7, 9] a uma perturbação (potenciais externos dependentes do tempo). Na prática, a perturbação considerada para cada modo está associada ao tipo de potenciais oscilantes utilizados para excitá-lo experimentalmente.

Para isso, analisaremos o caso mais geral de como um sistema reage a uma perturbação dependente do tempo (em 1ª ordem): em particular, como seus observáveis se desviam do equilíbrio e se

correlacionam à perturbação. Consideremos um hamiltoniano perturbado da forma:

$$H(t) = H_0 + H_1(t) = H_0 - Bf(t) \quad (1)$$

Onde B é um operador independente do tempo e $f(t)$ é uma função escalar do tempo. Queremos que a perturbação H_1 comece a atuar num instante t_0 (ou seja $f(t) = 0, \forall t < t_0$).

H tem o operador de evolução temporal U associado:

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0)U_1(t, t_0) \quad \text{onde:} \quad U_0(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} \quad (2)$$

Usando os sobrescritos S, H, I para denotar vetores de estado e operadores nos esquemas de Schrödinger, Heisenberg e Dirac (ou de interação), respectivamente, temos as relações:

$$\begin{aligned} |\psi^H\rangle &= U^\dagger(t, t_0) |\psi^S(t)\rangle & G^H(t) &= U^\dagger(t, t_0) G^S(t) U(t, t_0) \\ |\psi^I(t)\rangle &= U_0^\dagger(t, t_0) |\psi^S(t)\rangle & G^I(t) &= U_0^\dagger(t, t_0) G^S(t) U_0(t, t_0) \end{aligned}$$

E convém lembrar que nos esquemas de Heisenberg e Dirac, as derivadas temporais de operadores podem ser escritas como:

$$\frac{dG^H}{dt}(t) = \frac{i}{\hbar} [H(t), G^H(t)] + \left(\frac{dG^S}{dt}(t) \right)^H = \frac{i}{\hbar} ([H(t), G^S(t)])^H + \left(\frac{dG^S}{dt}(t) \right)^H \quad (3)$$

$$\frac{dG^I}{dt}(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0, G^I(t)] + \left(\frac{dG^S}{dt}(t) \right)^I = \frac{i}{\hbar} ([H_0, G^S(t)])^I + \left(\frac{dG^S}{dt}(t) \right)^I \quad (4)$$

Definimos o vetor de estado $|\psi_0\rangle$ e o operador de densidade ρ (em qualquer dos esquemas):

$$|\psi_0\rangle \equiv |\psi^S(t_0)\rangle = |\psi^H\rangle = |\psi^I(t_0)\rangle \quad (5)$$

$$\rho(t) \equiv \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)| \quad (6)$$

Onde p_k são probabilidades associadas a uma mistura estatística de estados¹. ρ é extremamente útil para calcular valores médios de operadores, que podem ser escritos da forma $\langle G(t) \rangle = \text{Tr}\{\rho(t)G(t)\}$. No esquema de Schrödinger temos (omitindo a dependência temporal dos operadores nos passos intermediários):

$$\begin{aligned} \langle G^S(t) \rangle &= \text{Tr}\{\rho^S G^S\} = \text{Tr}\{U \rho^H U^\dagger U_0 G^I U_0^\dagger\} = \text{Tr}\{\rho^H U_1^\dagger G^I U_1\} \\ &= \text{Tr}\{\rho^H U_1^\dagger(t, t_0) G^I(t) U_1(t, t_0)\} \end{aligned} \quad (7)$$

Lembrando que no esquema de Heisenberg os vetores de estado são independentes do tempo, de modo que $\rho^H = \rho_0$ corresponde à matriz de densidade no equilíbrio.

No equilíbrio (não-perturbado), temos $U_1 = \mathbb{1}$, logo:

$$\langle G^S(t) \rangle_{eq} = \text{Tr}\{\rho^H G^I(t)\} \quad (8)$$

Fora do equilíbrio, em primeira ordem na perturbação, temos o operador de evolução:

¹Por exemplo, para um sistema em equilíbrio termodinâmico à temperatura T , temos $p_k \propto e^{-E_k/k_B T}$

$$U_1(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_1^I(t') dt' \quad (9)$$

De maneira que podemos escrever (preservando apenas termos de 1ª ordem):

$$U_1^\dagger(t, t_0) G^I(t) U_1(t, t_0) = G^I(t) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [G^I(t), B^I(t')] f(t') dt' \quad (10)$$

E obtemos o valor médio (eq. 7):

$$\begin{aligned} \langle G^S(t) \rangle &= Tr\{\rho^H G^I(t)\} + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t Tr\{\rho^H [G^I(t), B^I(t')]\} f(t') dt' \\ &= \langle G^S(t) \rangle_{eq} + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle [G^I(t), B^I(t')] \rangle_{eq} f(t') dt' \end{aligned} \quad (11)$$

Com esse resultado, interessa-nos calcular o desvio do valor médio de um observável A qualquer entre um estado perturbado e um estado de equilíbrio, definido por:

$$\delta \langle A^S(t) \rangle \equiv \langle A^S(t) \rangle - \langle A^S(t) \rangle_{eq} \quad (12)$$

Pelas equações (8) e (11), podemos escrevê-lo como:

$$\delta \langle A^S(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle [A^I(t), B^I(t')] \rangle_{eq} f(t') dt' = 2i \int_{t_0}^t \chi''_{AB}(t, t') f(t') dt' \quad (13)$$

Onde definimos a *função resposta* χ''_{AB} :

$$\chi''_{AB}(t, t') \equiv \frac{1}{2\hbar} \langle [A^I(t), B^I(t')] \rangle_{eq} \quad (14)$$

Que quantifica como o observável A no tempo t é influenciado pela perturbação no tempo t' .

2.1.1 Propriedades Função Resposta

A partir de agora, consideraremos apenas operadores G^S independentes do tempo ($G^S = G^I(t_0)$). Como as propriedades de χ''_{AB} dependem apenas de operadores no esquema de interação, denotaremos $G^I(t)$ simplesmente por $G(t)$. Operadores independentes do tempo serão frequentemente denotados sem sobrescritos (e.g. $\rho^H = \rho$ ou $B^S = B$), salvo algumas passagens explícitas para maior clareza.

Para um observável A^S independente do tempo, demonstremos primeiramente que $\chi''_{AB}(t, t') = \chi''_{AB}(t - t')$, ou seja, que a função resposta depende apenas da diferença de tempos. Notemos que:

$$\chi''_{AB}(t, t') = \frac{1}{2\hbar} \langle [A(t), B(t')] \rangle_{eq} = \frac{1}{2\hbar} \left(\langle A(t)B(t') \rangle_{eq} - \langle B(t')A(t) \rangle_{eq} \right) \quad (15)$$

E, analisando o valor médio $\langle A(t)B(t') \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= Tr\{\rho A(t)B(t')\} \\ &= Tr\{\rho U_0^\dagger(t - t_0) A^S U_0(t - t_0) U_0^\dagger(t' - t_0) B^S U_0(t' - t_0)\} \\ &= Tr\{\rho U_0(t' - t_0) U_0(t_0 - t) A^S U_0(t - t_0) U_0(t_0 - t') B^S\} \end{aligned}$$

Onde usamos a propriedade cíclica do traço e o fato de que U_0 comuta com ρ (pois H_0 é hermitiano), bem como que $U_0^\dagger(t) = U_0^{-1}(t) = U_0(-t)$. Finalmente, usando que $U_0(t - t_0)U_0(t_0 - t') =$

$U_0(t - t')$, temos:

$$\begin{aligned}\langle A(t)B(t') \rangle &= \text{Tr}\{\rho U_0^\dagger(t - t')A^S U_0(t - t')B^S\} = \text{Tr}\{\rho A^S U_0(t - t')B^S U_0^\dagger(t - t')\} \\ &= \text{Tr}\{\rho A(t - t')B^S\} = \text{Tr}\{\rho A^S B(t - t')\}\end{aligned}\quad (16)$$

$$= \langle A(t - t')B^S \rangle = \langle A^S B(t' - t) \rangle \quad (17)$$

Definindo $\tau \equiv t - t'$, temos a identidade $\langle A(\tau)B^S \rangle = \langle A^S B(-\tau) \rangle$, e podemos escrever a função resposta como:

$$\chi''_{AB}(t, t') = \chi''_{AB}(\tau) = \frac{1}{2\hbar} \left(\langle A(\tau)B^S \rangle_{eq} - \langle B^S A(\tau) \rangle_{eq} \right) \quad (18)$$

$$= \frac{1}{2\hbar} \left(\langle A^S B(-\tau) \rangle_{eq} - \langle B(-\tau)A^S \rangle_{eq} \right) \quad (19)$$

Desse modo, vemos que $\chi''_{AB}(\tau) = -\chi''_{BA}(-\tau)$.

2.1.2 Transformada de Fourier da Função Resposta

Definimos a transformada de Fourier $\tilde{\chi}''_{AB}(\omega)$ de $\chi''_{AB}(\tau)$ com as seguintes convenções para a transformada e sua inversa:

$$\bullet \tilde{\chi}''_{AB}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \chi''_{AB}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (20) \quad \bullet \chi''_{AB}(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\chi}''_{AB}(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (21)$$

Alternativamente, podemos escrever:

$$\tilde{\chi}''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} \left(\langle \tilde{A}(\omega)B^S \rangle_{eq} - \langle B^S \tilde{A}(\omega) \rangle_{eq} \right) \quad (22)$$

Onde, naturalmente, $\tilde{A}(\omega)$ denota a transformada de Fourier de $A(\tau)$. Da propriedade (17), é fácil verificar que $\tilde{\chi}''_{AB}(-\omega) = -\tilde{\chi}''_{BA}(\omega)$.

Para obter uma forma mais explícita de $\tilde{\chi}''_{AB}(\omega)$, façamos a expansão de ρ na base de autoestados de H_0 na expressão de $\chi''_{AB}(\tau)$ (eqs. 18 e 19) :

$$\begin{aligned}2\hbar \chi''_{AB}(\tau) &= \text{Tr}\{\rho A(\tau)B - \rho B(-\tau)A\} \\ &= \sum_{i,m} p_m [\langle i|m \rangle \langle m|A(\tau)B|i \rangle - \langle i|m \rangle \langle m|B(-\tau)A|i \rangle] \\ &= \sum_m p_m [\langle m|A(\tau)B|m \rangle - \langle m|B(-\tau)A|m \rangle]\end{aligned}$$

Inserindo um conjunto completo entre A e B e escrevendo $G(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0\tau} G e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau}$:

$$\begin{aligned}&= \sum_{m,n} p_m [\langle m|e^{\frac{i}{\hbar}H_0\tau} A e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau} |n \rangle \langle n|B|m \rangle - \langle m|e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\tau} B e^{\frac{i}{\hbar}H_0\tau} |n \rangle \langle n|A|m \rangle] \\ &= \sum_{m,n} p_m [e^{-i\omega_{nm}\tau} \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle - e^{i\omega_{nm}\tau} \langle m|B|n \rangle \langle n|A|m \rangle]\end{aligned}$$

De modo que temos $\chi''_{AB}(\tau)$ escrito explicitamente em termos dos elementos de matriz:

$$\chi''_{AB}(\tau) = \frac{1}{2\hbar} \sum_{m,n} p_m [e^{-i\omega_{nm}\tau} A_{mn} B_{nm} - e^{i\omega_{nm}\tau} B_{mn} A_{nm}] \quad (23)$$

Finalmente, obtemos a forma explícita de $\tilde{\chi}''_{AB}(\omega)$:

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}''_{AB}(\omega) &= \frac{1}{2\hbar} \sum_{m,n} p_m [A_{mn} B_{nm} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega - \omega_{nm})\tau} - B_{mn} A_{nm} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega + \omega_{nm})\tau}] \\ &= \frac{\pi}{\hbar} \sum_{m,n} p_m [A_{mn} B_{nm} \delta(\omega - \omega_{nm}) - B_{mn} A_{nm} \delta(\omega + \omega_{nm})] \end{aligned} \quad (24)$$

2.1.3 Sum Rules

A partir da transformada da função resposta (i.e. da sua distribuição espectral), definimos os momentos ponderados pela energia:

$$m_{AB}^{(p)} \equiv \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (\hbar\omega)^p \tilde{\chi}''_{AB}(\omega) d\omega \quad (25)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \sum_{m,n} p_m (\hbar\omega_{nm})^p [A_{mn} B_{nm} - (-1)^p B_{mn} A_{nm}] \quad (26)$$

Onde usamos a eq. (24) na última igualdade. Entretanto, podemos reescrever $m_{AB}^{(p)}$ como:

$$\begin{aligned} (-i)^p m_{AB}^{(p)} &= \frac{\hbar^p}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^p}{dt^p} e^{-i\omega(t-t_0)} \tilde{\chi}''_{AB}(\omega) d\omega \Big|_{t=t_0} \\ &= 2\hbar^p \frac{d^p}{dt^p} \chi''_{AB}(t-t_0) \Big|_{t=t_0} = 2\hbar^p \frac{d^p}{dt^p} \chi''_{AB}(\tau) \Big|_{\tau=0} \end{aligned} \quad (27)$$

Usando a definição (18), e lembrando que derivadas temporais são dadas por (4), temos :

$$\begin{aligned} m_{AB}^{(p)} &= \frac{(i\hbar)^p}{\hbar} \left\langle \left[\frac{d^p}{dt^p} A(\tau), B \right] \right\rangle_{eq} \Big|_{\tau=0} \\ &= \frac{(i\hbar)^p}{\hbar} \frac{1}{(i\hbar)^p} \left\langle [[\dots [A, H_0] H_0] \dots H_0], B] \right\rangle_{eq} \\ &= \frac{1}{\hbar} \left\langle [\mathcal{L}^p A, B] \right\rangle_{eq} \end{aligned} \quad (28)$$

Onde definimos a ação adjunta \mathcal{L} por: $\mathcal{L}A = [A, H_0]$

Ademais, usando a equação (17), podemos distribuir as derivadas temporais entre A e B . Seja $l + k = p$, fazemos:

$$\begin{aligned} m_{AB}^{(p)} &= \frac{(i\hbar)^p}{\hbar} \frac{d^l}{dt^l} \left[\left\langle \frac{d^k A(\tau)}{dt^k} B \right\rangle_{eq} - \left\langle B \frac{d^k A(\tau)}{dt^k} \right\rangle_{eq} \right] \Big|_{\tau=0} \\ &= \frac{(i\hbar)^p}{\hbar} (-1)^l \left[\left\langle \frac{d^k A(\tau)}{dt^k} \frac{d^l B(-\tau)}{d(-t)^l} \right\rangle_{eq} - \left\langle \frac{d^l B(-\tau)}{d(-t)^l} \frac{d^k A(\tau)}{dt^k} \right\rangle_{eq} \right] \Big|_{\tau=0} \\ &= \frac{(-1)^l}{\hbar} \left\langle [\mathcal{L}^k A, \mathcal{L}^l B] \right\rangle_{eq} \end{aligned} \quad (29)$$

2.1.4 Funções de Correlação

De maneira similar à susceptibilidade $\chi''_{AB}(t, t') = \frac{1}{2\hbar} \langle [A(t), B(t')] \rangle_{eq}$, consideremos a função de correlação:

$$C_{AB}(t, t') \equiv \langle A(t)B(t') \rangle_{eq} \quad (30)$$

Note que podemos escrever:

$$\chi''_{AB}(t, t') = \frac{1}{2\hbar} [C_{AB}(t, t') - C_{BA}(t, t')] \quad (31)$$

De modo que se não há correlação entre A e B , $\chi''_{AB}(t, t')$ é identicamente nulo e, portanto, $\delta \langle A(t) \rangle = 0$, ou seja, a perturbação não desloca o valor médio do observável A do equilíbrio.

Por deduções completamente análogas ao caso de χ''_{AB} , é fácil verificar uma série de propriedades de $C_{AB}(t, t')$. Por exemplo, decorre imediatamente da eq.(17) que a correlação só depende da diferença de tempos: $C_{AB}(t, t') = C_{AB}(t - t') = C_{AB}(\tau)$. E, definindo sua transformada de Fourier:

$$\tilde{C}_{AB}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} C_{AB}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (32)$$

é imediato verificar (eqs. 23 e 24) que as formas explícitas de $C_{AB}(\tau)$ e $\tilde{C}_{AB}(\omega)$ numa base de autoestados de H_0 são dadas por:

$$C_{AB}(\tau) = \sum_{m,n} p_m \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle e^{-i\omega_{nm}\tau} \quad (33)$$

$$\tilde{C}_{AB}(\omega) = 2\pi \sum_{m,n} p_m \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle \delta(\omega - \omega_{nm}) \quad (34)$$

E, assim como fizemos para a função resposta, definimos também os momentos ponderados pela energia da função de correlação como:

$$m_{AB}^{(p)} \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (\hbar\omega)^p \tilde{C}_{AB}(\omega) d\omega \quad (35)$$

$$= \sum_{m,n} p_m (\hbar\omega_{nm})^p \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle \quad (36)$$

Novamente, por uma dedução inteiramente análoga à da eq. (29) (essencialmente trocando comutadores por produtos em todos as passagens na seção 2.1.3), obtemos a expressão:

$$m_{AB}^{(p)} = (-1)^l \langle (\mathcal{L}^k A)(\mathcal{L}^l B) \rangle_{eq} \quad (l + k = p) \quad (37)$$

Em particular, interessa-nos estudar o caso em que $A = B$ (explicitamente, $A^S = B^S$), ou seja, em que o observável é a própria perturbação (na verdade, proporcional à perturbação, pois esta tem uma modulação temporal $g(t)$). Um exemplo simples seria um operador de posição de uma partícula em 1 dimensão: $A = x$, e uma perturbação que “chacoalha” a partícula do tipo $H_1(t) = \alpha \cos(t) x$). Nesse caso, a expressão (36) é simplesmente:

$$m_A^{(p)} \equiv m_{AA}^{(p)} = \sum_{m,n} p_m (\hbar\omega_{nm})^p |\langle m|A|n\rangle|^2 \quad (38)$$

Em particular, no caso de o estado de equilíbrio ser simplesmente o estado fundamental (isto é, no caso de estarmos em temperatura zero) temos simplesmente $\rho^H = |0\rangle\langle 0|$ e $p_m = \delta_{m0}$, de modo que:

$$m_A^{(p)}(T=0) = \sum_n (\hbar\omega_{n0})^p |\langle 0|A|n\rangle|^2 \quad (39)$$

E da expressão (37) podemos escrever:

$$m_A^{(p)} = (-1)^l \langle (\mathcal{L}^k A)(\mathcal{L}^l A) \rangle_{eq} = \frac{1}{2} (-1)^l \left[\langle (\mathcal{L}^k A)(\mathcal{L}^l A) \rangle_{eq} + (-1)^p \langle (\mathcal{L}^l A)(\mathcal{L}^k A) \rangle_{eq} \right] \quad (40)$$

Que pode ser sumarizado em termos de comutadores ou anti-comutadores:

$$\bullet m_A^{(p)} = \frac{1}{2} (-1)^l \langle [\mathcal{L}^k A, \mathcal{L}^l A] \rangle_{eq} \quad p \text{ ímpar} \quad (41)$$

$$\bullet m_A^{(p)} = \frac{1}{2} (-1)^l \langle \{ \mathcal{L}^k A, \mathcal{L}^l A \} \rangle_{eq} \quad p \text{ par} \quad (42)$$

2.1.5 Frequências de Excitação de um Sistema Genérico

Dados os resultados construídos ao longo dessa seção, mostremos agora como podemos utilizá-los para extrair frequências de excitações de baixas energias de um sistema genérico.

Na base $|n\rangle$ de autoestados de H_0 , convencionamos as energias E_n ordenadas da forma $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq E_3 \dots$, de modo que as frequências de Bohr associadas ao estado fundamental $|0\rangle$ ($\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$) obedecem a $\omega_{10} \leq \omega_{20} \leq \omega_{30} \dots$. Seja $B = A$ a parte independente do tempo da perturbação associada a um modo coletivo de nosso interesse, esse ordenamento de frequências nos permite escrever a desigualdade:

$$\omega_{10}^2 \leq \omega_{10}^2 \frac{|\langle 0|A|1\rangle|^2 + \sum_{n \neq 1} |\langle 0|A|n\rangle|^2 (\omega_{n0}/\omega_{10})^3}{|\langle 0|A|1\rangle|^2 + \sum_{n \neq 1} |\langle 0|A|n\rangle|^2 (\omega_{n0}/\omega_{10})} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{m_A^{(3)}}{m_A^{(1)}} \quad (43)$$

Onde usamos a expressão (39) na igualdade a direita. Temos então um limite superior para esta energia de excitação:

$$\hbar\omega^{upper} = \sqrt{\frac{m_A^{(3)}}{m_A^{(1)}}} \quad (44)$$

Note que esse é um limite rigoroso no caso da excitação de mais baixa energia, mas o mesmo não é verdade para os demais modos. Entretanto, espera-se que esse seja um bom limitante para modos de energia suficientemente baixa.

O que é conveniente na equação (44) é que, através dos *Sum Rules* (equação 41), podemos escrever os momentos $m_A^{(1)}$ e $m_A^{(3)}$ em função de valores médios de comutadores de H_0 e A no estado fundamental:

$$m_A^{(1)} = -\frac{1}{2} \langle 0 | [\mathcal{L}^0 A, \mathcal{L}^1 A] | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \langle 0 | [A, [H_0, A]] | 0 \rangle \quad (45)$$

$$m_A^{(3)} = +\frac{1}{2} \langle 0 | [\mathcal{L}^1 F, \mathcal{L}^2 F] | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \langle 0 | [[A, H_0], [H_0, [H_0, A]]] | 0 \rangle \quad (46)$$

Nossa abordagem consiste em calcular explicitamente esses comutadores e valores médios para alguns operadores A específicos obtendo a frequência correspondente na equação (44). A rigor, o método fornece cotas superiores para essas energias; originalmente aplicado num contexto de gases quânticos numa armadilha harmônica em [1, 2], ele fornece valores em excelente acordo com dados numéricos e experimentais para os modos coletivos naqueles casos. E, de fato, se considerarmos um acoplamento suficientemente seletivo – isto é, um operador A que acople o estado fundamental $|0\rangle$ a um estado excitado $|p\rangle$, de modo a termos $|\langle 0 | A | p \rangle|^2 \gg |\langle 0 | A | n \neq p \rangle|^2$ – a expressão (43) nos dá praticamente uma igualdade:

$$\omega_{p0}^2 \simeq \omega_{p0}^2 \frac{|\langle 0 | A | p \rangle|^2 + \sum_{n \neq p} |\langle 0 | A | n \rangle|^2 (\omega_{n0}/\omega_{p0})^3}{|\langle 0 | A | p \rangle|^2 + \sum_{n \neq p} |\langle 0 | A | n \rangle|^2 (\omega_{n0}/\omega_{p0})} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{m_A^{(3)}}{m_A^{(1)}} \quad (47)$$

Finalmente, apontamos que uma outra abordagem mais rigorosa e comumente utilizada consiste em descrever a densidade do sistema como a densidade de equilíbrio adicionada de uma flutuação ($n(\mathbf{x}, t) = n_{eq}(\mathbf{x}) + \delta n(\mathbf{x}, t)$) e encontrar, via equações hidrodinâmicas, os modos normais de oscilação para δn [10]. Entretanto, essa abordagem é consideravelmente mais complicada que a aplicação de *Sum Rules*, sobretudo quando não temos mais simetria esférica no estado de equilíbrio.

2.2 Sistema Físico e Características de Equilíbrio

O nosso sistema físico de interesse é um gás bosônico aprisionado numa armadilha tipo bolha, cujo potencial é descrito por um oscilador harmônico radial isotrópico cujo mínimo está localizado numa casca esférica de raio r_0 :

$$U_{trap}(r) = \frac{1}{2} M \omega_0^2 (r - r_0)^2 \quad (48)$$

e cujos átomos interagem entre si por interações de contato (espalhamento de onda s) e dipolo-dipolo, nas quais todos os átomos têm seu momento de dipolo $\vec{\mu}$ alinhado paralelamente a uma certa direção (que convencionamos ao longo do eixo z). Podemos escrever esse potencial na forma:

$$V_{int}(\mathbf{x}) = V_s(\mathbf{x}) + V_{dd}(\mathbf{x}) = g \left\{ \delta(\mathbf{x}) + \frac{3\epsilon_{dd}}{4\pi|\mathbf{x}|^3} \left(1 - 3 \frac{z^2}{|\mathbf{x}|^2} \right) \right\} \quad (49)$$

Onde $g = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a_s$ está relacionado ao comprimento do espalhamento de onda s e $\epsilon_{dd} = \mu^2/3g$ é proporcional ao momento de dipolo ao quadrado de cada átomo e quantifica a magnitude relativa das interações dipolares em relação às de contato. O sistema é ilustrado pictoricamente na Figura 1:

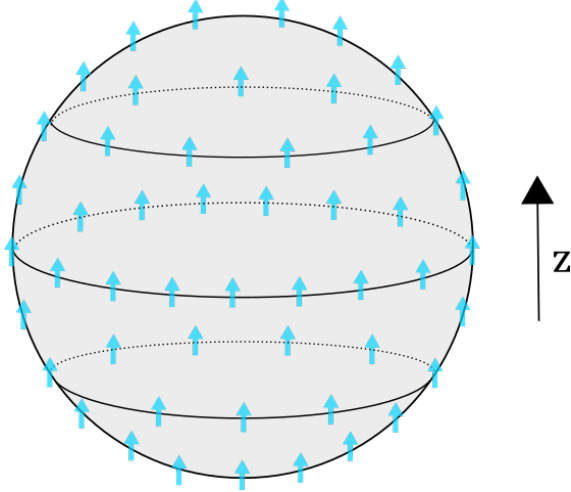


Figura 1: Ilustração qualitativa do sistema, com átomos dipolares dispostos ao longo de uma casca esférica, com momento de dipolo alinhado ao longo do eixo z .

Ressaltamos que um potencial de confinamento tipo bolha é produzido através de potenciais adiabáticos vestidos de radiofrequência [5] (sobre os quais não entraremos em maiores detalhes), para o qual a aproximação harmônica (eq. 48) é válida no limite em que temos uma casca esférica muito fina, ou seja, num regime de forte confinamento no qual a espessura radial típica do condensado (r_1) é muito menor que r_0 (definindo o parâmetro adimensional $c \equiv r_0/r_1$, escrevemos essa condição como $c \gg 1$).

Levando em conta os potenciais de aprisionamento (48) e de interação (49), temos o hamiltoniano:

$$H_0 = H_{kin} + H_{trap} + H_{int} = \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_0^2 (r_i - r_0)^2 + \sum_{j < i} V_{int}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \right\} \quad (50)$$

onde $r_i = |\mathbf{x}_i|$, e a soma se dá sobre todas as partículas do sistema.

Dado o hamiltoniano do sistema nesse regime, a primeira tarefa de interesse é obter seu *estado fundamental*: além de ter grande interesse intrínseco, por determinar as propriedades de equilíbrio do sistema numa fase condensada, ele é necessário para calcularmos explicitamente as expressões dadas pelos *Sum Rules* (eqs. 45, 46). *Entretanto, seu cálculo não faz parte do escopo deste trabalho, tendo sido realizado por um aluno de mestrado do grupo. Nos limitamos a descrevê-lo em linhas gerais e discutir os principais aspectos dos resultados.*

A abordagem consiste em assumir um Ansatz da forma:

$$\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{A} e^{(r-r_0)^2/2r_1^2} \times \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \quad (51)$$

onde \mathcal{A} é uma constante de normalização, e separamos a dependência radial e a angular, de maneira que temos um sistema radialmente congelado no estado fundamental de um oscilador harmônico e uma função angular genérica que aparece expandida nos harmônicos esféricos Y_l^m , para a qual queremos obter os coeficientes $a_{l,m}$.

Devido à anisotropia introduzida pela interação dipolo-dipolo (que diferencia o eixo z dos demais), não teremos um estado fundamental esfericamente simétrico. Entretanto, ainda temos simetria azimutal e por paridade, de modo se espera que contribuam apenas os harmônicos esféricos com $m = 0$ e l par. Esses coeficientes foram calculados através de uma minimização numérica da energia do sistema, onde a expansão foi truncada num certo valor l_{max} .

De fato, o estado fundamental obtido apresenta as simetrias esperadas. Para $\epsilon_{dd} = 0$ temos distribuição uniforme de densidade, e, conforme aumentamos ϵ_{dd} , aparece uma dependência em θ : o condensado passa a se rarefazer nos pólos ($\theta = 0$ e $\theta = \pi$), e a se concentrar ao redor do plano equatorial ($\theta = \pi/2$), conforme ilustra a Figura 2. Esse comportamento está de acordo com o que se pode esperar intuitivamente, pois a interação dipolar é puramente repulsiva nos pólos, onde os átomos estão dispostos lado a lado, mas tem uma componente atrativa no equador, onde parte dos átomos estão “acima” ou “abaixo” uns dos outros.

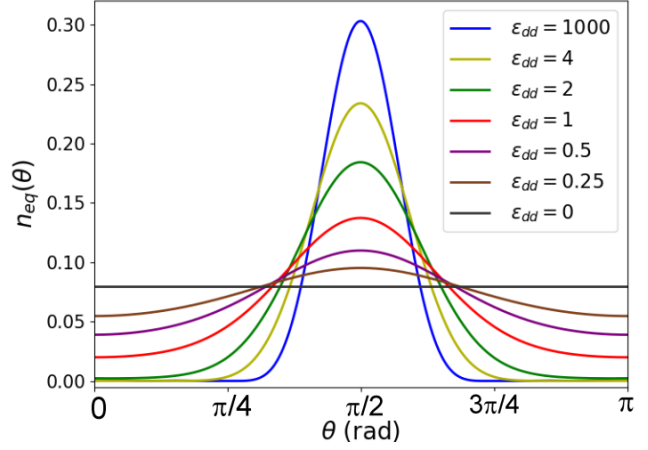


Figura 2: Densidades de equilíbrio para diversos valores de ϵ_{dd} . Nota-se picos de densidade cada vez mais acentuados em $\theta = \pi/2$ à medida em que ϵ_{dd} aumenta. Aqui $n_{eq}(\theta)$ é proporcional a $|\psi(r_0, \theta)|^2$.

3 Aplicações: Modos Coletivos

Com a abordagem dos *Sum Rules*, calculamos a seguir as frequências de 3 modos coletivos de interesse. A aplicação é ilustrada em detalhes para o modo de monopolo, que é particularmente simples, apontando algumas características importantes do método e calculando algumas passagens não triviais. Nos demais modos, nos limitamos a exibir e discutir os principais resultados. Em todos os casos, calculamos as expressões numa armadilha cheia (com $r_0 = 0$, à qual nos referimos simplesmente como *armadilha harmônica*), recuperando expressões conhecidas [2], e na bolha ($r_0 \neq 0$). Nesta última, calculamos valores médios numericamente a fim de comparar com resultados obtidos via equações hidrodinâmicas [3].

3.1 Breathing Mode: Operador de Monopolo

Esse modo corresponde a contrações e expansões radiais do condensado, que ocorrem em fase em todas as direções do espaço. Excita-se essa oscilação com uma perturbação $H_1(t) = g(t)A$, que modula o confinamento radial temporalmente, por exemplo:

$$H_1(t) = \alpha \cos(\Omega t) \sum_i r_i^2 \quad \Rightarrow \quad A_{mon} = \sum_i r_i^2 \quad (52)$$

Não havendo ambiguidade dentro de cada subseção, nos referiremos a operadores de excitação específicos simplesmente como A , e a seus momentos $m_A^{(p)}$ como m_p .

Note que A só envolve funções das posições \mathbf{x}_i , de modo que seu comutador com H_0 só envolve o termo cinético: $[H_0, A] = \frac{1}{2M} \sum_i [\mathbf{p}_i^2, A]$. Desse modo, características particulares da armadilha e das

interações só aparecem em comutadores de ordem mais alta (como $[H_0, [H_0, A]]$). Isso ocorre para todos os operadores de excitação aqui considerados, simplificando a tarefa de considerar diferentes armadilhas e termos de interação.

3.1.1 Armadilha Harmônica

Tratemos primeiramente do caso mais simples e bem conhecido de uma armadilha harmônica isotrópica centrada na origem, isto é, tomando $r_0 = 0$ no nosso potencial de aprisionamento. Temos os comutadores:

$$\bullet [H_0, A] = \frac{1}{2M} \sum_i [\mathbf{p}_i, r_i^2] = -\frac{2i\hbar}{M} \sum_i \left\{ \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{p}_i + \frac{\hbar}{2i} \right\} \quad (53)$$

$$\bullet [A, [H_0, A]] = \frac{4\hbar^2}{M} \sum_i r_i^2 \quad (54)$$

e o momento m_1 :

$$m_1 \equiv \frac{1}{2} \langle [A, [H_0, A]] \rangle = \frac{2\hbar^2}{M} \sum_i \langle r_i^2 \rangle = \frac{2\hbar^2}{M} N \langle r^2 \rangle = \frac{4\hbar^2}{M^2 \omega_0^2} \langle U \rangle \quad (55)$$

Onde N denota o número total de partículas do condensado. Na última igualdade, reescrevemos o valor médio $\langle r^2 \rangle$ em termos do valor médio da energia potencial de aprisionamento $\langle U \rangle$. Já para o momento m_3 , precisamos dos comutadores:

$$\bullet [H_0, [H_0, A]] = \frac{2\hbar^2}{M} \left\{ -\frac{1}{M} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + M\omega_0^2 \sum_i r_i^2 + \sum_{i<j} \sum_k (\mathbf{x}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}_k} V_{int}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) \right\} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \bullet [[A, H_0], [H_0, [H_0, A]]] &= \frac{4\hbar^3}{M^2} i \left\{ \frac{1}{M} \sum_i [\mathbf{p}_i^2, \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{p}_i] + M\omega_0^2 \sum_i \mathbf{x}_i \cdot [\mathbf{p}_i, r_i^2] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i<j} \sum_{k,l} (\mathbf{x}_l \cdot [\mathbf{p}_l, \mathbf{x}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}_k} V_{int}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)]) \right\} \\ &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left\{ \frac{2}{M} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + 2M\omega_0^2 \sum_i r_i^2 + \sum_{i<j} \sum_{k,l} \{ \mathbf{x}_l \cdot \nabla_{\mathbf{x}_l} (\mathbf{x}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}_k} V_{int}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) \} \right\} \\ &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left\{ \frac{2}{M} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + 2M\omega_0^2 \sum_i r_i^2 + \sum_{i<j} \{ (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla ((\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla V_{int}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)) \} \right\} \quad (57) \end{aligned}$$

Onde, na última linha, subentende-se que a diferenciação representada pelo operador ∇ (sem índice) se dá em relação ao argumento da função $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$.

Note que os diferentes termos não-cinéticos do hamiltoniano não se misturam; as contribuições provenientes do termo de aprisionamento e de cada termo de interação simplesmente se somam. Isso continua valendo ao tomarmos o valor médio (que é uma operação linear) e se aplica a todos os operadores de excitação A que aqui consideraremos, pelo simples fato de A depender apenas de \mathbf{x}_i .

Calculando então o momento m_3 , temos:

$$m_3 \equiv \frac{1}{2} \langle [[A, H_0], [H_0, [H_0, A]]] \rangle = \frac{2\hbar^4}{M^2} (4\langle T \rangle + 4\langle U \rangle + I) \quad (58)$$

$$\begin{aligned}
\text{onde: } I &= \sum_{i < j} \int d^3 x_i n(\mathbf{x}_i) \int d^3 x_j n(\mathbf{x}_j) [(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla ((\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j))] \\
&= \sum_{i < j} \int d^3 R \int d^3 X n(\mathbf{R} + \mathbf{X}/2) n(\mathbf{R} - \mathbf{X}/2) [\mathbf{X} \cdot \nabla (\mathbf{X} \cdot \nabla V_{int}(\mathbf{X}))]
\end{aligned} \tag{59}$$

E $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j)$ e $\mathbf{X} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ são, respectivamente, a coordenada de centro de massa e a coordenada relativa. Procedemos, então, expandindo as derivadas em (59) e fazendo integrações por partes, nas quais se anulam termos de superfície e termos com integrando proporcional a $\mathbf{X} \nabla V_{int}(\mathbf{X})$. Os únicos termos que contribuem são proporcionais a $n(\mathbf{R} + \mathbf{X}/2) n(\mathbf{R} - \mathbf{X}/2) V_{int}(\mathbf{X})$, resultando:

$$I = 9 \sum_{i < j} \int d^3 R \int d^3 X n(\mathbf{R} + \mathbf{X}/2) n(\mathbf{R} - \mathbf{X}/2) V_{int}(\mathbf{X}) = 9 \langle H_{int} \rangle \tag{60}$$

Ou seja, acabamos com um termo proporcional à energia média de interação. Finalmente, temos a frequência de excitação:

$$\hbar^2 \omega_{mon}^2 = \frac{m_3}{m_1} = \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{2} \left(\frac{4 \langle T \rangle + 4 \langle U \rangle + 9 \langle H_{int} \rangle}{\langle U \rangle} \right) \tag{61}$$

$$\Rightarrow \omega_{mon} = \omega_0 \sqrt{\frac{4 \langle T \rangle + 4 \langle U \rangle + 9 \langle H_{int} \rangle}{2 \langle U \rangle}} \tag{62}$$

E, notando que na armadilha harmônica ($r_0 = 0$), vale $U(\alpha \mathbf{x}) = \alpha^2 U(\mathbf{x})$, e que para o nosso potencial de interação vale $V_{int}(\alpha \mathbf{x}) = \alpha^{-3} V_{int}(\mathbf{x})$, o Teorema o Virial dá a relação:

$$2 \langle T \rangle - 2 \langle U \rangle + 3 \langle H_{int} \rangle = 0 \tag{63}$$

de modo que a frequência (62) pode ser reescrita como em [2]: $\omega_{mon} = \omega_0 \sqrt{5 - \langle T \rangle / \langle U \rangle}$ (64)

3.1.2 Armadilha Tipo Bolha

Conforme discutido na seção anterior, uma mudança na armadilha não afeta os comutadores de ordem mais baixa $[H_0, A]$ e $[A, [H_0, A]]$, de modo que a expressão para m_1 continua sendo:

$$m_1 = \frac{2\hbar^2}{M} N \langle r^2 \rangle \tag{65}$$

Mas não vale mais a última igualdade de (55), pois na bolha $\langle U \rangle$ não é proporcional a $\langle r^2 \rangle$, mas sim a $\langle (r - r_0)^2 \rangle$. Note também que, apesar de a expressão ser a mesma, isso não significa que o valor de m_1 é o mesmo, pois agora o valor médio está sendo avaliado no estado fundamental da bolha.

Já nos comutadores de ordem mais alta só aparecem modificações no segundo termo (referente à energia de aprisionamento). Para $[H_0, [H_0, A]]$ (eq. 56) esse termo se torna:

$$M \omega_0^2 \sum_i r_i^2 \rightarrow M \omega_0^2 \sum_i (r_i^2 - r_0 r_i) \tag{66}$$

Isso acarreta uma mudança no termo correspondente em $[[A, H_0], [H_0, [H_0, A]]]$ (eq. 57):

$$2M\omega_0^2 \sum_i r_i^2 \rightarrow M\omega_0^2 \sum_i (2r_i^2 - r_0 r_i) \quad (67)$$

De modo que a única modificação em relação à armadilha harmônica é o termo subtraído na eq. (67). Tomando seu valor médio, temos o momento:

$$\begin{aligned} m_3 &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left[4\langle T \rangle + 2M\omega_0^2 N \langle r^2 \rangle + 9\langle H_{int} \rangle - M\omega_0^2 r_0 \sum_i \int d^3x_i n(\mathbf{x}_i) r_i \right] \\ &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left[4\langle T \rangle + 2M\omega_0^2 N (\langle r^2 \rangle - \frac{r_0}{2} \langle r \rangle) + 9\langle H_{int} \rangle \right] \end{aligned} \quad (68)$$

Nessa expressão, é conveniente eliminarmos o valor médio $\langle r^2 \rangle$ em favor de $\langle U \rangle$ e $\langle r \rangle$, de maneira que obtemos a seguinte expressão para a frequência:

$$\omega_{mon} \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m_3}{m_1}} = \omega_0 \left[\frac{4\langle T \rangle + 4\langle U \rangle + NM\omega_0^2 (3r_0 \langle r \rangle - 2r_0^2) + 9\langle H_{int} \rangle}{2\langle U \rangle + NM\omega_0^2 (2r_0 \langle r \rangle - r_0^2)} \right]^{1/2} \quad (69)$$

Que se reduz à expressão (62) para $r_0 = 0$. Note que, na bolha, deixa de valer que $U(\alpha\mathbf{x}) = \alpha^2 U(\mathbf{x})$, de modo que não podemos mais eliminar $\langle H_{int} \rangle$ da expressão por meio do Teorema do Virial. Entretanto, podemos ainda simplificá-la notando que $\langle r \rangle = r_0$ no limite de casca fina $r_1 \ll r_0$:

$$\omega_{mon} = \omega_0 \left[\frac{4\langle T \rangle + 4\langle U \rangle + 9\langle H_{int} \rangle + NM\omega_0^2 r_0^2}{2\langle U \rangle + NM\omega_0^2 r_0^2} \right]^{1/2} \quad (70)$$

Dessa expressão, fica evidente que ω_{mon} tende a se aproximar da frequência da armadilha conforme r_0 cresce. É então de se esperar que no limite de r_0 “muito grande” ($NM\omega_0^2 r_0 \gg \langle U \rangle, \langle T \rangle, \langle H_{int} \rangle$), teremos que $\omega_{mon} \cong \omega_0$. A rigor, é claro, é necessário avaliar com cuidado como os valores médios da energia mudam conforme r_0 cresce para verificar essas tendências. Numericamente, obtivemos os seguintes valores de frequência para uma casca com $c \equiv r_0/r_1 = 20$:

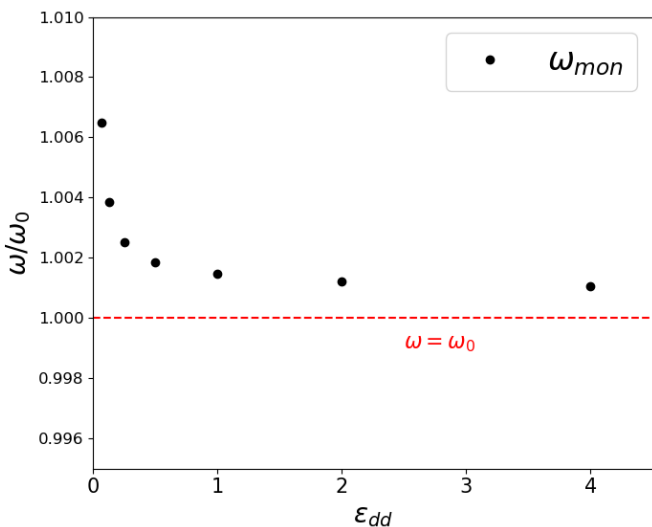


Figura 3: Frequências relativas de monopolo para $c = 20$.

Para $\epsilon_{dd} \rightarrow 0$, ω_{mon} se torna muito próxima de ω_0 .

De fato, obtemos na bolha frequências de monopolo muito próximas de ω_0 (com desvios inferiores a 10^{-2}), que é o mesmo resultado obtido via equações hidrodinâmicas no regime não dipolar ($\epsilon_{dd} = 0$) [3]. Como temos uma casca de espessura finita, e esperamos que $\omega_{mon} > \omega_0$ na armadilha harmônica (eq. 64), de fato esperaríamos obter ω_{mon}/ω_0 ligeiramente maior que 1 nesse limite. Já ao aumentar ϵ_{dd} , observa-se uma ligeira diminuição nas frequências, apresentando uma discreta assinatura da interação dipolar.

3.2 Modo de Quadrupolo ($|m| = 2$)

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 (ele é identificado como $|m| = 2$ pois essa excitação escrita em termos de harmônicos esféricos Y_l^m é proporcional a $Y_2^2 + Y_2^{-2}$ [2]). Essa excitação é realizada provocando variações $\delta\omega$ ($\ll \omega_0$) na frequência de aprisionamento em x e y em oposição de fase, de maneira que o operador A associado é da forma:

$$A_{|m|=2} = \sum_i [((\omega_0 + \delta\omega)^2 - \omega_0^2)] x_i^2 + [((\omega_0 - \delta\omega)^2 - \omega_0^2)] y_i^2 \approx 2\omega_0 \delta\omega \sum_i (x_i^2 - y_i^2) \quad (71)$$

Onde ignoramos constantes escalares multiplicativas (que se cancelam na razão m_3/m_1). Temos:

$$A_{|m|=2} = \sum_i (x_i^2 - y_i^2) \quad (72)$$

3.2.1 Armadilha Harmônica

Em relação ao momento m_1 , temos:

$$[A, [H_0, A]] = \frac{4\hbar^2}{M} \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \Rightarrow m_1 = \frac{2\hbar^2}{M} \left\langle \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \right\rangle = \frac{8\hbar^2}{M^2 \omega_0^2} \langle U_\perp \rangle \quad (73)$$

Onde $\langle U_\perp \rangle$ denota o valor médio da energia potencial em uma direção no plano xy :

$$\langle U_\perp \rangle \equiv \langle U_y \rangle = \langle U_x \rangle = \frac{1}{2} M \omega_0^2 \sum_i \langle x_i^2 \rangle \quad (74)$$

E, em relação ao momento m_3 , temos o comutador:

$$\begin{aligned} [[A, H_0], [H_0, [H_0, A]]] &= \frac{4\hbar^4}{M^2} \left\{ \frac{2}{M} \sum_i (p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2) + 2M\omega_0^2 \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i < j} \left(X_{ij} \frac{\partial}{\partial X_{ij}} \left[X_{ij} \frac{\partial V_{int}}{\partial X_{ij}}(\mathbf{X}_{ij}) \right] + Y_{ij} \frac{\partial}{\partial Y_{ij}} \left[Y_{ij} \frac{\partial V_{int}}{\partial Y_{ij}}(\mathbf{X}_{ij}) \right] - 2X_{ij} Y_{ij} \frac{\partial^2 V_{int}}{\partial X_{ij} \partial Y_{ij}}(\mathbf{X}_{ij}) \right) \right\} \quad (75) \end{aligned}$$

Ao tomar o valor médio em (75), há um cancelamento entre a contribuição dos termos puros e dos termos cruzados de interação (por simetria azimutal), simplificando bastante a expressão para m_3 :

$$m_3 = \frac{16\hbar^4}{M^2} (\langle T_\perp \rangle + \langle U_\perp \rangle) \quad (76)$$

Onde definimos $\langle T_\perp \rangle$ de maneira análoga a $\langle U_\perp \rangle$:

$$\langle T_\perp \rangle \equiv \langle T_y \rangle = \langle T_x \rangle = \frac{1}{2M} \sum_i \langle p_{x_i}^2 \rangle \quad (77)$$

$$\text{Finalmente, obtemos a frequência (como em [2]):} \quad \omega_{|m|=2} = \omega_0 \sqrt{2(1 + \langle T_\perp \rangle / \langle U_\perp \rangle)} \quad (78)$$

3.2.2 Armadilha Tipo Bolha

Como nos demais casos, os comutadores de ordem mais baixa e a expressão para m_1 permanecem inalterados (não valendo mais a última igualdade em (73), pois $\langle U \rangle$ não é proporcional a $\langle r^2 \rangle$ nessa armadilha). Pela simetria azimutal do estado fundamental, podemos reescrever m_1 como:

$$m_1 = \frac{4\hbar^2}{M} N \langle x^2 \rangle \quad (79)$$

Também como nos demais casos, altera-se somente o segundo termo (referente à energia potencial da armadilha) dos comutadores de ordem mais alta. Temos a alteração na eq. (75):

$$2M\omega_0^2 \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \rightarrow 2M\omega_0^2 \sum_i \left[r_{i\perp}^2 \left(1 - \frac{r_0}{r_i} \right) + r_0 \frac{x_i^2 - y_i^2}{2r_i^3} \right] \quad (80)$$

Onde $r_{i\perp}^2 = x_i^2 + y_i^2$. Pela simetria azimutal do sistema, o valor médio do último termo se anula, de maneira que ele não contribui para m_3 . Ficamos então com:

$$m_3 = \frac{4\hbar^4}{M^2} \left\{ 4\langle T_\perp \rangle + 2NM\omega_0^2 \left\langle r_\perp^2 \left(1 - \frac{r_0}{r} \right) \right\rangle \right\} \quad (81)$$

Ademais, se o pico de densidade na direção radial for suficientemente estreito, de modo que quase toda a contribuição na integral vier da região $r \approx r_0$, o segundo termo se torna praticamente nulo, e ficamos com:

$$m_3 = \frac{16\hbar^4}{M^2} \langle T_\perp \rangle \Rightarrow \omega_{|m|=2} = 2\sqrt{\frac{\langle T_x \rangle}{NM\langle x^2 \rangle}} \quad (82)$$

Calculamos alguns valores dessa frequência numa casca esférica com $c = 20$, conforme exposto na Figura 4:

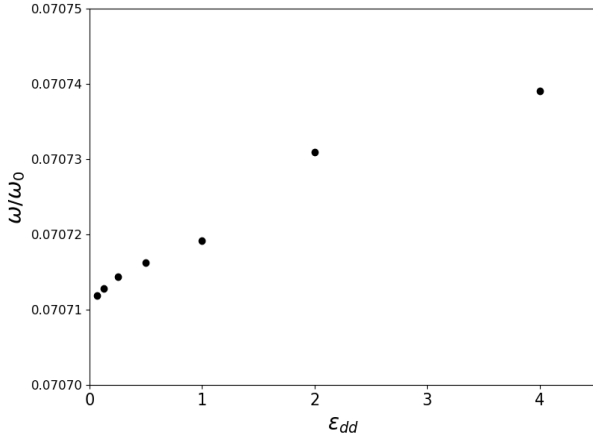


Figura 4: Frequências de oscilação do modo de quadrupolo $|m| = 2$ numa casca com $c = 20$.

que é precisamente o resultado que obtemos para esse quadrupolo para $\epsilon_{dd} \rightarrow 0$. Nota-se ainda que essas frequências variam muito pouco com ϵ_{dd} , com variações da ordem de $\sim 10^{-5}\omega_0 \approx 10^{-4}\omega$.

Os valores obtidos para as frequências de quadrupolo são consideravelmente menores do que ω_0 , com quase 2 ordens de grandeza de separação. Em especial, no limite não dipolar, isso é precisamente o que é descrito na literatura no limite de casca fina [3]: observando a expressão explícita, obtida via equações hidrodinâmicas em [3], esse modo tem uma frequência relativa da ordem de c^{-1} : $\omega_l = c^{-1}\omega_0\sqrt{l(l+1)/3}$, e identificando o modo de quadrupolo com $l = 2$, temos $\omega/\omega_0 = \sqrt{2}/20 \approx 0,0707$,

3.3 Oscilações de Centro de Massa: Operador de Dipolo

Os modos de dipolo correspondem a oscilações do centro de massa do sistema em torno da configuração de equilíbrio. Consideramos então 3 perturbações, proporcionais a deslocamentos ao longo dos 3 eixos coordenados:

$$A_x = \sum_i x_i \quad A_y = \sum_i y_i \quad A_z = \sum_i z_i \quad (83)$$

3.3.1 Armadilha Harmônica

Com a escolha de operadores feita acima, é simples demonstrar (ver seção 3.3.3) que termos de interação não modificam as expressões para as frequências, conforme seria de se esperar para uma oscilação de centro de massa, o que simplifica enormemente as contas. Escolhendo, por exemplo, a direção x para efetuá-las, obtemos os comutadores:

$$\bullet [H_0, A_x] = \frac{1}{2M} \sum_i [p_{x_i}^2, x_i] = -\frac{i\hbar}{M} \sum_i p_{x_i} \quad (84)$$

$$\bullet [A_x, [H_0, A_x]] = \frac{i\hbar}{M} \sum_i [p_{x_i}, x_i] = \frac{\hbar^2}{M} N \quad (85)$$

$$\bullet [H_0, [H_0, A_x]] = \hbar^2 \omega_0^2 \sum_i x_i \quad (86)$$

$$\bullet [[A_x, H_0], [H_0, [H_0, A_x]]] = \frac{\hbar^4 \omega_0^2}{M} N \quad (87)$$

Que nos dão os momentos:

$$m_1 = \frac{N\hbar^2}{2M} \quad (88)$$

$$m_3 = \frac{N\hbar^4 \omega_0^2}{2M} \quad (89)$$

E a frequência de excitação:

$$\hbar^2 \omega_x^2 = \frac{m_3}{m_1} \Rightarrow \omega_x = \omega_0 \quad (90)$$

E é fácil ver que os resultados são idênticos para oscilações nas direções y e z . Vemos que para a armadilha harmônica, a frequência de oscilações do centro de massa é precisamente a frequência da armadilha ω_0 , independentemente das interações no condensado, em perfeito acordo não só com os resultados conhecidos para esse método [1, 2], mas também com o que é conhecido da literatura acerca desses modos.

3.3.2 Armadilha Tipo Bolha

Os comutadores $[H_0, A_x]$ e $[A_x, [H_0, A_x]]$ são os mesmos da armadilha cheia, bem como o momento m_1 . Os demais comutadores passam a ser:

$$\bullet [H_0, [H_0, A_x]] = \frac{i\hbar\omega_0^2}{2} \sum_i [p_{x_i}, (r_i - r_0)^2] = \hbar^2 \omega_0^2 \left(1 - \frac{r_0}{r_i}\right) x_i \quad (91)$$

$$\bullet [[A_x, H_0], [H_0, [H_0, A_x]]] = \frac{i\hbar^3 \omega_0^2}{M} \sum_i \left([p_{x_i}, x_i] - r_0 [p_{x_i}, \frac{x_i}{r_i}] \right) = \frac{\hbar^4 \omega_0^2}{M} (N - J_x) \quad (92)$$

$$\text{Onde definimos:} \quad J_x \equiv r_0 \sum_i \frac{r_i^2 - x_i^2}{r_i^3} = r_0 \sum_i \frac{y_i^2 + z_i^2}{r_i^3} \quad (93)$$

E vemos que esse comutador resulta num termo idêntico ao caso da armadilha harmônica subtraído de um termo estritamente positivo. Temos então o momento m_3 e a frequência de excitação:

$$m_3 = \frac{N\hbar^4 \omega_0^2}{2M} \left(1 - \frac{1}{N} \langle J_x \rangle\right) \Rightarrow \omega_x = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m_3}{m_1}} = \omega_0 \left[1 - \frac{1}{N} \langle J_x \rangle\right]^{1/2} \quad (94)$$

O resultado é análogo para oscilações em y e z , bastando substituir o operador J_x por J_y ou J_z , definidos por:

$$J_y \equiv r_0 \sum_i \frac{r_i^2 - y_i^2}{r_i^3} \quad J_z \equiv r_0 \sum_i \frac{r_i^2 - z_i^2}{r_i^3} \quad (95)$$

Note que em todos os casos a frequência de oscilação é estritamente menor que a frequência da armadilha ($\omega_x, \omega_y, \omega_z < \omega_0$), em contraste com os resultados extensivamente conhecidos em armadilhas harmônicas usuais, nas quais oscilações de centro de massa ocorrem sempre na frequência ω_0 , acusando uma assinatura muito característica da armadilha tipo bolha.

Além disso, note que nessa armadilha, *apesar de as interações não modificarem as expressões das frequências, elas modificam o seu valor*, pois elas alteram qual é o estado fundamental no qual tomamos a média dos operadores. Quando não há interação dipolo-dipolo ($\epsilon_{dd} = 0$), o estado fundamental é esfericamente simétrico e as frequências de oscilação são isotrópicas. Entretanto, quando essa interação está presente, temos somente simetria azimutal, de modo que $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$. Nossos resultados numéricos estão dispostos na Figura 5:

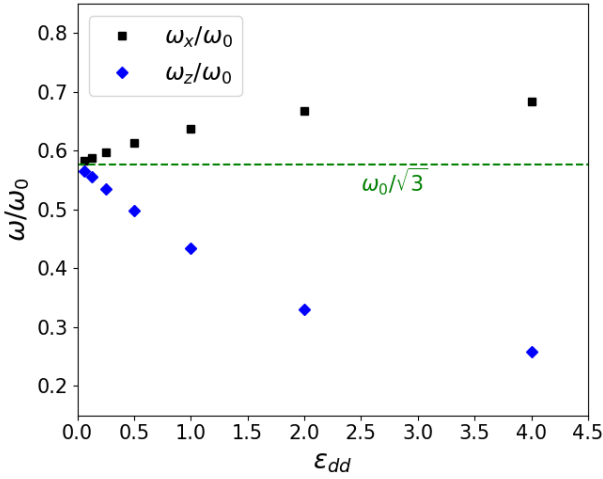


Figura 5: Frequências relativas de dipolo para $c = 20$, para oscilações nas direções x e z . Para $\epsilon_{dd} = 0$ as frequências coincidem em $\omega_0/\sqrt{3}$. À medida que ϵ_{dd} aumenta, ω_x cresce e ω_y diminui.

Já quando aumentamos a interação dipolar, o comportamento observado é que a frequência em z diminui enquanto que a em x aumenta. Isso já era de se esperar, dado a forma de J_x e J_z e o comportamento do estado fundamental à medida que ϵ_{dd} aumenta: a densidade diminui nos pólos e se acumula ao redor do equador, de modo que $\langle z^2 \rangle$ diminui e $\langle x^2 \rangle$ aumenta. Num caso limite em que a densidade colapsa completamente no anel equatorial, teríamos $\langle z^2 \rangle = 0$ e $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle r^2 \rangle$, de modo que ω_z se anula e ω_x, ω_y tendem a $\omega_0/\sqrt{2}$.

3.3.3 Termos de Interação

Demonstremos agora que adicionar um termo genérico de interação no Hamiltoniano $H_{int} = \sum_{i<j} V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ não altera as expressões das frequências.

É fácil ver que H_{int} não altera as expressões para $[H_0, A_x]$ e $[A_x, [H_0, A_x]]$ (e consequentemente para m_1), pois H_{int} e A comutam. Entretanto, em princípio, a interação poderia contribuir para comu-

De fato, as frequências ω_x e ω_z convergem para $\epsilon_{dd} \rightarrow 0$, num valor nas vizinhanças de $\omega_0/\sqrt{3}$: esse valor de fato é esperado nesse limite, pois para uma densidade homogênea $\langle x^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle$, de modo que é fácil verificar que, no limite de casca fina, $\langle J_x \rangle = \langle J_z \rangle = \frac{2}{3} N$. Entretanto, os resultados conhecidos da literatura [3] apontam que a frequência desses modos vai a zero no limite de casca fina. Em princípio isso não contradiz o resultado que obtivemos, que se trata de um limite superior para a frequência, mas é curioso que deixamos de ter uma igualdade aproximada.

tador $[H_0, [H_0, A_x]]$ (eqs. 86 e 91), com um termo da forma (eq. 85):

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

Onde o somatório em k trivialmente se anula, pois há um termo com $k=i$ e outro com $k=j$.

4 Conclusões

A abordagem dos *Sum Rules*, já bem testada na literatura para geometrias usuais, se mostrou bastante promissora para calcular frequências de excitação de um condensado numa armadilha tipo bolha: no limite não dipolar obtemos, através de cálculos analíticos e com relativa facilidade, resultados para as frequências de excitação em excelente acordo numérico com a literatura nos modos de monopolo e quadrupolo – para os modos de dipolo, são obtidos valores fisicamente razoáveis, mas em tensão com os resultados obtidos por equações hidrodinâmicas, requerindo ainda ulterior análise e discussões; além disso, foi possível prontamente estender esses resultados para considerar interações dipolares, destacando suas assinaturas características nas frequências desses modos.

Destacamos que o presente trabalho faz parte de um artigo submetido ao *Scientific Reports* sobre condensados numa armadilha tipo bolha [11].

Referências

- [1] S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* 77, 2360 (1996)
- [2] Takashi Kimura, Hiroki Saito and Masahito Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* 68.1477 (1999)
- [3] Kuei Sun et al, *Phys. Rev. A* 98, 013609 (2018)
- [4] T. Lahaye et al, *Rep. Prog. Phys.* 72 126401 (2009)
- [5] O. Zobay, B. M. Garraway, *Phys. Rev. A* 69, 023605 (2003)
- [6] arXiv 1906.05885 (2019)
- [7] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* 12.6 (1957), pp. 570–586.
- [8] HEROLD, M. *Sum-Rule Approach for Collective Excitations of Ultracold Quantum Gases*. Axel Pelster (2012). Bachelor Thesis - Freie Universität Berlin (2012)
- [9] LIPPARINI, Enrico; *Modern Many-Particle Physics: Atomic Gases, Quantum Dots and Quantum Fluids* (World Scientific, 2003)
- [10] C. J. Pethick and H. Smith; *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, 2002)
- [11] P. Diniz, E. Oliveira, A. Lima, E. Henn, *Ground state and collective excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap*, submetido ao *Scientific Reports* (2019)