

§ Inclusão das interações:

gases imperfeitos e

líquidos quânticos

A maneira mais simples de incluir as interações consiste em introduzir 'campos médios' ou 'campos efetivos' que 'mimicam' as interações entre as partículas através de potenciais de 1-partícula (esse problema, em princípio sabemos resolver). Em geral, esses métodos são variacionais e autoconsistentes, resolvíveis por métodos numéricos.

Para férmions, estudaremos a aproximação de Hartree-Fock, onde a função de onda é formulada como um determinante de Slater de orbitais de 1-partícula.

A forma do orbital é determinada variacionalmente, resolvendo as equações auto-consistentes de Hartree-Fock.

Para bósons, temos que determinar a 'função de onda' do condensado. Um tratamento de campo médio conduz à famosa equação de Gross-Pitaevskii.

§1. Campo médio de bósons

Preliminarmente, analisamos as colisões entre duas partículas. Dentro da 1ª aproximação de Born, obtemos o resultado, para a amplitude de espalhamento:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right) \int d\vec{x}' V(\vec{x}') e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}'},$$

onde $V(\vec{r})$ é o potencial de interação e μ é a massa reduzida. Vemos que $f(\vec{k}', \vec{k})$ é função da transferência de momentum:

$$\vec{p} \equiv \hbar(\vec{k}-\vec{k}').$$

Assim:

$$\begin{aligned} f(\vec{p}) &= -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right) \int_0^\infty r^2 dr V(r) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta e^{i \frac{pr}{\hbar} \cos\theta} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right) 2\pi \int_0^\infty r^2 dr V(r) 2 \frac{\sin(pr/\hbar)}{(pr/\hbar)} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right) \int_0^\infty 4\pi r^2 dr V(r) \frac{\sin(pr/\hbar)}{(pr/\hbar)} \end{aligned}$$

Para potenciais de curto alcance e espalhamento de baixas energias, $\frac{pr}{\hbar} \ll 1$ e

$$\frac{\sin(pr/\hbar)}{(pr/\hbar)} \approx 1,$$

e para a amplitude de espalhamento (independe de \vec{p}):

$$f(\vec{p}) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right) \mathcal{V}_0, \quad \text{com}$$

$$\mathcal{V}_0 \equiv \int_0^\infty 4\pi r^2 dr \, V(r) = \int d\vec{x} \, V(\vec{x}) \quad (\text{o potencial precisa ser integrável}).$$

Para partículas idênticas de massa m , a massa reduzida é:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2}.$$

Exceto pelo sinal, $f(\vec{p})$ tem dimensão de comprimento. Lembrar que:

$|f(\vec{p})|^2 = \frac{d\sigma}{d\Omega}$, e é a seção eficaz de espalhamento.

• Def. Comprimento de espalhamento, a ('scattering length')

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

Notar que a pode ser negativo (potencial atrativo) ou positivo (potencial repulsivo). Aqui vamos supor que

$$a > 0.$$

O mesmo resultado acima pode ser obtido, fazendo a aproximação

do pseudo-potencial (Huang & Yang, 1957):

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

De fato,

$$V_0 = \int d\vec{x} V(\vec{x}) = \frac{4\pi a \hbar^2}{m},$$

onde a pode ser identificado com o 'scattering length'. O pseudo-potencial (*) pode ser pensado como derivado a partir de um potencial de esfera dura para um gás diluído, onde a distância média das partículas é muito maior que a , ou

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

Assumimos um potencial do tipo (*), com $a > 0$, para analisar a aproximação de campo médio para bósons, na fase condensada.

Supomos que o sistema condensa num estado de 1-partícula, que chamamos $|\lambda\rangle$, com função de onda:

$$\varphi_\lambda(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \lambda \rangle.$$

O estado fundamental do condensado é descrito por

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

onde a_λ^\dagger cria uma partícula no estado $|\lambda\rangle$.

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:

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

Escrevendo tudo em termos da função de onda Ψ :

$$F[\Psi, \Psi^*] =$$

$$= \int d\vec{x} \left\{ \Psi^*(\vec{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} \right) a |\Psi(\vec{x})|^2 \Psi(\vec{x}) - \varepsilon \Psi^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}) \right\}$$

$$= \int d\vec{x} \mathcal{L}(\Psi, \Psi^*, \nabla\Psi, \nabla\Psi^*), \quad \text{onde temos iden-}$$

tificado a 'densidade lagrangiana' \mathcal{L} . O processo varia-
cional 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:

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

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:

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

A normalização fornece:

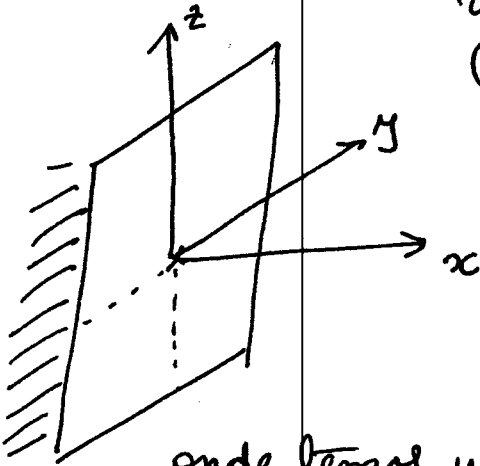
$$N = \int d\vec{x} |\Psi|^2 = \frac{m\epsilon}{4\pi\hbar^2 a} V,$$

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:

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

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:

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

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

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 :

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

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

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