

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

Joel Bacellar Neves

**Condensado de Bose-Einstein Aprisionado no Núcleo de um
Vórtice**

São Carlos
2023

Joel Bacellar Neves

Condensado de Bose-Einstein Aprisionado no Núcleo de um Vórtice

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao programa de graduação do Bacharelado em Física com Habilitação Teórico-Experimental do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel.

Orientador: Mônica Andrioli Caracanhas Santarelli

São Carlos
2023

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

Neves, Joel Bacellar

Condensado de Bose-Einstein Aprisionado no Núcleo de um Vórtice / Joel Bacellar Neves; orientadora Monica Andrioli Caracanhas Santarelli -- São Carlos, 2023.
20 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Física) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2023.

1. Condensado de Bose-Einstein. 2. Mistura de gases atômicos. 3. Vórtices. I. Santarelli, Monica Andrioli Caracanhas, orient. II. Título.

Agradecimentos

Esse trabalho é dedicado à minha orientadora e aos meus colegas da academia. Gostaria de agradecer especialmente minha namorada, que esteve comigo e me apoiou quando mais precisei. Agradeço também aos meus pais pelo suporte constante e interminável.

Resumo

Neste trabalho será apresentado um modelo teórico analiticamente solúvel para o aprisionamento em vórtice de gases atômicos em um condensado de Bose-Einstein binário. O sistema tratado é constituído de duas espécies atômicas condensadas em regime imiscível, considerando um grande desbalanço entre seu número de átomos. Nessas condições, a equação de Gross-Pitaevskii que rege a espécie majoritária se desacopla, permitindo atribuir a ela uma solução de vórtice único (1). Dessa forma, seu perfil de densidade age como um pseudo-potencial harmônico que aprisiona a espécie minoritária no núcleo de seu vórtice. A partir desse potencial efetivo foi calculada a nova densidade de estados e temperatura crítica de condensação da espécie aprisionada. Explorando a estabilidade da configuração proposta, foi encontrado um limite completamente analítico no qual a espécie aprisionada impede o decaimento por estado de core da majoritária (2), o que pode ser útil na estabilização e imageamento in situ de vórtices em condensados.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Mistura de gases atômicos. Vórtices.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	5
2	FORMALISMO E METODOLOGIA	6
2.1	Mecânica Estatística	6
2.2	Segunda Quantização	7
2.3	Equação de Gross-Pitaevskii	8
2.4	Vórtices e sua estrutura	9
2.5	Decaimento por estado de core	10
2.6	Misturas	11
3	DESENVOLVIMENTO E RESULTADOS	12
3.1	Modelo teórico	12
3.2	Tratamento termodinâmico usual	13
3.3	Limite de estabilidade	14
4	CONCLUSÕES	18
	REFERÊNCIAS	19

1 Introdução

A condensação de Bose-Einstein é uma transição de fase que ocorre em sistemas bosônicos abaixo de uma temperatura crítica próxima do zero absoluto, quando o comprimento de onda térmico de seus átomos é comparável à distância média entre eles. Esse fenômeno é caracterizado pela ocupação macroscópica de um único estado quântico e pode apresentar diversas propriedades interessantes, como superfluidez e vórtices de circulação quantizada. Sua descoberta impulsionou a física de átomos ultrafrios, que atualmente é estudada por mais de 200 grupos de pesquisa ao redor do mundo.

Após a primeira produção experimental de um condensado de Bose-Einstein em 1995 (3), técnicas cada vez mais sofisticadas para resfriar e manipular gases atômicos foram desenvolvidas, permitindo um finesse nunca antes visto na reprodução e controle de sistemas de muitos corpos. Dentre eles, há grande interesse no estudo de condensados binários, constituídos pela mistura de duas espécies atômicas distintas. Estas podem ser dois estados hiperfinos de um mesmo átomo (4), isótopos bosônicos ou simplesmente átomos diferentes (5).

A interação entre as espécies condensadas trás uma dinâmica nova que pode ser explorada de diferentes formas. Por exemplo, em experimentos de misturas atômicas, por apresentarem temperaturas críticas de condensação distintas, uma das espécies irá se condensar primeiro, fazendo com que a segunda atinja a condensação por termalização, no processo de sympathetic cooling (6). Aplicações como essa são muito importantes, pois contribuem com novos parâmetros que podem ser manipulados experimentalmente.

Em um experimento com dois estados hiperfinos do átomo de ^{87}Rb , o grupo de pesquisa liderado por E. A. Cornell foi capaz de produzir um condensado binário nucleando vórtices em somente uma das espécies (7). Baseando-se nisso, este trabalho propõe uma abordagem teórica analiticamente solúvel para descrever o aprisionamento de uma espécie atômica no núcleo de um vórtice de outra espécie em um condensado composto. Aqui, argumentamos que o desenvolvimento dessa ideia apresenta aplicações na estabilização e visualização in situ de vórtices em experimentos com misturas de superfluidos atômicos.

2 Formalismo e Metodologia

2.1 Mecânica Estatística

A condensação de Bose-Einstein surge no tratamento estatístico do gás ideal de bósons, partículas de spin inteiro. Esse problema é discutido em diversos livros texto de mecânica estatística e começa com a tentativa de determinar a ocupação média dos estados de energia do sistema. Com as considerações adequadas é simples concluir que ela obedece (8, 9)

$$\langle n \rangle (\beta (\epsilon - \mu)) = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} - 1}, \quad (2.1)$$

onde μ corresponde ao potencial químico, $z = e^{\beta \mu}$ à fugacidade e $\beta = 1/k_B T$. Essa grandeza, chamada de número de ocupação, dá a ocupação média de um estado de energia ϵ a uma temperatura T . Como $\langle n \rangle \geq 0$, vemos que necessariamente $\mu \leq 0$.

O potencial químico cresce à medida que a temperatura diminui e, abaixo de uma determinada temperatura crítica T_C , se torna igual ao menor estado de energia do sistema, que é escolhido como $\epsilon = 0$. Matematicamente, isso acarreta na divergência de $\langle n \rangle (0)$, que se traduz fisicamente em um aumento abrupto e macroscópico da ocupação do estado fundamental, caracterizando uma transição de fase – a condensação. A partir desse ponto, qualquer diminuição adicional de temperatura faz com que cada vez mais partículas ocupem o estado fundamental, até sua ocupação total em $T = 0$ (9–10).

A soma dos números de ocupação de todos os estados deve recuperar o número de partículas do sistema, N . Uma forma conveniente de lidar com essa soma é tratá-la no limite contínuo (9), onde ela se torna uma integral sobre a densidade de estados $D(\epsilon)$:

$$N = \sum_{\epsilon_i} \langle n \rangle [\beta (\epsilon_i - \mu)] \rightarrow \int_0^\infty \langle n \rangle (\beta (\epsilon - \mu)) D(\epsilon) d\epsilon. \quad (2.2)$$

A integral acima conta somente estados termicamente excitados, já que $D(0) = 0$ (10). Para representar o fenômeno de ocupação macroscópica, a contagem do estado fundamental deve ser feita separadamente inserindo um termo N_0 :

$$N = N_0 + \int_0^\infty \langle n \rangle (\beta (\epsilon - \mu)) D(\epsilon) d\epsilon = N_0 + N_T \quad (2.3)$$

A equação (2.3) trás uma relação útil entre o número de partículas e a temperatura, separando a porção condensada e não condensada, o que permite estudar e visualizar a transição de fase com mais facilidade. A ocupação do estado fundamental é efetivamente nula na faixa $T \geq T_C$ (11), fato que define a temperatura crítica de condensação:

$$N = \int_0^\infty \langle n \rangle (\epsilon/k_B T_C) D(\epsilon) d\epsilon \quad (2.4)$$

2.2 Segunda Quantização

Estamos interessados em estudar a dinâmica de um sistema de N bósons idênticos que interagem entre si através de $V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ e estão confinados em um potencial $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i, t)$. O hamiltoniano do problema, na representação de partícula única, é dado pela equação (2.5).

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i, t) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \sum_{i=1}^N \hat{H}_0(\mathbf{r}_i, t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (2.5)$$

Quase toda abordagem teórica envolvendo gases de Bose diluídos faz uso da representação do número de ocupação, que explora a indistinguibilidade das partículas. A ideia básica é trabalhar com estados que representam a ocupação dos níveis de energia do sistema ao invés dos estados de energia individuais de cada partícula. Assim, seus operadores podem ser reescritos em termos dos operadores de criação \hat{a}_i^\dagger e aniquilação \hat{a}_i .

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_i \hat{a}_i^\dagger(t) \varphi_i^*(\mathbf{r}, t) \quad \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \hat{a}_i(t) \varphi_i(\mathbf{r}, t) \quad (2.6)$$

Nesse contexto, é mais conveniente definir $\hat{\psi}^\dagger$ e $\hat{\psi}$, chamados de operadores de campo de Bose. Eles representam a adição ou remoção de uma partícula na posição \mathbf{r} e tempo t . Os pesos φ_i correspondem às funções de partícula única do i -ésimo estado de energia e codificam sua probabilidade. Essa abordagem permite reescrever a equação (2.5) como (13)

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t). \quad (2.7)$$

A partir daqui, a forma mais simples (e usual) de tratar o problema é aproximar a interação entre as partículas por um potencial de contato

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

onde a é o comprimento de espalhamento de onda S. Isso equivale a assumir que os efeitos completos do potencial de interação são reproduzidos por colisões perfeitamente elásticas entre os átomos no regime de baixas energias (13). Assim, a equação (2.7) se reduz a

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \quad (2.9)$$

que pode ser utilizada para deduzir a dinâmica dos operadores de campo no esquema de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} = [\hat{\psi}, \hat{H}] = \hat{H}_0 \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + g \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t). \quad (2.10)$$

A equação (2.10) contém toda informação que se pode esperar obter do sistema, resumindo o problema a encontrar diferentes técnicas para extraí-la (13).

2.3 Equação de Gross-Pitaevskii

Em um sistema com um único estado macroscopicamente ocupado e devidamente caracterizado, é natural decompor os operadores de campo em

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \hat{a}_0(t) \varphi_0(\mathbf{r}, t) + \sum_{i \neq 0} \hat{a}_i(t) \varphi_i(\mathbf{r}, t) = \hat{\phi}(\mathbf{r}, t) + \hat{\delta}(\mathbf{r}, t) \quad (2.11)$$

onde $\hat{\phi}$ corresponde à porção de átomos condensada e $\hat{\delta}$ à porção não condensada, tipicamente associada a flutuações térmicas. Nesse contexto, também podemos assumir uma aproximação de campo médio para $\hat{\phi}$, delegando toda dependência operacional à $\hat{\delta}$ (13).

$$\hat{\phi} \rightarrow \langle \hat{\phi} \rangle = \phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{N_0} \varphi_0(\mathbf{r}, t) \quad (2.12)$$

A equação de Gross-Pitaevskii (GPE) considera, além da teoria de campo médio, um regime de temperatura nula, onde $N_0 = N$ e $\hat{\delta} = 0$. Partindo da equação (2.9), essas hipóteses podem ser utilizadas para construir

$$E[\phi^*] = \int d\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \phi^* \nabla^2 \phi + \phi^* V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \phi + \frac{g}{2} (\phi^*)^2 (\phi)^2 \right], \quad (2.13)$$

cuja minimização pelo princípio variacional, impondo a conservação do número de partículas ligada a um potencial químico $\mu = \delta E / \delta N$, produz a GPE independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) + g |\phi(\mathbf{r})|^2 \phi(\mathbf{r}) = \mu \phi(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

Apesar de desprezar flutuações térmicas, sua implementação numérica dá uma boa descrição da dinâmica de condensados para diversos problemas e faixas de temperatura (13). A dependência temporal pode ser obtida imediatamente da equação (2.10):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) + g |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 \phi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2.15)$$

Note que a definição de $\phi(\mathbf{r}, t)$, chamada de função de onda do condensado, implica uma normalização pelo número de partículas:

$$\int d\mathbf{r} |\phi(\mathbf{r})|^2 = N_0 \quad (2.16)$$

Para $V_{\text{ext}} = 0$, uma solução imediata da equação (2.14) é dada por $\phi(\mathbf{r})$ constante. Se $\mu < 0$, necessariamente $|\phi|^2 = 0$, como esperado. Se $\mu \geq 0$, toda função $\phi = \sqrt{n} e^{i\Theta}$, onde n é a densidade de partículas do condensado e $\Theta \in [0, 2\pi]$, é uma solução válida, ilustrando a quebra espontânea da simetria de gauge do sistema, consequência da transição de fase (14). Essa solução mostra que o potencial químico de um condensado uniforme é dado por $\mu = gn$.

2.4 Vórtices e sua estrutura

A equação de Gross-Pitaevskii pode ser reformulada como um par de equações hidrodinâmicas, trazendo novas interpretações físicas. Isso é feito através da transformação

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{i\Theta(\mathbf{r}, t)}, \quad (2.17)$$

onde $n(\mathbf{r}, t)$ corresponde à densidade do condensado. Definindo um campo de velocidades $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = (\hbar/m) [\nabla\Theta(\mathbf{r}, t)]$, as partes real e imaginária da equação (2.15) se separam:

$$m \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} \right) + V_{\text{ext}} + gn \right] \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = 0 \quad (2.19)$$

A equação (2.18) é análoga à equação de Euler para um fluido ideal (13, 1), enquanto (2.19) é claramente uma equação de continuidade. A princípio, como $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ é definido a partir do gradiente de uma função escalar, o fluido é irrotacional. Isso significa que a fase de $\phi(\mathbf{r}, t)$ não deve mudar ao longo de uma curva fechada:

$$\Delta\Theta \equiv \oint \nabla\Theta \cdot d\mathbf{l} = \iint (\nabla \times \nabla\Theta) \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad (2.20)$$

No entanto, caso $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ apresente alguma singularidade, $\Delta\Theta$ não necessariamente é zero. Assim, para que $\phi(\mathbf{r}, t)$ não seja multivalorada, é necessário que sua fase obedeça

$$\Delta\Theta = \oint \nabla\Theta \cdot d\mathbf{l} = 2\pi\nu, \quad \nu \in \mathbb{Z}. \quad (2.21)$$

No caso simples onde $\Theta = \nu\varphi$ carrega toda a dependência angular de $\phi(\mathbf{r}, t)$, o campo de velocidades é completamente azimutal,

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar\nu}{m} \frac{1}{\rho} \hat{\varphi}, \quad (2.22)$$

e sua circulação obedece exatamente a equação (2.21):

$$\nabla \times \mathbf{v} = \frac{\hbar\nu}{m} 2\pi\delta(\rho) \hat{z} \quad (2.23)$$

Para que a energia cinética não divirja em $\rho = 0$, o aumento de \mathbf{v} deve ser acompanhado por uma depleção abrupta na densidade do condensado ao longo do eixo z . Isso implica que há uma linha bem definida de densidade nula ao redor da qual a fase do condensado muda de $2\pi\nu$, caracterizando o que é chamado de um vórtice de carga ν .

Substituindo uma solução do tipo $\phi(\mathbf{r}) = f(\rho) e^{i\nu\varphi}$ na equação (2.14) e considerando um meio uniforme com um único vórtice sobre o eixo z , temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \rho} \right) \right] + \frac{\hbar^2 \nu^2}{2m\rho^2} f + gf^3 = \mu f. \quad (2.24)$$

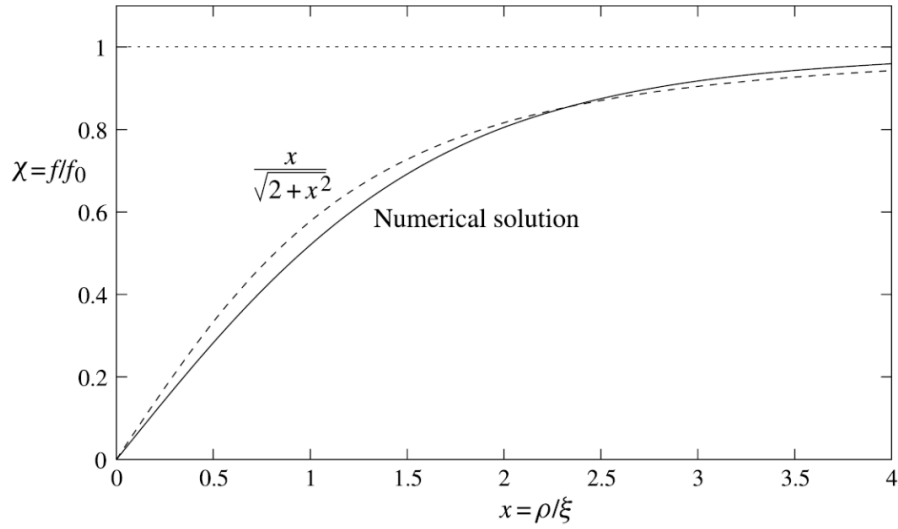


Figura 1 – Solução numérica da equação (2.26) (linha sólida), com $\nu = 1$, $\chi(0) = 0$ e $\chi(\infty) = 1$; Equação (2.27) (linha tracejada).

Fonte: PETHICK (1)

O termo proporcional a ν^2 domina conforme $\rho \rightarrow 0$, já que nesse caso $f \rightarrow 0$. Por outro lado, para $\rho \rightarrow \infty$, a interação é dominante, recuperando o perfil de densidade uniforme ($f^2 \rightarrow n = \mu/g$). O ponto em que ambos os termos são comparáveis define ξ , chamado de healing length ou comprimento de coerência:

$$\frac{\hbar^2 \nu^2}{2m\xi^2} f \sim gf^3 \Rightarrow \xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2mgn}} \quad (2.25)$$

O healing length dá uma ideia da escala de distância a partir da qual o perfil de densidade do condensado regenera a depleção causada pelo vórtice (1). Assim, para estudar a estrutura de um vórtice único, é conveniente reescrever a equação (2.24) em termos das quantidades adimensionais $x = \rho/\xi$ e $\chi = f/f_0$, com $f_0^2 = n$:

$$-\frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) + \frac{\nu^2}{x^2} \chi + \chi^3 - \chi = 0 \quad (2.26)$$

Neste trabalho, estamos interessados na solução de carga unitária $\nu = 1$ (figura 1), que pode ser aproximada por (1):

$$f(\rho) = \sqrt{n} \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + 2\xi^2}} \quad (2.27)$$

2.5 Decaimento por estado de core

Como vimos, condensados de Bose-Einstein podem apresentar vórtices quantizados, fenômeno também observado no estudo de superfluidos. Com isso em mente, convém analisar a estabilidade

desses sistemas e propor possíveis mecanismos de decaimento que possam dissipar momento angular. Isso foi feito em um artigo publicado em 1997 (2) por D. S. Rokhsar, onde ele analisou a estabilidade de vórtices em condensados na ausência de torque constante sobre o sistema.

Ele foi capaz de concluir que nenhum condensado aprisionado em um potencial com simetria azimutal é capaz de sustentar vórtices indefinidamente sem a aplicação de um torque externo constante. Para isso, ele propõe um mecanismo de decaimento no qual partículas do vórtice são transferidas para um estado de quasipartícula de momento angular nulo, o qual ele chama de estado de core (ou estado de núcleo). Essa transferência é energeticamente favorável e leva à dissipação completa do vórtice, recuperando o estado fundamental da armadilha.

O estado de core é modulado pela sua interação com o próprio condensado rotacional, de forma análoga ao tratamento de misturas, que será discutido a seguir e explorado posteriormente. As ideias e discussões de Rokhsar foram utilizadas qualitativamente como base para uma das análises deste trabalho, referente a estabilidade do sistema proposto. Isso e a determinação do estado de core ficarão mais claros nas próximas seções.

2.6 Misturas

Para sistemas compostos por misturas de diferentes espécies atômicas, é fácil demonstrar por argumentos análogos aos da seção 2.2 (1), que a equação (2.13) pode ser generalizada para

$$E[\phi_i^*] = \int d\mathbf{r} \sum_i \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi_i|^2 + V_{\text{ext}} |\phi_i|^2 + \frac{g_{ii}}{2} |\phi_i|^4 \right] + \sum_{j \neq i} \frac{g_{ij}}{2} |\phi_i|^2 |\phi_j|^2 \right\} \quad (2.28)$$

onde $g_{ij} = 2\pi\hbar^2 a_{ij}/m_{ij}$ é o parâmetro de interação entre as espécies i e j , sendo função da massa reduzida m_{ij} e comprimento de espalhamento $a_{ij} = a_{ji}$. Considerando somente duas espécies (1 e 2), a minimização de (2.28) produz um par de GPEs acopladas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 \phi_1 + V_{\text{ext}} |\phi_1|^2 + g_{11} |\phi_1|^2 \phi_1 + g_{12} |\phi_2|^2 \phi_1 = \mu_1 \phi_1 \quad (2.29)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 \phi_2 + V_{\text{ext}} |\phi_2|^2 + g_{22} |\phi_2|^2 \phi_2 + g_{21} |\phi_1|^2 \phi_2 = \mu_2 \phi_2 \quad (2.30)$$

Condensados compostos podem apresentar diferentes regimes de miscibilidade dependendo da relação entre os parâmetros de interação g_{ij} . No regime miscível, eles obedecem

$$g_{11}g_{22} > g_{12}^2, \quad (2.31)$$

e há uma superposição completa das nuvens atômicas de cada espécie. Para o regime imiscível,

$$g_{11}g_{22} < g_{12}^2, \quad (2.32)$$

e há uma separação clara das nuvens atômicas. Esses limites podem ser encontrados comparando a energia interna de cada configuração e são importantes para guiar a produção experimental de misturas atômicas (1, 15).

3 Desenvolvimento e Resultados

3.1 Modelo teórico

Começamos considerando uma mistura imiscível de duas espécies atômicas distintas, 1 e 2, aprisionadas em um cilindro de volume $V = \pi R^2 L$. Como discutido, esse sistema é regido por um par de equações estacionárias acopladas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 \phi_1 + g_{11} |\phi_1|^2 \phi_1 + g_{12} |\phi_2|^2 \phi_1 = \mu_1 \phi_1 \quad (3.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 \phi_2 + g_{22} |\phi_2|^2 \phi_2 + g_{21} |\phi_1|^2 \phi_2 = \mu_2 \phi_2 \quad (3.2)$$

Ao impor grande desbalanço entre as espécies ($N_1 \gg N_2$) e considerando parâmetros de interação de mesma ordem ($g_{ii} \sim g_{ij}$), as equações (3.1) e (3.2) podem ser aproximadas para

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 \phi_1 + g_{11} |\phi_1|^2 \phi_1 = \mu_1 \phi_1 \quad (3.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 \phi_2 + g_{21} |\phi_1|^2 \phi_2 = \mu_2 \phi_2 \quad (3.4)$$

Isso faz com que a equação (3.3) corresponda a GPE de um condensado uniforme. Nosso interesse é estudar o aprisionamento em vórtice, portanto atribuí-se a 1 uma solução de vórtice único e carga unitária centrado na origem,

$$\phi_1(\rho, \varphi, z) = \sqrt{n_1} \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + a^2}} e^{i\varphi}, \quad (3.5)$$

onde $a = \sqrt{2}\xi$ corresponde ao raio do vórtice. Assim, a equação (3.4) se torna

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 \phi_2 + g_{21} n_1 \frac{\rho^2}{\rho^2 + a^2} \phi_2 = \mu_2 \phi_2. \quad (3.6)$$

A interação repulsiva entre as espécies faz com que os átomos de 2 possam ocupar somente posições próximas de $\rho = 0$, correspondendo a região de núcleo do vórtice, onde há grande depleção no perfil de densidade de 1. Considerando esse fato, ao lidar com a segunda espécie podemos expandir $|\phi_1|^2$ ao redor de $\rho = 0$ e tomar como aproximação

$$\frac{\rho^2}{\rho^2 + a^2} \approx \frac{\rho^2}{a^2}. \quad (3.7)$$

Isso faz com que (3.4) se torne

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 \phi_2 + \frac{g_{21} n_1}{a^2} \rho^2 \phi_2 = \mu_2 \phi_2, \quad (3.8)$$

mostrando que o perfil de densidade da espécie majoritária aprisiona a minoritária como um pseudo-potencial aproximadamente harmônico. A solução de (3.8) pode ser facilmente obtida por separação de variáveis,

$$\phi_2(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2m_2\omega_2 R^2 n_2}{\hbar}} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \exp\left(-\frac{m_2\omega_2}{2\hbar}\rho^2\right), \quad (3.9)$$

onde ω_2 é definido pelo potencial efetivo

$$V_{\text{eff}}(\rho) = \frac{g_{21}n_1}{a^2}\rho^2 \equiv \frac{1}{2}m_2\omega_2^2\rho^2. \quad (3.10)$$

3.2 Tratamento termodinâmico usual

Como exemplo rápido, podemos utilizar o potencial efetivo definido pelo modelo teórico para determinar algumas propriedades termodinâmicas da espécie aprisionada em vórtice. Devemos começar com o cálculo semiclássico da densidade de estados $D(\epsilon)$. Para um gás ideal de bósons aprisionado por um potencial arbitrário, ela é dada por (12)

$$D(\epsilon) = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3} \int_{\tau(\epsilon)} d\mathbf{r} \sqrt{\epsilon - V(\mathbf{r})}, \quad (3.11)$$

onde $\tau(\epsilon)$ corresponde ao volume disponível no espaço de fase, definido por $\epsilon = V(\mathbf{r})$. Substituindo $V(\mathbf{r})$ pela equação (3.10), obtemos

$$D(\epsilon) = \frac{L}{\pi\hbar^3 m_2 \omega_2^2} (2m_2\epsilon)^{3/2} \int_0^1 u \sqrt{1-u^2} du = \sqrt{\frac{2m_2^3}{\pi^4\hbar^6}} \left[\frac{V(\pi a^2 L)}{g_{12}N_1} \right] \epsilon^{3/2} \equiv D_0 \epsilon^{3/2} \quad (3.12)$$

Com a densidade de estados, podemos relacionar a temperatura ao número de partículas da espécie aprisionada a partir da equação (2.3) (9). Assim, para $T \geq T_C$ temos

$$N_2 = D_0 \int_0^\infty \frac{\epsilon^{5/2-1}}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon = D_0 (k_B T)^{5/2} \Gamma(5/2) g_{5/2}(z), \quad (3.13)$$

onde usamos

$$g_p(z) = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^\infty \frac{x^{p-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx = \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^p}. \quad (3.14)$$

Portanto, lembrando que $z = 1$ quando $T = T_C$, a temperatura crítica de condensação da segunda espécie é

$$T_C = \left[\frac{N_2}{D_0 \Gamma(5/2) \zeta(5/2)} \right]^{2/5} = 6,693 \times \frac{\hbar^{6/5}}{k_B m_2^{3/5}} \left[\frac{g_{12} N_1 N_2}{V(\pi a^2 L)} \right]^{2/5} \quad (3.15)$$

Vemos que a dependência de T_C com os diferentes parâmetros do sistema satisfaz o que se esperaria. Aumentar a intensidade do potencial de aprisionamento, seja pelo aumento do número de átomos da espécie 1 ou do próprio parâmetro de interação g_{12} , facilita a condensação

da segunda espécie. Além disso, há uma dependência explícita com volume efetivo ocupado pelo núcleo do vórtice ($\pi a^2 L$), justamente onde ocorre o aprisionamento. Esse resultado oferece informações que seriam úteis na produção experimental do sistema proposto.

Por completeza, também podemos determinar a energia total da espécie aprisionada, que serve de ponto de partida para avaliar as demais quantidades termodinâmicas do sistema. Assim, seguindo o formalismo da mecânica estatística, obtém-se

$$E = \int_0^\infty \frac{\epsilon D(\epsilon)}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} - 1} d\epsilon = D_0 (k_B T)^{7/2} \Gamma(7/2) g_{7/2}(z) = \frac{7}{2} N_2 k_B T \frac{g_{7/2}(z)}{g_{5/2}(z)}, \quad (3.16)$$

que nos mostra que a capacidade térmica a volume constante apresenta uma descontinuidade bem definida em $T = T_C$ (9):

$$\Delta C_V = \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \right]_{T_C^-}^{T_C^+} = -\frac{35}{4} N_2 k_B \frac{\zeta(7/2)}{\zeta(5/2)} \quad (3.17)$$

Esses resultados não são uma consequência intrínseca ou nova do aprisionamento em vórtice, mas sim uma ilustração do tratamento termodinâmico usual que é dado à condensação de Bose-Einstein. Um estudo mais rigoroso deve considerar trocas térmicas entre as espécies, o que requer modificar o modelo proposto. De qualquer forma, conhecer esse tratamento é importante em qualquer contexto quando lidamos com sistemas de muitos corpos, por isso escolhemos mostrá-lo.

3.3 Limite de estabilidade

O estado de core ϕ_0 é um estado de quasipartícula construído pela transferência de partículas do vórtice para um estado de momento angular nulo localizado em seu núcleo. Ele obedece

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 + 2g_{11} |\phi_1|^2 - \mu_1 \right] \phi_0 = \mu_0 \phi_0, \quad (3.18)$$

onde μ_0 e μ_1 (os potenciais químicos de ϕ_0 e ϕ_1) quantificam o custo (ou ganho) energético devido a essa transferência (2). Rearranjando a equação (3.18) e substituindo $|\phi_1|^2$, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 \phi_0 + 2g_{11} n_1 \frac{\rho^2}{\rho^2 + a^2} \phi_0 = (\mu_0 + \mu_1) \phi_0, \quad (3.19)$$

que pelo mesmo argumento por trás da equação (3.8) pode ser aproximada para

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 \phi_0 + \frac{2g_{11} n_1}{a^2} \rho^2 \phi_0 = (\mu_0 + \mu_1) \phi_0. \quad (3.20)$$

Sua solução novamente pode ser obtida por separação de variáveis

$$\phi_0(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2m_1 \omega_1 R^2 n_0}{\hbar}} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \exp\left(-\frac{m_1 \omega_1}{2\hbar} \rho^2\right), \quad (3.21)$$

onde ω_1 é definido por

$$\frac{2g_{11}n_1}{a^2}\rho^2 \equiv \frac{1}{2}m_1\omega_1^2\rho^2. \quad (3.22)$$

Para determinar se o sistema proposto é estável, podemos calcular explicitamente μ_0 e μ_1 , partindo dos funcionais de energia (3.23) e (3.24), e em seguida analisar como a segunda espécie perturba sua configuração energética.

$$(\mu_0 + \mu_1) N_0 = \int d\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \phi_0^* \nabla^2 \phi_0 + \frac{2g_{11}n_1}{a^2} \rho^2 |\phi_0|^2 \right] \quad (3.23)$$

$$\mu_1 N_1 = \int d\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \phi_1^* \nabla^2 \phi_1 + g_{11} |\phi_1|^4 \right] \quad (3.24)$$

Como ϕ_0 é autofunção da equação (3.20), que é separável em um oscilador harmônico bidimensional e uma partícula na caixa, imediatamente obtemos

$$\mu_0 + \mu_1 = \hbar\omega_1 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_1L^2}. \quad (3.25)$$

Tratando-se de temperaturas próximas do zero absoluto, a contribuição cinética no eixo z pode ser desprezada. Portanto, recuperando $a = \sqrt{2}\xi$, nos resta

$$\mu_0 + \mu_1 \approx \hbar\omega_1 \Rightarrow \mu_0 \approx 2g_{11}n_1 - \mu_1. \quad (3.26)$$

Para determinar μ_1 , podemos reescrever o funcional (3.24) na forma

$$\mu_1 N_1 = N_1 \int_0^R \left\{ \frac{\hbar^2}{m_1 R^2} \left[\frac{4a^2 \rho^3 + \rho^5}{(\rho^2 + a^2)^3} \right] + \frac{2g_{11}n_1}{R^2} \left[\frac{\rho^5}{(\rho^2 + a^2)^2} \right] \right\} d\rho \equiv N_1 (K_1 + U_{11}) \quad (3.27)$$

e realizar as integrações normalmente:

$$K_1 = \frac{\hbar^2}{m_1 R^2} \left[\frac{1}{2} \log \left(\frac{R^2 + a^2}{a^2} \right) + \frac{R^2 (R^2 - 2a^2)}{4 (R^2 + a^2)^2} \right] \quad (3.28)$$

$$U_{11} = \frac{2g_{11}n_1}{R^2} \left[\frac{R^2 (R^2 + 2a^2)}{2 (R^2 + a^2)} - a^2 \log \left(\frac{R^2 + a^2}{a^2} \right) \right] \quad (3.29)$$

Uma vez que $R/a \gg 1$, as expressões acima podem ser aproximadas por

$$K_1 \approx \frac{\hbar^2}{m_1 R^2} \left[\log \left(\frac{R}{a} \right) + \frac{1}{4} \right] \approx \frac{\hbar^2}{m_1 R^2} \log \left(\frac{R}{a} \right) \quad (3.30)$$

$$U_{11} \approx g_{11}n_1 \left[1 - \frac{2a^2}{R^2} \log \left(\frac{R^2}{a^2} \right) \right] \approx g_{11}n_1 \quad (3.31)$$

nos deixando com

$$\mu_1 \approx g_{11}n_1 + \frac{\hbar^2}{m_1 R^2} \log \left(\frac{R}{a} \right) \quad (3.32)$$

e portanto

$$\mu_0 \approx g_{11}n_1 - \frac{\hbar^2}{m_1 R^2} \log \left(\frac{R}{a} \right) \quad (3.33)$$

Comparando os potenciais químicos obtidos, evidentemente o decaimento para o estado de core é energeticamente favorável, uma vez que $\mu_1 > \mu_0$. Ambas as expressões apresentam um termo adicional além da contribuição uniforme que corresponde a energia cinética do vórtice. A dependência logarítmica está ligada ao campo de velocidades proporcional a $1/\rho$ típico de sua estrutura (1). A transferência de uma partícula do vórtice para o estado de core é acompanhada pela dissipação da sua energia cinética rotacional, acarretando numa redução da energia total do condensado e do custo individual de cada transferência. Isso faz com que o condensado dissipe momento angular e recupere seu estado fundamental.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 + g_{12} |\phi_2|^2 + 2g_{11} |\phi_1|^2 - \mu_1 \right] \phi_0 = \mu_0 \phi_0 \quad (3.34)$$

Agora, reinserindo a espécie 2 no núcleo do vórtice através da equação (3.34), é possível determinar como sua presença afetará μ_0 tratando a interação perturbativamente. Uma vez que

$$\mu_0 - \mu_1 = -\frac{2\hbar^2}{m_1 R^2} \log \left(\frac{R}{a} \right), \quad (3.35)$$

para que a segunda espécie impeça o decaimento para o modo de core, o acréscimo de energia devido a interação deve ser:

$$\delta\mu_0 = \frac{1}{N_0} \int d\mathbf{r} \phi_0^* [g_{12} |\phi_2|^2] \phi_0 > \frac{2\hbar^2}{m_1 R^2} \log \left(\frac{R}{a} \right) \quad (3.36)$$

Substituindo ϕ_0 e ϕ_2 na integral acima e reorganizando os termos constantes, temos

$$\delta\mu_0 = \frac{8R^2 g_{12} n_2 m_1 \omega_1 \omega_2 m_2}{\hbar^2 L} \int_0^L \cos^4 \left(\frac{\pi z}{L} \right) dz \int_0^\infty \exp \left(-\frac{m_1 \omega_1 + m_2 \omega_2}{\hbar} \rho^2 \right) \rho d\rho, \quad (3.37)$$

que resulta em

$$\delta\mu_0 = \frac{3R^2 g_{12} n_2}{2\hbar} \left(\frac{m_1 \omega_1 m_2 \omega_2}{m_1 \omega_1 + m_2 \omega_2} \right). \quad (3.38)$$

Com isso, recuperando as definições de ω_1 , ω_2 e a , a expressão (3.36) se torna

$$\frac{3R^2 g_{12} n_2}{a^2} \left(\frac{\sqrt{g_{12} m_2}}{\sqrt{g_{12} m_2} + \sqrt{2g_{11} m_1}} \right) > \frac{2\hbar^2}{m_1 R^2} \log \left(\frac{R}{a} \right). \quad (3.39)$$

Uma vez que $x^2 > \log(x)$, é possível definir um limite para a estabilidade do sistema que depende somente de parâmetros experimentalmente controláveis:

$$\frac{g_{12}}{1 + \sqrt{2(g_{11}/g_{12})(m_1/m_2)}} > \frac{2\hbar^2}{3n_2 m_1 R^2} \quad (3.40)$$

A equação (3.40) nos mostra que, caso os parâmetros do sistema a satisfaçam, a energia de interação entre as partículas do estado de core e da espécie 2 torna a transferência de partículas do vórtice suficientemente custosa para impedir seu decaimento. A figura 2 ilustra

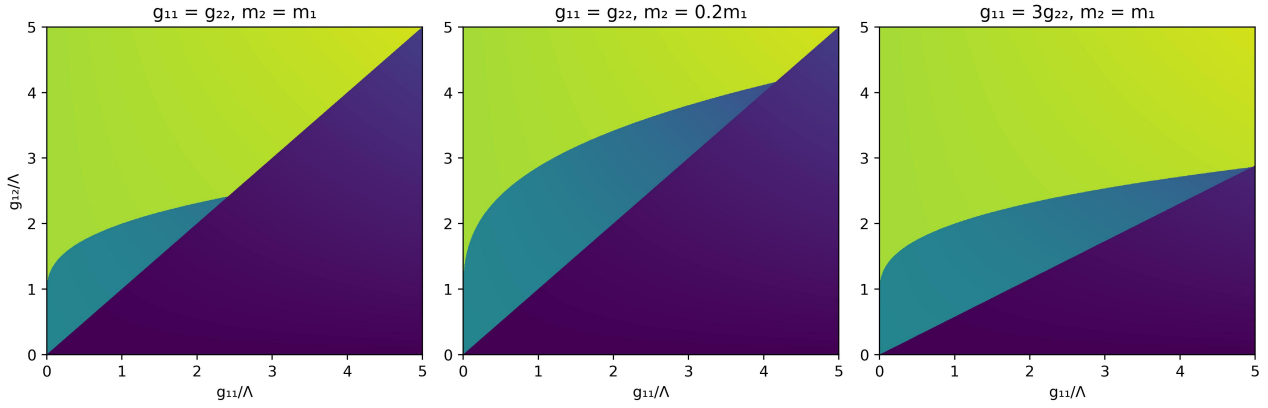


Figura 2 – Diagrama de fases construído a partir das equações (2.32) e (3.40); $\Lambda = 2\hbar^2/3n_2m_1R^2$. Nele vemos os regimes onde ocorre ou não decaimento (ciano e verde) e o regime no qual a mistura se torna miscível (roxo).

Fonte: Elaborada pelo autor.

como diferentes parâmetros afetam os regimes do sistema. Podemos ver que misturas em que $m_2 > m_1$ apresentam regiões de instabilidade menores e que, em geral, a estabilização do sistema poderia ser delegada ao ajuste dos parâmetros de interação inter e intra-espécies (16).

Esse limite por si só não é suficiente para afirmar que o sistema mantém sua vorticidade indefinidamente, pois ele foi determinado sem a consideração de outros efeitos dissipativos. No entanto, ele delimita condições que inviabilizam um canal de decaimento importante. Isso pode ser levado em consideração na produção experimental de misturas de superfluidos, já que no contexto proposto a segunda espécie pode ser usada como um elemento estabilizador para o estado de vórtice da espécie majoritária, potencialmente estendendo seu tempo de vida. Essa aplicação também pode apontar um novo caminho para aprimorar técnicas de visualização *in situ* da dinâmica de vórtices, dispensando o uso de imageamento por expansão balística (17).

Esse trabalho é uma abordagem inicial e o modelo proposto é relativamente simplista, como se pretendia. Apesar disso, ele pôde ser utilizado para obter resultados interessantes e serve de base para o desenvolvimento de discussões mais rigorosas, através de sua modificação gradual. Próximos passos devem investigar a validade e viabilidade da hipótese de grande desbalanço, a dinâmica de modos coletivos do sistema (1) e considerar trocas térmicas e transferência de vorticidade entre as espécies.

4 Conclusões

Neste trabalho foi proposto um modelo teórico analiticamente solúvel para tratar o possível aprisionamento em vórtice de gases atômicos. Nele, o sistema considerado é composto por uma mistura de duas espécies atômicas condensadas em regime imiscível, no qual o número de partículas de uma é muito superior a outra. Com uma aproximação de campo médio foi demonstrado que a espécie majoritária, em estado de vórtice, age como um potencial harmônico que aprisiona a espécie minoritária em seu núcleo.

O potencial efetivo estabelecido pelo modelo foi utilizado para determinar a densidade de estados da espécie minoritária, partindo de uma abordagem semiclássica (9, 12). A densidade de estados foi utilizada para determinar a nova temperatura crítica de condensação da espécie minoritária devido ao aprisionamento em vórtice. Esse resultado apresentou-se autoconsistente com a natureza física da condensação. Por completeza e como um exemplo ilustrativo, também foi calculada sua energia total, utilizada para determinar uma descontinuidade na capacidade térmica (9).

Seguindo o mecanismo de decaimento proposto por Rokhsar (2), foi avaliado como a estabilidade do estado de vórtice é afetada pela presença da segunda espécie aprisionada em seu núcleo. Foi demonstrado que o potencial químico do estado de core é estritamente negativo em relação ao potencial químico do condensado rotacional, com uma diferença proporcional a sua energia cinética. Esse resultado confirma o decaimento do vórtice e delimita o quanto a segunda espécie deve perturbar a configuração energética do sistema para impedi-lo. Através de uma análise perturbativa, foi determinado o acréscimo de energia devido a interação com a segunda espécie, estabelecendo um limite para a estabilidade do sistema dependente somente de parâmetros experimentalmente controláveis. Finalmente, foi argumentado que essa análise aponta para possibilidades de desenvolvimento ou aprimoramento de técnicas de estabilização e imageamento in situ de vórtices em condensados de Bose-Einstein (17).

REFERÊNCIAS

- 1 PETHICK, C. J.; SMITH, H. *Bose–Einstein condensation in dilute gases*. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- 2 ROKHSAR, D. S. Vortex stability and persistent currents in trapped Bose gases. *Physical Review Letters*, v. 79, p. 2164–2167, Sept. 1997. DOI: 10.1103/PhysRevLett.79.2164.
- 3 ANDERSON, M. H. *et al.* Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995. DOI: 10.1126/science.269.5221.198.
- 4 BURT, E. A. *et al.* Coherence, correlations, and collisions: what one learns about Bose-Einstein condensates from their decay. *Physical Review Letters*, v. 79, p. 337–340, July 1997. DOI: 10.1103/PhysRevLett.79.337.
- 5 MODUGNO, G. *et al.* Two atomic species superfluid. *Physical Review Letters*, v. 89, p. 190404, Oct. 2002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.89.190404.
- 6 ROATI, G. *et al.* Fermi-Bose quantum degenerate 40K–87Rb mixture with attractive interaction. *Physical Review Letters*, v. 89, p. 150403, Sept. 2002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.89.150403. 5
- 7 MATTHEWS, M. R. *et al.* Vortices in a Bose-Einstein condensate. *Physical Review Letters*, v. 83, p. 2498–2501, Sept. 1999. DOI: 10.1103/PhysRevLett.83.2498.
- 8 EKHOLM, R.; KOHN, L. D.; WOLLMAN, S. H. The ideal quantum gas. In: SALINAS, S. R. A. (ed.). *Introduction to statistical physics*. New York: Springer, 2001. p. 141–159. ISBN 978-1-4757-3508-6. DOI: 10.1007/978-1-4757-3508-6_8.
- 9 PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. *Bose-Einstein condensation and superfluidity*. Oxford: Oxford University Press, 2016. DOI: 10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001.
- 10 SALINAS, S. R. A. Free bosons: Bose-Einstein condensation; photon gas. In: SALINAS, S. R. A. *Introduction to statistical physics*. New York: Springer, 2001. p. 187–210. ISBN 978-1-4757-3508-6. DOI: 10.1007/978-1-4757-3508-6_10.
- 11 COOK, G.; DICKERSON, R. H. Understanding the chemical potential. *American Journal of Physics*, v. 63, n. 8, p. 737–742, 1995. DOI: 10.1119/1.17844.
- 12 BAGNATO, V.; PRITCHARD, D. E.; KLEPPNER, D. Bose-Einstein condensation in an external potential. *Physical Review A*, v. 35, p. 4354–4358, May 1987. DOI: 10.1103/PhysRevA.35.4354.
- 13 PROUKAKIS, N. P.; JACKSON, B. Finite-temperature models of Bose–Einstein condensation. *Journal of Physics B: atomic, molecular and optical physics*, v. 41, n. 20, p. 203002, Oct. 2008. DOI: 10.1088/0953-4075/41/20/203002.

14 ALTLAND, A.; SIMONS, B. D. Condensed Matter Field Theory. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.

15 GUTIERREZ, E. *et al.* Miscibility regimes in a ^{23}Na – ^{39}K quantum mixture. *Applied Sciences*, v. 11, p. 9099, Sept. 2021.

16 SCHULZE, T. A. *et al.* Feshbach spectroscopy and dual-species Bose-Einstein condensation of ^{23}Na – ^{39}K mixtures. *Physical Review A*, v. 97, p. 023623, Feb. 2018. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.023623.

17 WILSON, K. E. *et al.* In situ imaging of vortices in Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, v. 91, n. 2, p. 023621, Feb. 2015. DOI: 10.1103/PhysRevA.91.023621.