

§ A Função de Onda Macroscópica de um Condensado de Bose-Einstein: definição do Parâmetro de Ordem

Os resultados obtidos no cálculo das funções de distribuição reduzidas, com a matriz densidade de 1-partícula e de 2-partículas, para um 'gás' de bósons, mostram a existência de ordem não-diagonal de longo alcance (ODLRO) na fase condensada para a matriz reduzida de 1-partícula:

$$\begin{aligned} \langle x_1' | W_1 | x_1 \rangle &= \text{Tr} \{ \rho \psi^\dagger(x_1) \psi(x_1') \} = \\ &= [\psi^\dagger(x_1) \psi(x_1')], \end{aligned} \quad (1)$$

com

$$\begin{aligned} \langle x_1' | W_1 | x_1 \rangle &= \rho(|x_1' - x_1|) = \rho(R) = \\ &= \bar{n}_0 + \frac{\bar{n}}{\zeta(3/2)} \left(\frac{\Lambda}{R} \right) \xrightarrow{|x_1' - x_1| \rightarrow \infty} \bar{n}_0, \end{aligned} \quad (2)$$

onde \bar{n}_0 é a densidade (macroscópica) de partículas ocupando o estado de mais baixa energia (para partícula livre corresponde a $\left(\frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{\sqrt{V}} \right)_{\vec{k}=0} = \frac{1}{\sqrt{V}}$)

Penrose + Onsager (Phys. Rev. 104, 576 (1956))

Sugiram que o resultado anterior deve ser entendido como definindo o 'parâmetro de ordem' do condensado através de uma função de onda macroscópica, resultado da coerência de longo alcance:

P-O :

$$\left[\Psi^\dagger(x_1) \Psi(x_1) \right] \xrightarrow{|x_1' - x_1| \rightarrow \infty} \Psi^\dagger(x_1) \Psi(x_1'), \quad (3)$$

com $\Psi^\dagger(x_1) \Psi(x_1') = \bar{n}_0$, no caso de partícula livre.

► Def. Parâmetro de Ordem

$$\Psi(x) = [\Psi(x)] = R(x) e^{i\theta(x)}, \quad (4)$$

onde $R(x) = |\Psi(x)|$

Esta definição é generalizada para casos que incluem potenciais dependentes do tempo e interação entre os bósons:

$$\left[\Psi^\dagger(x_1, t) \Psi(x_1', t) \right] \xrightarrow{|x_1' - x_1| \rightarrow \infty} \Psi^\dagger(x_1, t) \Psi(x_1', t) \quad (5)$$

O Parâmetro de Ordem (PO) é a grandeza conveniente que dá informação sobre o grau de condensação e sobre o estado de uma partícula $\varphi_{\lambda}(\vec{x}, t)$ onde acontece a condensação. Uma definição alternativa consistente com as propriedades de ODLRO é

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{i\theta} \sqrt{\bar{N}_0(t)} \varphi_{\lambda}(\vec{x}, t), \quad (6)$$

com normalização dada por

$$\int d^3x \Psi^* \Psi = \bar{N}_0(t) \underbrace{\int d^3x |\varphi_{\lambda}(\vec{x}, t)|^2}_1 = \bar{N}_0(t), \quad (7)$$

onde $\bar{N}_0(t)$ é o número de partículas no condensado. Note que para partícula livre,

$$\varphi_{\lambda}(x, t) = \left(\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \right)_{\vec{k}=0} = \frac{1}{\sqrt{V}},$$

obtendo:

$$\Psi^*(x) \Psi(x) = \bar{N}_0 \cdot \frac{1}{V} = \bar{n}_0, \quad (8)$$

consistente com (2) sobre ODLRO. Uma chave sobre a origem do parâmetro de ordem pode ser obtida a partir de um tratamento de CAMPO MÉDIO (Hartree).

Nesta aproximação supomos que o sistema condensa num estado $\langle \hat{x} | \lambda \rangle = \varphi_\lambda(x)$ (não consideramos por enquanto potenciais dependentes do tempo).

O estado fundamental é proposto como:

$$|CB\rangle = \frac{(a_\lambda^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle, \quad (9)$$

com $a_\lambda^\dagger |0\rangle = |\lambda\rangle$. O estado (9) é um estado totalmente simétrico (bósons):

$$\Phi_A(x_1, x_2, \dots, x_N) = \varphi_\lambda(x_1) \varphi_\lambda(x_2) \dots \varphi_\lambda(x_N)$$

escrito como um produto de estados de 1-partícula (Hartree). O estado do condensado $\varphi_\lambda(x)$ ainda não está determinado. Também supomos que a condensação é completa em $|\lambda\rangle$.

Um tratamento mais geral, consideraria o caso de condensação parcial e coexistência de fases:

$$\bar{n}_0 + \bar{n}' = \bar{n}$$

Tratamos aqui o caso mais simples de $\bar{n}' = 0$.

Queremos determinar o 'orbital' $|\lambda\rangle$ usando um método variacional.

O Hamiltoniano interagente tem a mesma forma que aquele analisado para férmions:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I = \sum_{i,j} h_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \langle ij | U | kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

Calculamos médias para o estado condensado de Bose $|CB\rangle$ de (4). Primeiro, para o termo de 1-partícula:

$$\begin{aligned} \langle CB | \mathcal{H}_0 | CB \rangle &= \sum_{i,j} h_{ij} \langle CB | a_i^\dagger a_j | CB \rangle = \sum_{i,j} h_{ij} \delta_{i\lambda} \delta_{j\lambda} \\ &= N h_{\lambda\lambda} \end{aligned}$$

$$= N \int d\vec{x} \varphi_\lambda^*(\vec{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x}) \right\} \varphi_\lambda(\vec{x}).$$

► Def. Função de onda do condensado, $\Psi(\vec{x})$

$$\Psi(\vec{x}) \equiv \sqrt{N} \varphi_\lambda(\vec{x})$$

A função Ψ é normalizada para o número de partículas

$$\int d\vec{x} |\Psi(\vec{x})|^2 = N,$$

de maneira que $|\Psi(\vec{x})|^2$ representa a densidade do condensado de Bose. Expressamos os valores médios em termos de Ψ :

$$\langle CB | \mathcal{H}_0 | CB \rangle = \int d\vec{x} \Psi^*(\vec{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x}) \right\} \Psi(\vec{x}).$$

Calculamos agora os valores médios para a interação:

$$\langle CB | \mathcal{H}_I | CB \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} V_{ij,kl} \langle CB | a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l | CB \rangle$$

Temos uma única possibilidade de elementos de matriz não nulos:

$$i=j=\lambda, \quad l=k=\lambda, \quad \text{com}$$

$$a_\lambda^\dagger a_\lambda^\dagger a_\lambda a_\lambda = a_\lambda^\dagger \{ a_\lambda a_\lambda^\dagger - 1 \} a_\lambda = N_\lambda^2 - N_\lambda,$$

fornecendo:

$$\langle CB | a_\lambda^\dagger a_\lambda^\dagger a_\lambda a_\lambda | CB \rangle = N(N-1).$$

Resultado:

$$\langle CB | \mathcal{H}_I | CB \rangle = \frac{1}{2} N(N-1) V_{\lambda\lambda,\lambda\lambda}$$

onde:

$$V_{\lambda\lambda,\lambda\lambda} = \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \varphi_\lambda^*(\vec{x}) \varphi_\lambda^*(\vec{x}') V(\vec{x}-\vec{x}') \varphi_\lambda(\vec{x}) \varphi_\lambda(\vec{x}')$$

e em termos da função do condensado:

$$\begin{aligned} \langle CB | \mathcal{H}_I | CB \rangle &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \Psi(\vec{x})^* \Psi(\vec{x}')^* V(\vec{x} - \vec{x}') \Psi(\vec{x}) \Psi(\vec{x}') \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \int d\vec{x} \int d\vec{x}' |\Psi(\vec{x})|^2 V(\vec{x} - \vec{x}') |\Psi(\vec{x}')|^2 \end{aligned}$$

Com as mesmas hipóteses de antes, esse termo pode ser avaliado para o pseudo-potencial:

$$\begin{aligned} &\int d\vec{x} \int d\vec{x}' |\Psi(\vec{x})|^2 \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') |\Psi(\vec{x}')|^2 \\ &= \frac{4\pi \hbar^2}{m} a \int d\vec{x} \Psi(\vec{x})^* \Psi(\vec{x})^2, \end{aligned}$$

onde a é o 'scattering length':

$$\langle CB | \mathcal{H}_I | CB \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(\frac{4\pi \hbar^2}{m}\right) a \int d\vec{x} \Psi(\vec{x})^* \Psi(\vec{x})^2$$

Devemos incluir também o termo $-\epsilon \int d\vec{x} |\Psi(\vec{x})|^2$ para levar em conta a normalização do estado Ψ .

Precisamos minimizar o funcional:

$$\begin{aligned} F[\Psi, \Psi^*] &= \langle CB | \mathcal{H}_0 | CB \rangle + \langle CB | \mathcal{H}_I | CB \rangle - \\ &\quad - \epsilon \int d\vec{x} |\Psi(\vec{x})|^2 \end{aligned}$$

Comentário.

O comprimento de espalhamento, ' a ' (scattering length) é definido como:

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \mathcal{V}_0, \text{ com } \mathcal{V}_0 = \int d^3x V(\vec{x}),$$

para potenciais de alcance finito.

O mesmo resultado pode ser obtido usando a aproximação do pseudo-potencial (Huang + Yang, 1957)

$$V(\vec{x}-\vec{x}') = \frac{2\pi a}{m} \hbar^2 \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}'),$$

pois de fato:

$$\mathcal{V}_0 = \int d^3x V(\vec{x}) = \frac{4\pi a}{m} \hbar^2,$$

' a ' é uma medida do alcance do potencial (da ordem do raio da esfera, para o modelo de espalhamento por esferas duras).

Assumimos neste caso que tratamos um gás diluído, onde a distância média entre partículas é muito maior que ' a ':

$$a^3 \bar{n} \ll 1.$$

Assumimos aqui que $a > 0$, para interações repulsivas.

ϵ representa um multiplicador de Lagrange, para levar em conta que o número de partículas é constante:

$$\int d^3x \Psi^*(\alpha) \Psi(\alpha) = N.$$

Se $E = E(N)$ é a energia total, temos a relação:

$$\epsilon = \frac{\partial E(N)}{\partial N}$$

Escrevendo tudo em termos da função de onda Ψ :

$$\begin{aligned}
 F[\Psi, \Psi^*] &= \\
 &= \int d\vec{x} \left\{ \Psi^*(\vec{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} \right) a |\Psi(\vec{x})|^2 \Psi(\vec{x}) - \varepsilon \Psi^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}) \right\} \\
 &= \int d\vec{x} \mathcal{L}(\Psi, \Psi^*, \nabla\Psi, \nabla\Psi^*), \quad \text{onde temos iden-}
 \end{aligned}$$

tificado a 'densidade lagrangiana' \mathcal{L} . O processo variacional fornece eq.'s de Euler-Lagrange para os 'campos' (Ψ, Ψ^*) . Variando Ψ^* , obtemos a equação para Ψ :

$$-\nabla \cdot \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \nabla \Psi^*} + \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \Psi^*} = 0,$$

que conduz a:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x}) + [U(\vec{x}) - \varepsilon] \Psi(\vec{x}) + \\
 + \left(1 - \frac{1}{N} \right) \frac{4\pi\hbar^2}{m} a |\Psi(\vec{x})|^2 \Psi(\vec{x}) = 0,
 \end{aligned}$$

onde o 'campo médio' V_{ef} depende da própria função Ψ :

$$V_{\text{ef}} \equiv \left(1 - \frac{1}{N} \right) \frac{4\pi\hbar^2}{m} a |\Psi(\vec{x})|^2 \approx \frac{4\pi\hbar^2}{m} a m(\vec{x}),$$

para N grande ($N \gg 1$).

A equação obtida para o condensado leva o nome de 'Equação de Gross-Pitaevskii':

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x}) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi(\vec{x})|^2 \right\} \Psi(\vec{x}) = \epsilon \Psi(\vec{x}).$$

Aqui, o parâmetro ϵ pode ser identificado com o potencial químico, pois representa a energia necessária para adicionar uma partícula ao condensado.

A equação acima é uma eq. não-linear que possui soluções solitônicas.

Quando o termo não linear é muito maior que a energia cinética, e para $\epsilon - U(\vec{x}) > 0$, podemos aproximar o perfil do condensado por:

$$|\Psi(\vec{x})|^2 = \begin{cases} \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} [\epsilon - U(\vec{x})], & \epsilon - U > 0, \\ 0, & \text{para } \epsilon - U < 0. \end{cases}$$

Esta aproximação corresponde ao modelo de Thomas-Fermi. É uma aproximação boa para condensados com 10^6 átomos ou mais. Na expressão acima, $U(\vec{x})$ é o potencial confinante. Se for um potencial de oscilador harmônico, o perfil da densidade cai como uma parábola invertida. Na ausência de potencial ($U \equiv 0$), a densidade é uniforme, a menos de efeitos de superfície na borda do condensado:

A eq. de Gross-Pitaevskii pode ser escrita em termos do orbital $\varphi_\lambda(x)$, como:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_\lambda(x) + U(x) \varphi_\lambda(x) + \quad (*) \\
 & + (N-1) \frac{4\pi a^2 \hbar^2}{m} |\varphi_\lambda(x)|^2 \varphi_\lambda(x) = \epsilon \varphi_\lambda,
 \end{aligned}$$

que é uma eq. de Schrödinger não linear para φ_λ . O termo não linear representa um potencial efetivo de interação com os (N-1) bósons restantes. Esse fator (N-1), não muito conveniente, é removido com a definição de $\Psi(x) = \sqrt{N} \varphi_\lambda(x)$, da 'grande função de onda'.

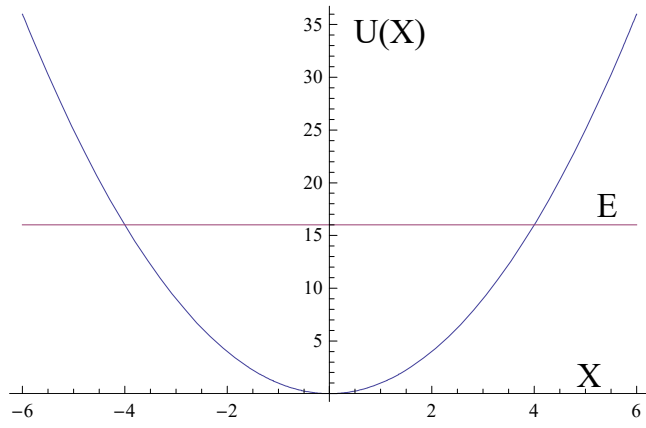
A eq. (*) para o orbital pode ser generalizada para o caso não estacionário, quando o potencial confinante $U(x,t)$ depende explicitamente do tempo:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_\lambda(x,t) = & -\nabla^2 \frac{\hbar^2}{2m} \varphi_\lambda(x,t) + U(x,t) \varphi_\lambda(x,t) + \\
 & + (N-1) \frac{4\pi a^2 \hbar^2}{m} |\varphi_\lambda(x,t)|^2 \varphi_\lambda(x,t)
 \end{aligned}$$

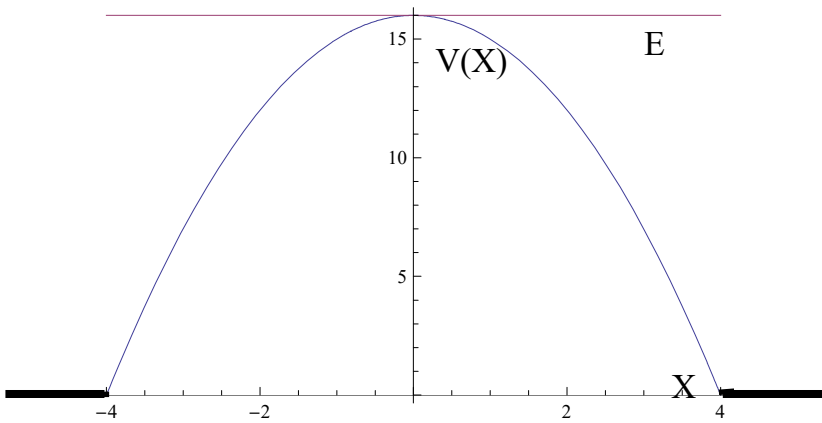
```
U[x_] = x^2
Plot[{U[x], 16.}, {x, -6., 6.}]
```

```
V[A_, x_] = A - x^2
```

Out[3]= x^2



```
A - x^2
Plot[{V[16., x], 16.}, {x, -4., 4.}]
```



$$|\Psi|^2 = \frac{m\epsilon}{4\pi\hbar^2 a}$$

A normalização fornece:

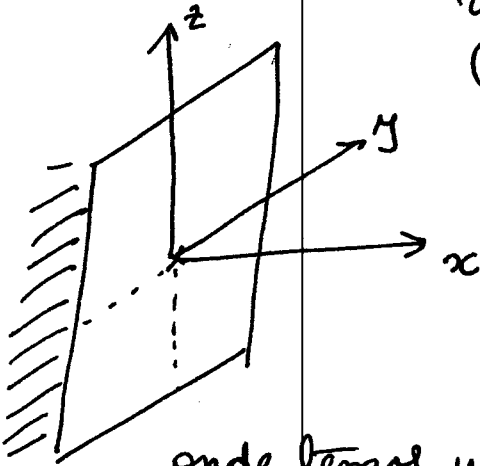
$$N = \int d\vec{x} |\Psi|^2 = \frac{m\epsilon}{4\pi\hbar^2 a} V,$$

de onde tiramos o potencial químico:

$$\epsilon = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a m, \quad m = \frac{N}{V}$$

Sem interações, $a \equiv 0 \Rightarrow \epsilon = 0$.

Perto de uma interface, não podemos negligenciar o termo da energia cinética. Longe da interface, esperamos que a densidade seja constante e uniforme. Supondo uma interface planar, no plano (y-z) (o condensado no semi-espaco $x \geq 0$),



a eq. de G-P é reduzida a 1-dim:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} (m - |\Psi|^2) \Psi = 0,$$

onde temos usado o resultado $\epsilon = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} m$.

Simplificando constantes:

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2} \Psi + 8\pi a (m - |\Psi|^2) \Psi = 0} \quad (\square)$$

Fato curioso: não depende mais de \hbar nem de m (massa microscópica). Isso sugere que (□) é uma equação macroscópica?

A solução de (□) pode ser procurada, escrevendo a função de onda na forma:

$$\Psi = \Psi_0 f(x), \text{ com } |\Psi_0|^2 = m^{\cancel{\lambda}}$$

e $f(x)$ fornecendo o 'perfil' do condensado perto da interface. A função f deve satisfazer as condições:

$$\left. \begin{array}{l} f \rightarrow 1, \text{ para } x \rightarrow +\infty, \\ f \rightarrow 0, \text{ para } x \rightarrow 0. \end{array} \right\} f \text{ real}$$

► Def. Escala de 'penetração', ξ

$$\xi^2 = \frac{1}{8\pi a m}$$

Obtemos então:

$$\xi^2 f'' + (1 - f^2) f = 0$$

Multiplicando por f' , a eq. acima pode ser escrita como uma derivada total:

$$0 = \xi^2 f'' f' + f f' - f^3 f' = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left\{ \xi^2 f'^2 + f^2 - \frac{1}{2} f^4 \right\}$$

$$\Rightarrow \xi^2 f'^2 + f^2 - \frac{1}{2} f^4 = A = \text{cte.},$$

a constante pode ser avaliada em $x \rightarrow \infty$, onde $f' \equiv 0$
e $f \rightarrow 1$

$$1 - \frac{1}{2} = A = \frac{1}{2}$$

Assim:

$$\xi^2 \left(\frac{df}{dx} \right)^2 = \frac{1}{2} - f^2 + \frac{1}{2} f^4 = \frac{1}{2} (1 - f^2)^2,$$

com

$$\xi \left(\frac{df}{dx} \right) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - f^2)$$

Escolhemos a derivada positiva em $x = 0$:

$$\xi \frac{df}{dx} = \frac{1 - f^2}{\sqrt{2}} \Rightarrow \frac{df}{1 - f^2} = \frac{dx}{\xi \sqrt{2}}$$

Integrando:

$$\text{Arctanh } f - \text{Arctanh } f_0 = \frac{x}{\xi \sqrt{2}} - \frac{x_0}{\xi \sqrt{2}}$$

Usando a condição de contorno em $x = 0$, obtemos:

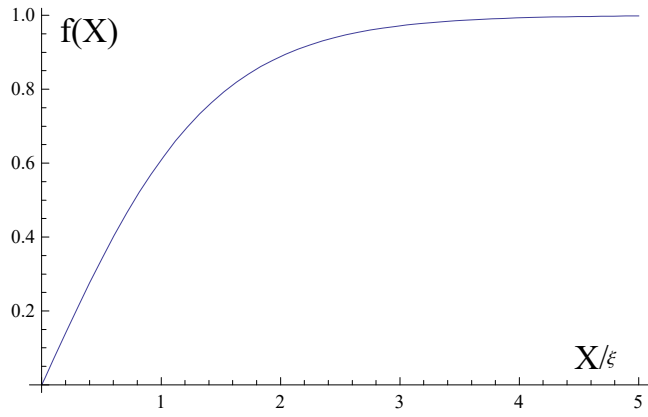
$$\text{Arctanh } f = \frac{x}{\xi \sqrt{2}} \Rightarrow \boxed{f(x) = \tanh\left(\frac{x}{\xi \sqrt{2}}\right)}$$

Portanto, o perfil se estabiliza numa escala dada por ξ :

In[1]:= $f[x_] = \text{Tanh}\left[\frac{x}{\sqrt{2}}\right]$

Out[1]= $\text{Tanh}\left[\frac{x}{\sqrt{2}}\right]$

In[3]:= $\text{Plot}[f[x], \{x, 0., 5.\}]$



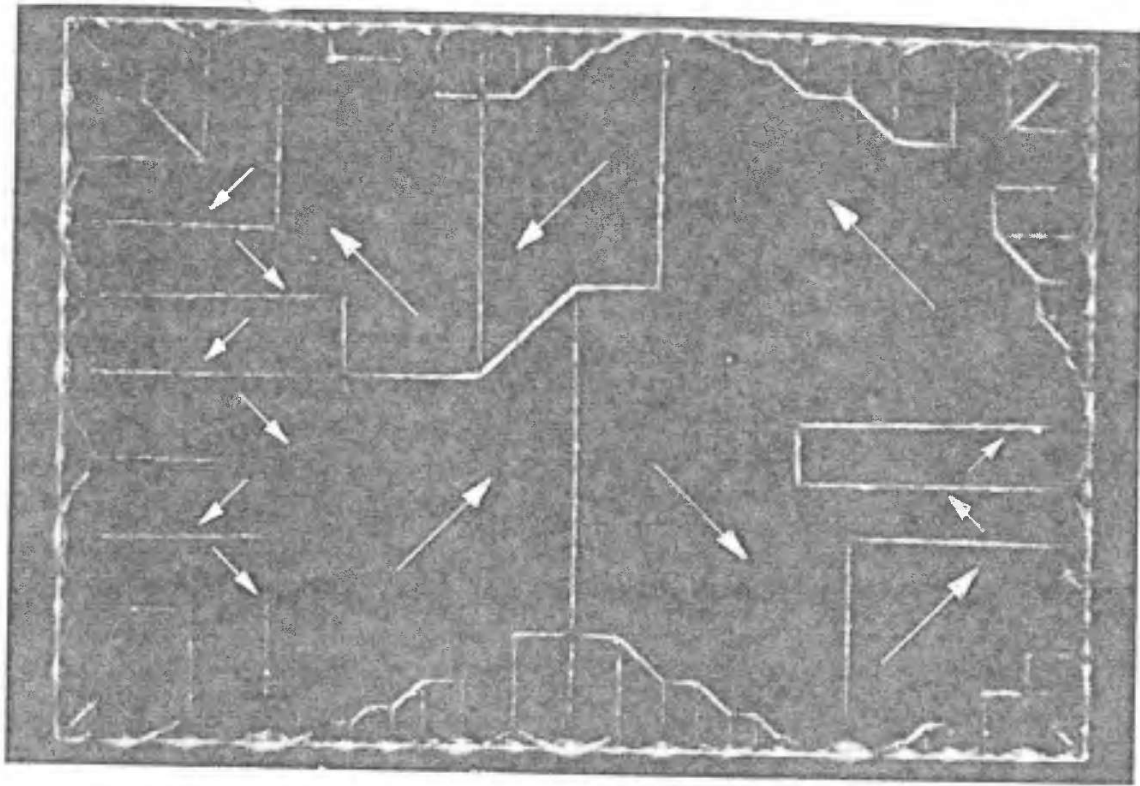


Figure 27 Ferromagnetic domain pattern on a single crystal platelet of nickel. The domain boundaries are made visible by the Bitter magnetic powder pattern technique. The direction of magnetization within a domain is determined by observing growth or contraction of the domain in a magnetic field. (After R. W. De Blois.)

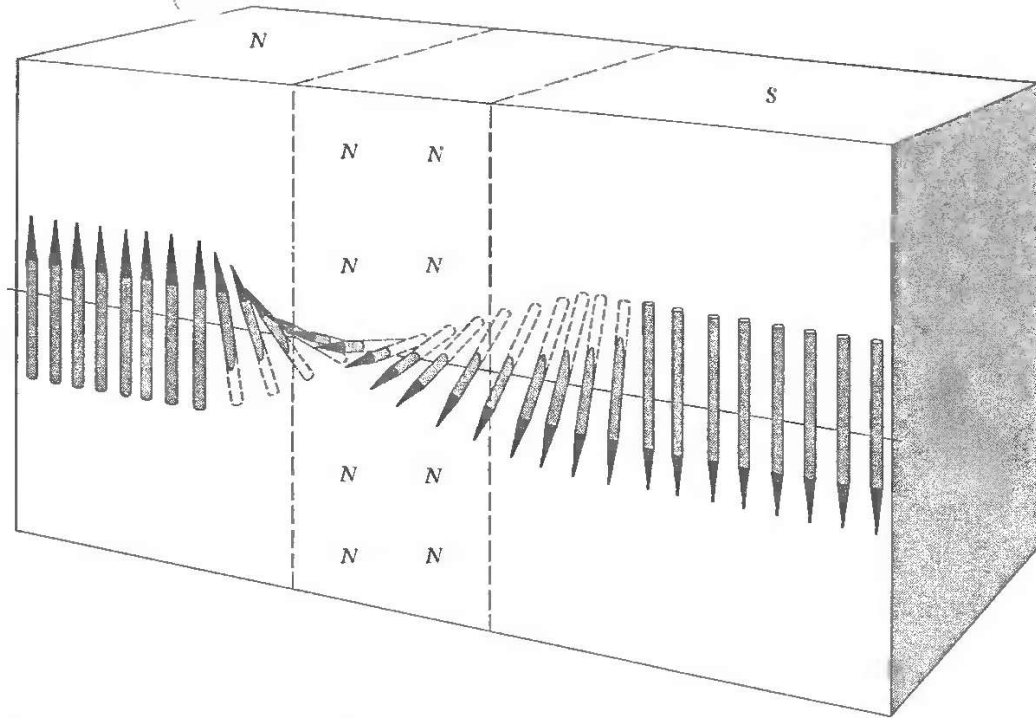


Figure 32 The structure of the Bloch wall separating domains. In iron the thickness of the transition region is about 300 lattice constants.

$$\xi^2 = \frac{1}{8\pi a m} = \frac{v}{8\pi a} = \frac{d^3}{8\pi a},$$

onde $v = \frac{1}{m}$ é o volume por átomo e d é a distância entre átomos:

$$\xi = d \left(\frac{d}{8\pi a} \right)^{1/2} \Rightarrow \sqrt{2} \xi = d \left(\frac{d}{4\pi a} \right)^{1/2},$$

isto é, $\xi\sqrt{2}$ é aproximadamente a largura do filme entre o condensado e o vácuo.

Para descrever propriedades dinâmicas, a Eq. de GP tem sido generalizada como uma eq. de Schrödinger não-linear dependente do tempo, onde

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi(\vec{x}), \text{ para estados estacionários.}$$