

CONDENSADOS ATÔMICOS DE BOSE-EINSTEIN

A. F. R. de Toledo Piza

CURSO DE VERÃO
IFUSP - 28-30 de janeiro de 2002

Conteúdo

1	Idéia da condensação de Bose-Einstein.	2
1.1	A fórmula de Planck segundo Bose.	3
1.2	Diferenças entre fótons e átomos.	7
1.3	Condensação de N átomos confinados em uma armadilha harmônica.	9
2	Descrição e papel das interações entre bosons.	13
2.1	Interação efetiva.	14
2.2	Papel da interação entre bosons no condensado.	17
2.2.1	Aproximação de campo médio gaussiana.	19
2.2.2	Limite e aproximação de Thomas-Fermi.	23
3	Ondas de matéria e os condensados.	26
3.1	Tipos de interferência com muitos bosons idênticos.	28
3.2	Alguns resultados experimentais.	34

ADVERTÊNCIA

Esta notas foram preparadas para um mini-curso de três aulas oferecido durante o programa de verão de 2002 pelo Instituto de Física da USP. Os estudantes inscritos no curso estavam em estágios muito variáveis de formação, desde os anos de graduação (vários deles não tendo tido ainda contacto mais formal com a mecânica quântica de cursos introdutórios) até estágios iniciais de pós graduação. Devido a essa circunstância, a apresentação procura introduzir algumas idéias de circulação corrente na área sem no entanto impor demandas maiores sobre conhecimentos ou habilidade prévia com a teoria quântica.

Capítulo 1

Idéia da condensação de Bose-Einstein.

O trabalho que deu origem ao que veio a se chamar “condensação de Bose-Einstein”, geralmente tratada em textos de mecânica estatística sob o título geral de “estatísticas quânticas”, tem uma história bastante curiosa. Uma primeira surpresa é a sua data de publicação, 1924 (a referência completa é *Zeitschrift für Physik* **26**, 178 (1924)), portanto *anterior* ao trabalho de 1925 de Heisenberg onde pela primeira vez a teoria quântica aparece desvencilhada da cinemática clássica de trajetórias que ainda prevalece na velha teoria quântica de Bohr, por exemplo. Outra surpresa é a autoria do trabalho, que aparece simplesmente como “Bose”, da Universidade de Dacca, Índia. Hoje essa referência é citada como sendo de autoria de S. N. Bose (as iniciais significam Satyendra Nath, talvez uma formatação anglo-saxônica ultramarina de Satyendranath, veja www-groups.dcs.st-andrews.ac.uk/~history/Mathematicians/Bose/html). Ela foi escrita em inglês mas publicada em alemão numa tradução de A. Einstein, com uma nota do tradutor, que afirma tratar-se, “em sua opinião”, de uma “contribuição de peso”, que “fornece também uma teoria quântica dos gases ideais”, como “mostrará em outro lugar”¹. O título do trabalho de Bose de certo modo desanuviava a questão de datas: trata-se de “A fórmula de Planck e a hipótese dos quanta de luz”. O assunto é, portanto, a radiação de corpo negro. O trabalho foi enviado a Einstein por conter uma crítica ao uso de um ingrediente clássico, a lei do deslocamento de Wien, e de um outro que valoriza a concordância da teoria quântica com a teoria clássica, o princípio de correspondência de Bohr, no trabalho (de 1917) em que Einstein, por sua vez, obtém a fórmula de Planck utilizando a idéia de quanta de luz. O que Bose faz, essencialmente, é tratar de evitar tais licenças com o uso de idéias da mecânica estatística aplicadas diretamente aos quanta de luz. E o que Einstein fez em seguida, cumprindo a promessa feita em sua nota de tradutor, foi estender o tratamento a um sistema de partículas livres, mostrando que em

¹Não há aqui, portanto qualquer referência à possível existência de qualquer outro tipo de “estatística quântica” (tipo férmions). A primeira sugestão de que um conjunto de elétrons tivesse um comportamento estatístico diferente foi, de fato, feita por Sommerfeld apenas em 1928 (*Zeitschrift für Physik* **47**, 1 (1928)).

temperaturas suficientemente baixas ocorre o empilhamento de uma fração finita das partículas (a qual tende a 1 quando a temperatura tende a zero) no estado de menor energia (que pode ser sempre tomado como tendo energia zero com uma escolha apropriada da escala de energia). É a esse empilhamento que se chamou condensação de Bose-Einstein.

1.1 A fórmula de Planck segundo Bose.

O modo pelo qual Bose chegou à fórmula de Planck depende, em primeiro lugar, da idéia de que a luz de frequência ν é formada de “quanta” (que, usando a linguagem de hoje, passamos a chamar *fótons*) cuja energia é $h\nu$ e cujo momento é um vetor de módulo $p = h\nu/c$ na direção de propagação do quantum (ou fóton). Para poder escrever a energia total de um sistema contendo muitos fótons de diversas frequências dentro de um volume V , é conveniente em primeiro lugar dividir a escala de frequências em um grande número de pequenos intervalos $d\nu$. Chamando \bar{n}_i o número de fótons com frequência dentro do pequeno intervalo cuja frequência média é ν_i , a energia total E pode ser representada pela soma

$$E = \sum_i \bar{n}_i h\nu_i. \quad (1.1)$$

O problema consiste então em determinar os valores dos \bar{n}_i que correspondem ao estado de equilíbrio termodinâmico do conjunto de fótons no volume V . Isso foi feito por Bose à moda de Boltzmann e Planck, escolhendo a distribuição *macroscópica* (isto é, observada com baixa resolução, sem ter em conta diferenças finas demais que existem em princípio mas que não são detectáveis através de meios de observação adaptados, digamos, à escala humana usual) que é compatível com o número máximo de realizações *microscópicas*. As realizações microscópicas de uma distribuição macroscópica especificam essa distribuição de modo em princípio completo, isto é, a menos de diferenças sem consequência macroscopicamente observável. Uma vez aceito esse princípio, e uma vez escolhido um modo para caracterizar as distribuições microscópicas e também as macroscópicas, a determinação da distribuição macroscópica de equilíbrio pode ser feita através de processos de contagem e comparação, que podem ser levados a cabo sem muita dificuldade.

Para caracterizar uma distribuição microscópica do conjunto de fótons Bose divide o *espaço de fases* dos fótons (que é tomado como sendo um espaço de seis dimensões, contendo além das três dimensões espaciais x, y, z , três dimensões adicionais correspondentes às componentes p_x, p_y, p_z do momento²) em pequenas “células”, cada uma das quais com volume h^3 . Note que

²Com isto, na realidade, e malgrado as críticas feitas a Einstein, Bose está se amarrando em idéias clássicas, embora de um modo que, na época, não poderia ter sido advertido, pois a versão quântica do espaço de fases (entendido de forma geral como o espaço no qual residem os *estados* do sistema) ainda pertencia ao futuro.

h tem dimensões de “ação”, que corresponde a comprimento vezes momento, de modo que h^3 tem dimensões corretas para representar um volume no espaço de fases de seis dimensões, um produto de três comprimentos por três momentos. Essas células são, então, todas numeradas, e uma distribuição microscópica é caracterizada em termos de “números de ocupação” n_i que especificam quantos fótons se encontram na célula i do espaço de fases.

Dentro do mesmo esquema, uma distribuição macroscópica é apenas algo como uma visão míope de distribuições microscópicas: as células de volume h^3 são agrupadas em “pacotes” de $g \gg 1$ células, os pacotes são numerados cada um com o seu próprio rótulo j e são contados todos os fótons N_j que estão contidos em cada um dos pacotes. A distribuição macroscópica é caracterizada então pelo conjunto dos N_j . As coisas devem ser arranjadas de forma que o número de pacotes também seja muito grande, embora cada um deles contenha, como foi dito, um número muito grande g de células.

A questão que se coloca, então, é quantas distribuições microscópicas correspondem a uma dada distribuição macroscópica. A resposta a essa questão³ é dada pelo número de maneiras de redistribuir os N_j fótons do j -ésimo pacote entre as suas g células constituintes, um problema combinatório bastante típico. Para ver qual é a sua solução, é conveniente representar cada um dos N_j fótons por um símbolo \bullet e representar a parte da distribuição microscópica que corresponde às g células do j -ésimo pacote por uma seqüência do tipo

$$1 \bullet 23 \bullet \bullet \bullet 4 \bullet 567 \bullet \bullet 89 \bullet \dots g \bullet \bullet$$

significando que na célula 1 há um fóton, nenhum na 2, três na 3, etc. A quantidade de \bullet depois de cada número representa os fótons que estão na célula do pacote considerado que tem esse número, de modo que o número total de \bullet na seqüência é N_j . Com esse estratagema é fácil ver que o número de distribuições microscópicas distintas dentro do j -ésimo pacote (que é chamado o “peso estatístico” do pacote, P_j) é

$$P_j = \frac{(g + N_j - 1)! g}{g! N_j!}.$$

De fato, cada seqüência deve começar por um número entre 1 e g ; o número de permutações dos demais é então $(g + N_j - 1)!$, mas se o primeiro puder ser qualquer um dos números entre 1 e g , é preciso ainda multiplicar esse número por g . O resultado inclui agora permutações tanto dos fótons quanto das células. A permutação dos números é redundante, porque qualquer distribuição microscópica pode ser representada escrevendo os números de 1 a g na sua ordem

Por sorte, no entanto, o resultado dos argumentos de mecânica estatística resulta ser válido sob condições mais gerais que as que foram usadas para obtê-lo!

³O cálculo a seguir constitui na realidade uma variante daquele que foi utilizado por Bose. Ele reproduz o que se encontra em W. P. Allis e M. A. Herlin, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, McGraw-Hill, 1952.

natural, e essa redundância é corrigida por $g!$ no denominador. O outro fator do denominador, $N_j!$, é incluído a pretexto do fato de que *os fótons são indistinguíveis* e portanto a contagem de suas permutações é também redundante. Esse procedimento pode ser usado para cada um dos pacotes independentemente, de modo que o peso estatístico total P_{tot} de uma dada distribuição macroscópica, caracterizada por um conjunto de números N_j , é dado pelo produto

$$P_{\text{tot}} = \prod_j P_j = \prod_j \frac{(g + N_j - 1)! g}{g! N_j!}.$$

O problema seguinte é determinar qual é a distribuição de N_j 's, com uma energia E total dada, para a qual P_{tot} é máximo. Em vez do máximo de P_{tot} , é mais conveniente buscar o máximo do logaritmo de P_{tot} (uma quantidade que Boltzmann identificou como sendo proporcional à entropia), dado que o logaritmo é uma função que cresce monotonicamente. O cálculo é ainda simplificado pelo fato de que g e os N_j 's devem ser números suficientemente grandes para que logaritmos de suas fatoriais possam ser bem aproximados pela fórmula de Stirling

$$\ln N! \simeq N \ln N - N,$$

de modo que

$$\begin{aligned} \ln P_{\text{tot}} &\simeq \sum_j [\ln g + (g + N_j - 1) \ln(g + N_j - 1) - (g + N_j - 1) - g \ln g + g - N_j \ln N_j + N_j] \\ &\simeq \sum_j [(g + N_j) \ln(g + N_j) - g \ln g - N_j \ln N_j] \end{aligned}$$

A simplificação conseguida na última linha resultou de desprezar também 1 e $\ln g$ em comparação com g , N_j e $g + N_j$. Esta última expressão pode ser escrita de uma forma ainda mais conveniente introduzindo mais uma definição, a da *ocupação média* de cada uma das células do j -ésimo pacote, $\bar{n}_j \equiv N_j/g$. Com essa definição, de fato, se obtém

$$\ln P_{\text{tot}} \simeq \sum_j g [(\bar{n}_j + 1) \ln(\bar{n}_j + 1) - \bar{n}_j \ln \bar{n}_j] = \sum_i [(\bar{n}_i + 1) \ln(\bar{n}_i + 1) - \bar{n}_i \ln \bar{n}_i] \quad (1.2)$$

onde finalmente o fator inicial g foi absorvido substituindo a soma sobre pacotes j pela soma sobre células i (todas as células de cada pacote tendo a mesma ocupação *média*).

O máximo de $\ln P_{\text{tot}}$ deve ser agora calculado variando as ocupações médias \bar{n}_i das células com a condição de que a energia total tenha o valor prescrito E . Supondo que as células tenham sido escolhidas de forma que cada uma delas corresponda a fótons de energia dada

$h\nu_i$ (o que pode ser feito retalhando, como sugerido de início, o espaço de fase de uma forma apropriada) essa condição pode ser expressa em termos das ocupações médias \bar{n}_i usando nada mais que a expressão (1.1). Essa condição pode ser levada em conta através de um multiplicador de Lagrange β (recurso de uso freqüente!), calculando o extremo não apenas de $\ln P_{\text{tot}}$ mas de $\ln P_{\text{tot}} - \beta E$, isto é, obtendo os \bar{n}_i que tornam nula a variação dessa quantidade, $\delta(\ln P_{\text{tot}} - \beta E) = 0$. Em termos dos \bar{n}_i ,

$$\delta \sum_i [(\bar{n}_i + 1) \ln(\bar{n}_i + 1) - \bar{n}_i \ln \bar{n}_i - \beta \bar{n}_i h\nu_i] = 0 \quad (1.3)$$

ou seja

$$\sum_i \delta \bar{n}_i (\ln(\bar{n}_i + 1) - \ln \bar{n}_i - \beta h\nu_i) = 0.$$

Como o anulamento deve valer para variações $\delta \bar{n}_i$ arbitrárias, resulta que

$$\ln \left(\frac{\bar{n}_i + 1}{\bar{n}_i} \right) = \beta h\nu_i \quad \text{ou seja} \quad \bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta h\nu_i} - 1}$$

Esse resultado é uma função do multiplicador de Lagrange β , que deve ser determinado através da condição (1.1). O significado de β pode ser obtido a partir da expressão de Boltzmann para a entropia

$$S = k \ln P_{\text{tot}}$$

onde k é a constante de Boltzmann, e da relação entre a entropia e a energia $\partial S / \partial E = 1/T$, sendo T a temperatura. Isso dá $\beta = 1/kT$.

A distribuição de equilíbrio resultante

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\frac{h\nu_i}{kT}} - 1}$$

é o que se chama hoje uma *distribuição de Bose-Einstein*. Ela conduz diretamente à fórmula de Planck. De fato, como as ocupações médias obtidas \bar{n}_i dependem apenas da energia dos fótons, e como esta, por sua vez, depende apenas do módulo do momento, o volume do espaço de fases que corresponde a um pequeno intervalo de energia $d\nu$ tomado em torno da energia média ν será, usando o fato de que $p = h\nu/c$,

$$V \times 4\pi p^2 dp = V \times 4\pi \frac{h^3 \nu^2}{c^3} d\nu$$

de modo que o número de células com volume h^3 será $V \times 4\pi \frac{\nu^2}{c^3} d\nu$. A rigor, esse número deve ser multiplicado por 2 para acomodar os dois estados possíveis de polarização dos fótons, o que leva o número de células a $V \times 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} d\nu$. Usando esse resultado na expressão para a energia (1.1), a contribuição dE dos fótons que se encontram nessas células será

$$dE = V \times 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} d\nu \times \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{V} \frac{dE}{d\nu} = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

que é a fórmula de Planck.

1.2 Diferenças entre fótons e átomos.

Cierro los ojos y veo una bandada de pájaros. La visión dura un segundo o acaso menos; no sé cuántos pájaros vi. ¿Era definido o indefinido su número? El problema involucra el de la existencia de Dios. Si Dios existe, el número es definido, porque Dios sabe cuantos pájaros vi. Si Dios no existe, el número es indefinido, porque nadie pudo llevar la cuenta. En tal caso, vi menos de diez pájaros (digamos) y más de uno, pero no vi nueve, ocho, siete, seis, cinco, cuatro, tres o dos pájaros. Vi un número entre diez y uno que no es nueve, ocho, siete, seis, cinco, etcétera. Ese número entero es inconcebible; *ergo*, Dios existe. (J. L. Borges, *ARGUMENTUM ORNITHOLOGICUM*).

O tratamento dado por Bose aos “quanta de luz” os torna muito semelhantes a partículas (ou, mais concretamente, a átomos, na medida em que estes possam ser tomados como “elementares”, isto é, na medida em que a sua estrutura interna possa ser ignorada para fins dinâmicos). Em particular, o espaço de fases (clássico!) usado serve também para partículas, ou átomos. Existe, no entanto, uma diferença importante, que teve que ser levada em conta por Einstein em sua extensão do trabalho de Bose: ao interagir com a matéria (digamos, a superfície interna da cavidade que constitui o corpo negro), fótons podem ser absorvidos, podendo ocorrer também a emissão de outros, novos, fótons pela matéria. Isso significa que, mesmo em condições em que o valor da energia total é prescrito, o *número* total de fótons presentes no sistema não precisa obedecer a qualquer prescrição. Este fato se fez presente no cálculo da seção anterior no ponto em que obtivemos o extremo de $\ln P_{\text{tot}}$ impondo apenas condições sobre a energia total, *não* sobre o número total de fótons. No caso de partículas (átomos), porém, esse número total é também prescrito (dado que átomos não são absorvidos ou emitidos, como são os fótons) e isso implica em que o cálculo do extremo de $\ln P_{\text{tot}}$ feito na seção anterior deva ser modificado de modo a ter em conta esta prescrição adicional.

A modificação é na realidade simples. Se o número total de átomos é N , a nova prescrição pode ser escrita em termos das ocupações médias \bar{n}_i das células como

$$N = \sum_i \bar{n}_i \quad (1.4)$$

que pode ser incluída em (1.3) por meio de um segundo multiplicador de Lagrange α , de modo que a condição de extremo passa a ser agora

$$\delta \sum_i [(\bar{n}_i + 1) \ln(\bar{n}_i + 1) - \bar{n}_i \ln \bar{n}_i - \beta \bar{n}_i h\nu_i - \alpha \bar{n}_i] = 0 \quad (1.5)$$

Um cálculo em tudo semelhante ao que foi feito no caso dos fótons leva agora ao resultado

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta e_i + \alpha} - 1}.$$

Note que a expressão $h\nu_i$ para a energia dos fótons foi substituída por e_i , que deve ser entendida como a energia associada aos átomos na célula i . O valor de α deve ser determinado através de (1.4), da mesma forma que o de β é determinado pela prescrição (1.1) sobre o valor da energia total (também com a substituição $h\nu_i \rightarrow e_i$!). Se β é expresso em termos da temperatura, a prescrição sobre o número total de átomos é levada em conta escolhendo α de modo a satisfazer a relação

$$N = \sum_i \frac{1}{e^{\frac{e_i}{kT} + \alpha} - 1}. \quad (1.6)$$

Do mesmo modo que, dada a relação entre $\ln P_{\text{tot}}$ e a entropia S , relações termodinâmicas gerais foram usadas para relacionar β com a temperatura, é possível relacionar também α com variáveis termodinâmicas. Para isolar a variável relevante α deve ser escrito em termos de uma nova quantidade μ como $\alpha = -\mu/kT$, onde k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. A quantidade μ (que tem dimensões de energia) corresponde então ao que se chama o *potencial químico*. Desse modo

$$e^\alpha = e^{-\frac{\mu}{kT}} \equiv \frac{1}{z} \quad \text{onde portanto} \quad z \equiv e^{\frac{\mu}{kT}} = e^{-\alpha}.$$

A quantidade z é por sua vez conhecida como *fugacidade*. A determinação de α através de (1.6) determina portanto uma outra quantidade termodinâmica, o potencial químico μ , ou, equivalentemente, a fugacidade z . A ocupação média das células do espaço de fases \bar{n}_i pode então ser escrita em termos do potencial químico como

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\frac{e_i - \mu}{kT}} - 1}.$$

Esta última expressão revela uma limitação importante sobre o potencial químico μ : como \bar{n}_i não pode ser negativo (qualquer que seja a célula i !), é preciso que $e^{\frac{e_i - \mu}{kT}} > 1$, o que por sua vez implica que se deve ter $e_i > \mu$, para *todos* os e_i . Em outras palavras, o potencial químico μ deve ser *menor* que o *menor* dos e_i . Quanto mais ele tiver que se aproximar do menor dos e_i na tentativa de satisfazer a condição (1.6), mais a ocupação média das células correspondentes será favorecida com relação às demais. O mecanismo numérico por trás do que se chama condensação de Bose-Einstein é, a partir deste ponto de vista, o favorecimento extraordinário da ocupação média das células de menor energia quando, para acomodar o número prescrito N de bosons, é preciso que μ se aproxime drasticamente desse limite superior.

1.3 Condensação de N átomos confinados em uma armadilha harmônica.

A passagem da última seção para o que vem a seguir envolve na realidade um salto temporal de mais de 70 anos. A continuação natural do que foi dito até aqui, e que foi efetivamente implementada por Einstein ao cumprir a promessa feita por ocasião da publicação do trabalho de Bose, consiste em usar energias de partículas livres de massa M , $e_i = p_i^2/2M$ para com elas calcular efetivamente uma distribuição \bar{n}_i , tomando o “limite termodinâmico” que consiste em pensar em um número muito grande de átomos em um volume também muito grande, de modo que a densidade tenha um valor dado. O fato de que há seis ou sete anos⁴ a condensação de Bose-Einstein em um gás rarefeito de Rubídio foi pela primeira vez produzida e observada num laboratório, estando os átomos do gás confinados em uma armadilha magnética, reorientou o interesse para uma situação física diferente: de um “vasto gás” no sentido termodinâmico usual para um conjunto *finito* de N átomos presos em uma armadilha.

Em 1996 Ketterle e van Druten⁵ estudaram a relação (1.6) para um sistema formado por N bosons submetidos a um potencial externo de oscilador harmônico, que representa a “armadilha” experimental que os mantém sob a mira e poder do experimentador. Esse potencial é tomado como sendo

$$V(x, y, z) = \frac{K_x}{2}x^2 + \frac{K_y}{2}y^2 + \frac{K_z}{2}z^2$$

não sendo portanto necessariamente isotrópico, de modo que suas superfícies equipotenciais são em geral elipsóides mais ou menos alongados e/ou achatados, dependendo dos valores adotados para as constantes elásticas K_x , K_y e K_z . A idéia era verificar como o acúmulo de bosons no

⁴M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews *et al.*, *Science* **296**, 198 (1995).

⁵W. Ketterle e N. J. van Druten, *Phys. Rev.* **A54**, 656 (1996)

estado de menor energia depende da forma do potencial confinante, particularmente em casos em que as equipotenciais são muito achatadas (“configurações bi-dimensionais”) ou muito finas e compridas (“configurações uni-dimensionais”). Mas vamos nos restringir aqui ao caso em que as três constantes elásticas são iguais, $K_x = K_y = K_z \equiv K$, que corresponde a equipotenciais esféricas. As energias e_i que entram no cálculo de (1.6) são agora os níveis quânticos de energia de um boson de massa M nesse potencial de oscilador que, escolhendo a escala de energia de modo que a energia do primeiro estado seja zero, são dados pela expressão simples

$$e_i \longrightarrow e_{n_i^{(x)} n_i^{(y)} n_i^{(z)}} = \left(n_i^{(x)} + n_i^{(y)} + n_i^{(z)} \right) \hbar \omega \quad \text{com} \quad \omega = \sqrt{\frac{K}{M}} \quad (1.7)$$

onde $n_i^{(x)}$, $n_i^{(y)}$ e $n_i^{(z)}$ são inteiros não negativos, $0, 1, 2, \dots$ e \hbar é a constante de Planck dividida por 2π .

A condição (1.6) assume uma forma mais conveniente re-escrevendo as ocupações médias \bar{n}_i como

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\frac{e_i - \mu}{kT}} - 1} = \frac{e^{-\frac{e_i - \mu}{kT}}}{1 - e^{-\frac{e_i - \mu}{kT}}} = \frac{ze^{-\frac{e_i}{kT}}}{1 - ze^{-\frac{e_i}{kT}}} \quad (1.8)$$

onde $z = e^{\frac{\mu}{kT}}$ é a fugacidade. Como a escala de energia foi escolhida de modo que a menor energia é zero, resulta, em particular, que a ocupação do estado de menor energia \bar{n}_0 (que neste caso é único, por isso não é preciso dizer ocupação média!) se exprime simplesmente em termos da fugacidade z como

$$\bar{n}_0 = \frac{z}{1 - z}, \quad (1.9)$$

um resultado que vai ser útil logo adiante. A expressão (1.8) pode ainda ser escrita como a soma de uma série infinita, usando o estratagema de uso freqüente que é a expressão para a soma de uma série geométrica

$$\sum_{j=0}^{\infty} x^j = \frac{1}{1 - x}, \quad x < 1$$

que dá, usada de trás para diante em (1.8),

$$\bar{n}_i = ze^{-\frac{e_i}{kT}} \sum_{j=0}^{\infty} \left(ze^{-\frac{e_i}{kT}} \right)^j = \sum_{j=1}^{\infty} \left(ze^{-\frac{e_i}{kT}} \right)^j = \sum_{j=1}^{\infty} z^j e^{-j \frac{e_i}{kT}}.$$

Isso pode agora ser levado à condição (1.6), usando a forma explícita (1.7) para as energias e_i . Com um pouquinho de álgebra ela fica assim reduzida a

$$N = \sum_i \bar{n}_i = \sum_{j=1}^{\infty} z^j \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-jn \frac{\hbar\omega}{kT}} \right)^3 = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{\left(1 - e^{-j \frac{\hbar\omega}{kT}}\right)^3}.$$

Pode ser útil apontar alguns dos possíveis meandros e corredeiras desse cálculo. Em primeiro lugar, as energias são, no caso do oscilador tri-dimensional, dadas pela soma de três termos, veja (1.7). Levada ao expoente, essa soma dá o produto de três exponenciais, cada uma com seu próprio n . A soma sobre i é, neste caso a soma sobre todas as ternas possíveis $n_i^{(x)}$, $n_i^{(y)}$ e $n_i^{(z)}$. Isso equivale então ao produto de três somas iguais, ou seja, ao cubo de uma delas. É claro que, de acordo com (1.7), existem muitos estados com a mesma energia, quando esta é um múltiplo inteiro grande de $\hbar\omega$, pois um número inteiro grande pode ser escrito como a soma de outros três, não negativos, de muitas maneiras diferentes, e uma das características úteis do procedimento seguido é que não foi necessário parar para contá-las, pois a multiplicidade correta resulta automaticamente da soma tripla que foi efetuada. Finalmente, estamos na realidade fora das limitações associadas ao espaço de fases clássico usado por Bose, pois estamos somando sobre estados genuinamente quânticos! Para isso temos, é claro, que confiar na robustez do resultado obtido através dele para as ocupações médias de estados de energia bem definida. É claro que nos 70 anos transcorridos houve ampla oportunidade para que isso fosse verificado, embora não esteja sendo esmiuçado aqui.

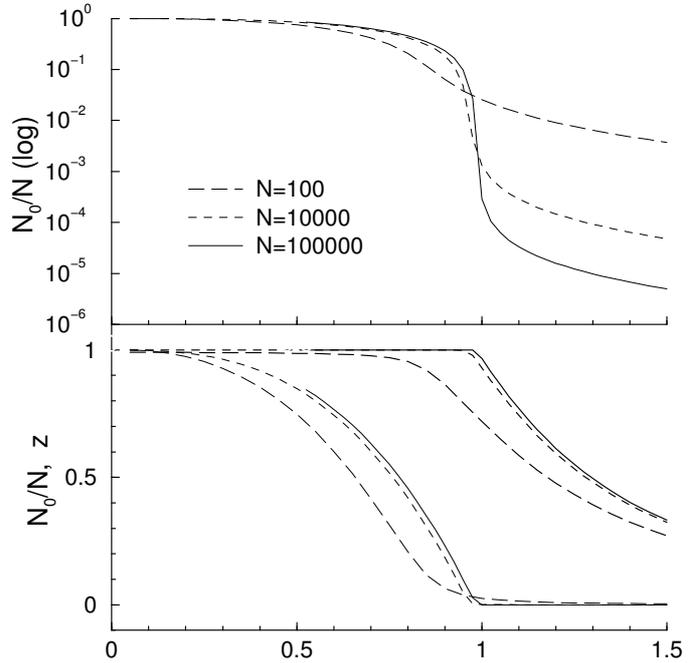
O resultado do trabalho feito é então ter a condição (1.6) posta, no caso da armadilha harmônica, sob a forma

$$N = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{\left(1 - e^{-j \frac{\hbar\omega}{kT}}\right)^3}. \quad (1.10)$$

Uma vez fixados N e o potencial da armadilha (este último através da frequência ω do oscilador), e para um dado valor da temperatura T , essa relação pode ser vista como uma equação para determinar a fugacidade z (ou, equivalentemente, o potencial químico μ). Essa equação não pode ser resolvida analiticamente, mas isso não é um problema maior com os recursos atuais de cálculo numérico, pelo menos para fins práticos. Resultados numéricos tanto para a fugacidade z como para a fração do número N de bosons que ocupam o estado de menor energia, \bar{n}_0/N , são mostrados como função da temperatura no gráfico da figura 1.1. A figura contém curvas para três valores de N , $N = 100$, $N = 10000$ e $N = 100000$. A relação entre \bar{n}_0/N é dada pela relação (1.9). A temperatura está representada em unidades de uma “temperatura de referência” T_c^0 , dependente de N e ω , definida como

$$T_c^0 \equiv \left(\frac{N}{1.202} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar\omega}{k}. \quad (1.11)$$

Figura 1.1: Ocupação do estado de menor energia, N_0/N , e fugacidade, z , (apenas no gráfico inferior) como função de T/T_0 , para os valores indicados do número total de partículas N . Note que o eixo das abcissas no gráfico superior é logarítmico para mostrar mais claramente o comportamento de N_0/N na região de transição e acima dela.



O curioso número 1.202... é na realidade a soma da série $\sum_{j=1}^{\infty} 1/j^3$, incluído na definição de T_c^0 para que o valor de T/T_c^0 abaixo do qual o empilhamento de bosons no estado de menor energia se instala se aproxime de 1 quando N se torna muito grande.

Como mostrado na figura, a fração N_0/N dos bosons que se empilham no estado de menor energia (note que como o estado de menor energia aqui é *único*, o número N_n na realidade coincide com o \bar{n}_0 , dado em termos da fugacidade pela relação (1.9) cresce rapidamente quando T/T_0 cai abaixo de 1, especialmente nos casos em que o número de partículas é maior. A temperatura T_0 desempenha portanto o papel de uma temperatura de transição para o empilhamento massivo. O valor da temperatura de transição pode ser obtido substituindo os valores das constantes em (1.11), com o resultado

$$T_0 = T_c^0 \equiv \left(\frac{N}{1.202} \right)^{\frac{1}{3}} 4.8 \times 10^{-11} \times \nu(\text{Hz})^0 K$$

onde ν é a frequência da armadilha em Hertz. Para um valor “típico” de 200 Hz, T_0 é da ordem de 40 nano-Kelvin para $N = 100$, 200 nano-Kelvin para $N = 10000$ e 400 nano-Kelvin para $N = 100000$ partículas. Para ter uma ocupação francamente majoritária do estado de menor energia, portanto, é preciso atingir temperaturas substancialmente inferiores a essas!

Capítulo 2

Descrição e papel das interações entre bosons.

Os bosons tratados até aqui têm a invulgar simplicidade de não interagirem um com outro. Na realidade, as interações existem (em última análise são as mesmas que fazem com que os átomos se organizem em moléculas, líquidos, cristais, etc.), e o propósito do que segue é indicar modos de lidar com os seus efeitos no contexto particular dos condensados atômicos de Bose-Einstein.

A primeira idéia que pode ocorrer é a de que nada do que foi feito até aqui seja relevante, e por ter sido feito sobre pressupostos por demais irrealísticos. Afinal, graças às interações, o que existe não são gases atômicos ideais, mas moléculas, líquidos, cristais, etc. em que diferentes átomos, e possivelmente um número enorme deles, estão de vários modos correlacionados entre si. Os estados de um tal sistema certamente não são bem descritos por energias de átomos individuais, e é preciso inventar então esquemas melhor adaptados a essas complicações reais para descreve-los. É claro que tudo isso é de certo modo (e de um modo bastante importante) verdade. Não é, no entanto, *toda* a verdade. É apenas o lado da verdade segundo a qual Rubídio a temperaturas próximas do zero absoluto é um sólido, quando, de outro lado, um gás rarefeito de Rubídio mostrou condensação de Bose-Einstein em laboratório a essas *mesmas* temperaturas. As interações aqui podem ter tido (e tiveram, e têm) seus efeitos, mas eles não têm muito a ver com os que dominam a cena no caso do sólido. Procurando entender os efeitos das interações no gás rarefeito e frio vamos ter mais elementos para fazer uma idéia mais clara do que pode separar tão bem essas duas verdades.

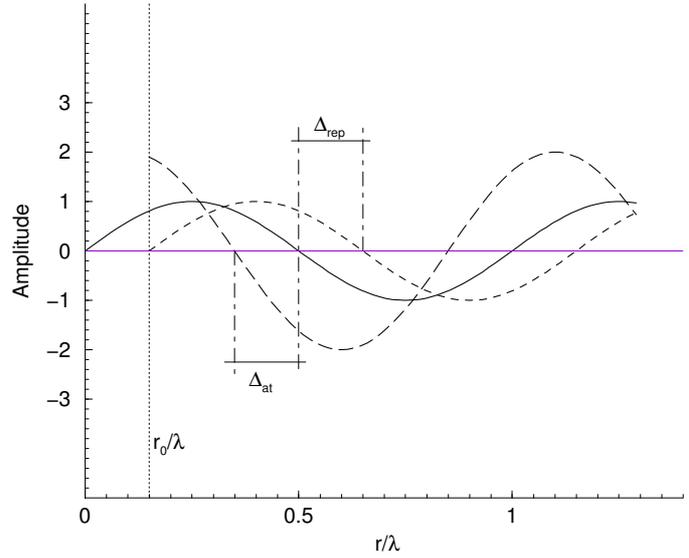
2.1 Interação efetiva.

Os condensados atômicos de Bose-Einstein produzidos em laboratório são não apenas sistemas muito frios mas também sistemas bastante rarefeitos: densidades típicas são 10^{14} ou 10^{15} átomos por centímetro cúbico (compare isso com a densidade padrão de água comum de torneira, cerca de 3×10^{22} moléculas por centímetro cúbico). Isso faz com que a distância média entre átomos seja suficientemente grande para que, quando dois deles interagem, a probabilidade de que um terceiro esteja também por perto, apto a participar da interação dos dois, seja também bastante pequena. Como os átomos do condensado são extraordinariamente frios, a interação de dois deles é essencialmente elástica, pois o preço energético das excitações disponíveis não pode ser pago por eles. Os processos elásticos conservam energia e momento (ou o pouco disso que há), e uma combinação dessas duas circunstâncias (espalhamento elástico, e quase sempre espalhamento elástico de *dois* átomos) é o que dá ao condensado sua relativa estabilidade. De fato, a interação entre os átomos é rica em estados ligados (estados moleculares diatômicos), mas para que dois átomos não ligados passem para um desses estados é preciso que eles se livrem de parte da energia com a qual iniciam a interação. O modo mais viável para que isso aconteça é a participação de um terceiro átomo no processo, que fica encarregado de carregar consigo a energia sobressalente (providenciando, além disso, para que o momento total seja devidamente conservado). Esse mecanismo, chamado *recombinação de três corpos*, é de fato um fator limitante para a vida dos condensados, mas ele é inibido pela baixa densidade a ponto de que a vida dos condensados chega à faixa de vários segundos.

Na medida em que mecanismos de colapso do tipo da recombinação de três corpos possam ser ignorados, o que há a considerar é portanto a interação de um par de átomos quase livres, que antes de iniciar a interação dispõe para isso de muito pouca energia cinética. Nessas condições, o processo de colisão é extraordinariamente insensível às particularidades da interação, e pode ser muito bem caracterizado através de um único parâmetro diretamente relacionado com a seção de choque para o espalhamento (elástico) dos dois átomos.

Em geral, para um valor dado da energia envolvida na colisão, a seção de choque elástica $d\sigma/d\Omega$ é uma função possivelmente complicada do ângulo de espalhamento, e portanto exige vários parâmetros para a sua caracterização. No entanto, quando duas partículas interagem a uma energia muito baixa, no sentido que o comprimento de onda de de Broglie $\lambda = h/p$ (onde p é o momento relativo das partículas) é muito maior que o alcance da interação entre elas (e esse é efetivamente o caso para os bosons de um condensado armadilhado) a seção de choque se torna independente do ângulo de espalhamento. Como ela tem dimensões de área, pode ser escrita como $d\sigma/d\Omega = a^2$, onde a tem dimensões de comprimento. Devido à independência do ângulo de espalhamento, a seção de choque total (integrada sobre os ângulos) é dada simplesmente por $\sigma = 4\pi a^2$. Nestas condições, qualquer modificação da interação que *preserve o valor de a* se torna irrelevante. Isso abre caminho para a substituição do que possa

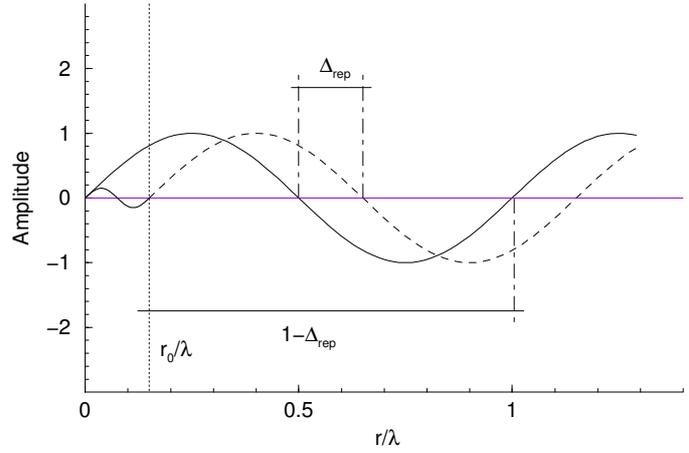
Figura 2.1: Ondas radiais no espalhamento de duas partículas. A distância relativa entre as partículas é medida em termos do comprimento de onda de Broglie λ . A linha cheia corresponde à ausência de interação, que ocorre dentro da região delimitada por r_0/λ . A onda pontilhada é empurrada para fora, e a tracejada é puxada para dentro dessa região.



ser a “interação real” entre as partículas por qualquer outra (possivelmente mais conveniente para o uso!) que leve ao mesmo valor de a . O valor de a pode ainda variar ligeiramente com a energia disponível para a colisão, e o *limite* desse valor quando a energia disponível é extrapolada para zero é chamado *comprimento de espalhamento*. No regime de temperaturas extremamente baixas dos condensados atômicos de Bose-Einstein é possível ignorar também a dependência da seção de choque com a energia, restando portanto para caracterizá-la apenas o comprimento de espalhamento.

Existe porém um problema grave com essa identificação do comprimento de espalhamento que precisa ser devidamente considerado. Como a seção de choque é real, a é também real, mas como a seção de choque é dada em termos de a^2 , permanece uma ambiguidade no *sinal* de a , dado que $\pm a$ levam à mesma seção de choque. Esse sinal na realidade tem a ver com o caráter atrativo ou repulsivo da interação, embora *não* seja completamente determinado por ele. Para ter uma idéia do que acontece, é preciso ter pelo menos uma imagem esquemática do que acontece em um problema quântico de espalhamento, e para isso a figura 2.1 pode ser útil. O movimento relativo de duas partículas *livres* é representado pela onda mostrada na figura como uma linha cheia, que pode ser escrita como $\sin 2\pi r/\lambda$. Quando existe uma interação *repulsiva* entre as partículas, que age quando as partículas estão próximas (digamos, dentro da região delimitada por r_0/λ na figura) um observador do espalhamento vê a onda que representa o movimento relativo das partículas empurrada para fora dessa região. No caso da figura, o zero que está na origem para a onda que representa o caso sem interação foi empurrado para r_0/λ , o que corresponde a duas “esferas duras” de raio $r_0/2$ cada uma. A onda vista pelo observador

Figura 2.2: Se a onda livre $\sin 2\pi r/\lambda$ é puxada para dentro de um potencial atrativo de modo que $\tilde{\Delta}_{\text{at}}$ seja dado por $1 - \Delta_{\text{rep}}$, sendo Δ_{rep} o mesmo que o da fig. 2.1, o observador externo não vê qualquer diferença com relação ao caso em que o deslocamento é para fora (potencial repulsivo) e dado por Δ_{rep} .



nesse caso pode ser escrita como $\sin 2\pi(r/\lambda - \Delta_{\text{rep}})$, usando a notação indicada também na figura. Para uma interação atrativa, por outro lado, o observador do espalhamento vê a onda que representa o espalhamento puxada para dentro da região de interação, que pode então ser escrita como $\sin 2\pi(r/\lambda + \Delta_{\text{at}})$ (essa onda foi representada na figura com amplitude 2, isto é, $2\sin 2\pi(r/\lambda + \Delta_{\text{at}})$; isso foi feito apenas com o intuito de tornar a figura mais clara, note que esta discussão tem a ver apenas com a *fase* das ondas, não com a sua amplitude). Note que o observador *não tem acesso* ao que acontece na região de interação, tudo o que ele vê é o deslocamento Δ da fase da onda com relação à situação correspondente à ausência de interação. O sinal do comprimento de espalhamento resulta, nestes casos, ser *contrário* ao sinal de Δ , isto é *positivo* num caso como o de Δ_{rep} e *negativo* num caso como o de Δ_{at} .

Mas isto ainda não é o fim da questão, pois a periodicidade da onda pode pregar (e prega) algumas peças. Por exemplo, uma interação suficientemente *atrativa* pode puxar a onda para dentro da região de interação dando-lhe um deslocamento $\tilde{\Delta}_{\text{at}} = 1 - \Delta_{\text{rep}}$, com $\Delta_{\text{rep}} < 1/2$, como na figura 2.1. O observador do espalhamento vê então uma onda

$$\sin 2\pi(r/\lambda + \tilde{\Delta}_{\text{at}}) = \sin 2\pi(r/\lambda + 1 - \Delta_{\text{rep}}) = \sin 2\pi(r/\lambda - \Delta_{\text{rep}})$$

e é levado a crer que a interação é repulsiva! Essa situação é mostrada na figura 2.2, onde aparece uma das possíveis formas da onda na região interna ao potencial, $r/\lambda < r_0/\lambda$. Os bosons frios do condensado atômico pensam da mesma forma, e se comportam como se a interação entre eles fosse repulsiva. Por outro lado, o comprimento de espalhamento é neste caso também *positivo*, que é a sua forma de compartilhar da opinião do observador e dos bosons frios.

De uma forma geral, o que determina o sinal do comprimento de espalhamento é o sinal do “deslocamento efetivo” $\Delta_{\text{ef}} = \Delta + n/2$, onde n é o inteiro positivo ou negativo tal que essa quantidade esteja compreendida no intervalo $-1/2 < \Delta < +1/2$. O comprimento de

espalhamento é positivo se Δ_{ef} for negativo, e vice-versa. Uma diferença de um número inteiro em Δ simplesmente modifica por um múltiplo de 2π o argumento do seno e portanto não tem nenhum efeito sobre a onda; uma diferença de um número semi-inteiro, por outro lado, simplesmente troca o sinal da onda, o que também não tem nenhum efeito porque quantidades fisicamente relevantes não dependem da onda, mas do seu quadrado (mais precisamente, do quadrado do seu módulo, caso ela seja complexa).

Desse modo, a “interação efetiva” que determina as propriedades do condensado real de Bose-Einstein depende apenas do comprimento de espalhamento, e é atrativa ou repulsiva quando ele é negativo ou positivo, respectivamente. E *qualquer* interação que corresponda ao mesmo comprimento de espalhamento será igualmente boa. Uma classe de potenciais que satisfaz a esses requisitos pode ser representada por

$$v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \left[\frac{1}{\pi^{3/2} b^3} e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{b^2}} \right].$$

A “intensidade” do potencial é dada pelo primeiro fator, onde a é o comprimento de espalhamento. A expressão entre colchetes é uma “forma” escolhida arbitrariamente como sendo uma gaussiana cuja integral é 1, com uma largura (que corresponde a um “alcance”) b , muito menor que os comprimentos de onda de de Broglie envolvidos. O que se usa, na realidade, é o limite dessa classe de potenciais quando $b \rightarrow 0$, isto é, quando a gaussiana se torna infinitamente fina e alta, sempre com integral 1. Nesse caso os bosons (que são tratados como partículas puntiformes) interagem apenas quando estão no mesmo ponto, e o potencial é chamado um “potencial de contacto”. A gaussiana-limite é escrita como $\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, que é uma função (chamada função delta de Dirac) que é zero para $\vec{r}_1 \neq \vec{r}_2$ e infinita para $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$, e isso de modo que $\int d^3r \delta(\vec{r}) = 1$. A interação entre os bosons do condensado é portanto usualmente escrita em termos do potencial efetivo

$$v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (2.1)$$

que é repulsivo se $a > 0$ e atrativo se $a < 0$.

2.2 Papel da interação entre bosons no condensado.

Em princípio, a existência de interação entre os bosons, mesmo no gás atômico rarefeito, faz com que ele se torne tão intratável quanto qualquer dos outros sistemas correlacionados de muitos corpos que garantem a continuidade e sustentação do trabalho em física da matéria condensada, física atômica e física nuclear, por exemplo (férmions têm papel central nestas físicas, mas isto pode ser visto como um pequeno detalhe técnico, deste ponto de vista). A

interação entre bosons faz com que a dinâmica de cada um deles não seja independente da dinâmica dos outros, ao contrário do que acontece no caso do gás livre. Em outras palavras, o sistema “se correlaciona” dinamicamente, e o tratamento de correlações dinâmicas¹ é sempre uma tarefa complicada, mesmo quando encarado de forma apenas aproximada.

Quando o sistema é bastante rarefeito (cada uma das partículas está suficientemente separada das demais a maior parte do tempo), como acontece no caso dos condensados atômicos de Bose-Einstein (e também em casos em que ele é apenas *efetivamente* rarefeito, isto é, cada uma das partículas tem sua interação com as demais inibida a maior parte do tempo, como acontece notadamente com os férmions da física nuclear), existe um tipo de aproximação o qual, sem ignorar completamente a interação entre partículas, ignora no entanto efeitos de correlação devidos a essa interação. Esse tipo de tratamento consiste em tratar a dinâmica de uma partícula tendo em conta apenas o efeito “médio” de sua interação com as outras. Este efeito médio se traduz simplesmente num potencial adicional, ao qual cada uma das partículas está sujeita, o qual depende no entanto do estado das demais. Como o estado de cada uma das partículas que contribui para esse potencial adicional depende, por sua vez, dele, o que se perde nesse tipo de tratamento é a linearidade característica das equações da mecânica quântica: o potencial que define a dinâmica de cada partícula já depende, ele mesmo, dessa dinâmica.

Aproximações desse tipo são conhecidas como *aproximações de campo médio*, e são extremamente úteis também em outros ramos da física, como os que foram citados acima. É claro que, por serem cegas às correlações dinâmicas entre partículas, a utilidade destas aproximações se restringe a aspectos ou propriedades do sistema que não dependam de modo essencial dessas correlações. Um exemplo do que *não pode* ser tratado em termos tão simples é a modificação do mecanismo de condensação de Bose-Einstein devido à existência de interações entre os bosons (isto é, o mecanismo de condensação em um gás de Bose-Einstein não ideal). A existência de correlações faz com que a imagem simples de muitos bosons se empilhando no estado de menor energia tenha que ser modificada na medida em que o estado de cada boson não possa ser mais pensado como sendo definido independentemente do dos demais. Na realidade, o efeito das correlações dinâmicas entre bosons até mesmo sobre quantidades definidas macroscopicamente, como a temperatura que demarca a transição para um regime condensado, é até hoje um problema em aberto. No entanto, este particular efeito é *empiricamente* pequeno no caso dos condensados atômicos rarefeitos, pois as temperaturas de transição observadas (e portanto reais!) são, dentro da precisão disponível, compatíveis com os valores calculados para o gás ideal (v. pag. 12).

¹A insistência, que pode até parecer desmesurada, em fazer acompanhar ‘correlações’ do adjetivo ‘dinâmicas’ nos próximos parágrafos se deve ao fato de que em sistemas de partículas idênticas há outro tipo de correlações a ter em conta, às quais estará reservado o adjetivo ‘cinemáticas’, por não terem elas nada a ver com a interação entre partículas, mas apenas com o fato de elas serem idênticas. Essas correlações têm extrema relevância para a questão dos efeitos de interferência em condensados de Bose-Einstein, e serão tratadas no capítulo 3.

2.2.1 Aproximação de campo médio gaussiana.

O que vamos procurar montar aqui, e com recursos mínimos, é um tipo particularmente simples de aproximação de campo médio para o estado de um conjunto rarefeito de N bosons com uma interação efetiva descrita pelo potencial de contacto dado por (2.1), à temperatura *zero*. Nesse caso não vale a pena introduzir explicitamente uma temperatura, e depois fazê-la tender a zero, mas é mais simples procurar diretamente o estado de menor energia do sistema de muitos bosons, que deve servir para aproximar pelo menos algumas propriedades de condensados reais observados no laboratório que não dependem de correlações de modo crucial. Vamos estar considerando especificamente a energia total e a distribuição espacial do sistema de muitos bosons.

Vamos então supor, dentro do espírito da aproximação de campo médio, que o estado de cada um dos N bosons seja descrito por uma função de onda $\phi(\vec{r})$, de modo que o quadrado de seu módulo, $|\phi(\vec{r})|^2$, represente a distribuição espacial da localização desse boson. Então é natural impor sobre essa função a *condição de normalização*

$$\int d^3r |\phi(\vec{r})|^2 = 1 \quad (2.2)$$

que significa, de acordo com as regras da mecânica quântica, que a probabilidade de que o boson esteja em algum lugar (não importando qual!) é 1. Além disso, todos os bosons do sistema terão, no estado de energia mínima, a mesma função de onda. Para fazer contacto com o cálculo do gás ideal, feito na seção 1.3, vale a pena observar que ali todos os bosons, na temperatura zero, terão a função de onda correspondente ao estado fundamental do oscilador harmônico que serve como armadilha. No caso de haver interação entre bosons, no entanto, a presença do potencial médio devido aos outros bosons modifica a função de onda.

A energia total do gás pode então ser escrita como a soma de três contribuições: a primeira é a energia cinética K dos bosons; a segunda é a energia potencial V_{arm} dos bosons na armadilha; e a terceira é a energia potencial média de interação V_{int} devida à interação (2.1) entre os bosons. Então

$$E = K + V_{\text{arm}} + V_{\text{int}} \quad (2.3)$$

e, usando as regras normais da mecânica quântica, é possível escrever cada uma das três contribuições em termos de $\phi(\vec{r})$ como

$$K = N \frac{1}{2M} \int d^3r \phi^*(\vec{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 \phi(\vec{r}) ; \quad V_{\text{arm}} = N \int d^3r \phi^*(\vec{r}) V_0(\vec{r}) \phi(\vec{r}) ;$$

e

$$V_{\text{int}} = \frac{1}{2}N \int d^3r \phi^*(\vec{r}) \left[(N-1) \int d^3r' \phi^*(\vec{r}') v(\vec{r}, \vec{r}') \phi(\vec{r}') \right] \phi(\vec{r}).$$

Não é difícil entender a estrutura dos dois primeiros termos: no primeiro, o operador $\hbar \vec{\nabla}/i$ representa o momento de um boson, e no segundo $V_0(\vec{r})$ representa o potencial que constitui a armadilha, de modo que, a menos do fator N , eles representam a energia cinética e a energia associada ao potencial da armadilha para *um boson*. Os fatores N têm em conta o fato de que cada um dos bosons contribui igualmente para a energia total no que se refere a esses dois tipos de energia. A estrutura de V_{int} , por outro lado, pode ser facilmente entendida tendo em vista a forma de V_{arm} e a idéia de potencial médio que faz parte da aproximação. De fato, o termo entre colchetes é uma função de \vec{r} que tem, aqui, um papel semelhante ao que é desempenhado por $V_0(\vec{r})$ em V_{arm} ; e a estrutura do que está dentro dos colchetes mostra que essa função representa um potencial adicional agindo sobre cada um dos bosons e devido à sua interação com os $N-1$ demais. Como cada um dos demais bosons por sua vez está associado também à função de onda $\phi(\vec{r}')$, esse potencial adicional tem a forma de uma média em \vec{r}' do potencial de interação $v(\vec{r}, \vec{r}')$, tomada com a distribuição espacial de cada um dos $N-1$ demais bosons. Finalmente, o fator global $1/2$ em V_{int} evita a contagem dupla da interação entre pares de bosons.

O problema de obter uma aproximação para o estado de menor energia desse sistema se reduz dessa forma ao de achar a função $\phi(\vec{r})$ que torna o valor de E mínimo. A solução desse problema pode ser reduzida à resolução de uma equação diferencial (que conforme anunciado, não é linear), usando técnicas padrão de cálculo variacional², mas vamos nos limitar aqui a um estratagema mais simples que acaba dando uma boa aproximação para o problema variacional de resolver exatamente a aproximação de campo médio: vamos *impor* que a função de onda $\phi(\vec{r})$ seja uma gaussiana com largura β a ser determinada

$$\phi(\vec{r}) \longrightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\beta} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r^2}{2\beta^2}},$$

²A expressão (2.3) para a energia em termos da função $\phi(\vec{r})$ adquiriu muito recentemente um interesse adicional: em 16 de dezembro de 2001 apareceu no servidor de preprints de Los Alamos um trabalho de Lieb e Seiringer (math-ph/0112032 v1) no qual é *provado* que, no limite em que $N \rightarrow \infty$ e o comprimento de espalhamento $a \rightarrow 0$ com a condição de que $N \times 4\pi\hbar^2 a/M$ se mantenha constante, a função $\phi(\vec{r})$ que minimiza essa expressão para a energia dá uma solução *exata* para o estado de menor energia do sistema de N bosons. Isso significa em particular que, nessas condições, o que seria uma aproximação de campo médio é na realidade a solução exata. É claro que o limite considerado por Lieb e Seiringer não é realizável fisicamente, pois a função $\phi(\vec{r})$ que minimiza a energia tem uma extensão espacial finita e independente de N , de modo que ele corresponde a densidades que também tendem para o infinito. No entanto, a demonstração do teorema pode lançar alguma luz sobre quão longe do limite exato estão diferentes situações experimentalmente realizáveis, e aqui reside, eventualmente, o seu conteúdo empírico. (Devo agradecimentos ao João Carlos Barata por ter chamado minha atenção sobre este trabalho e por um par de conversas sobre ele).

onde o primeiro fator garante a validade da condição de normalização (2.2) qualquer que seja o valor de β . Uma vez feita a escolha do potencial $V_0(\vec{r})$ que representa a armadilha, isso permite calcular as integrais explicitamente, e portanto escrever a energia total E como uma função de β . O passo final será então determinar o valor de β que minimiza a energia $E(\beta)$. Isto é o que se chama a *aproximação gaussiana* ao problema variacional.

Vamos manter para $V_0(\vec{r})$ a escolha feita na seção 1.3, isto é, um potencial de oscilador harmônico de frequência ω

$$V_0(\vec{r}) \longrightarrow \frac{M\omega^2}{2} r^2 \quad (2.4)$$

com o que o cálculo da energia total se reduz a algumas integrais gaussianas, levando a um resultado que pode ser posto sob a forma simples

$$E(\beta) = N\hbar\omega \left[\frac{3}{4} \left(\frac{b^2}{\beta^2} + \frac{\beta^2}{b^2} \right) + \frac{(N-1)a}{\sqrt{2\pi} b} \frac{b^3}{\beta^3} \right] \quad (2.5)$$

onde $b = \sqrt{\hbar/M\omega}$ e a é o comprimento de espalhamento proveniente de (2.1). O objeto entre colchetes é adimensional, e representa a energia por partícula em unidades da energia de oscilador, $\hbar\omega$. O mínimo da energia total corresponde, é claro, ao mínimo da energia por partícula, quando β é variado com todos os outros parâmetros constantes. Para identificar esse mínimo é conveniente usar apenas as variáveis adimensionais

$$x \equiv \frac{\beta}{b}, \quad \gamma \equiv \frac{(N-1)a}{\sqrt{2\pi} b} \quad \text{e} \quad \epsilon(x) \equiv \frac{E(\beta)}{N\hbar\omega} \quad (2.6)$$

e analisar os zeros da derivada

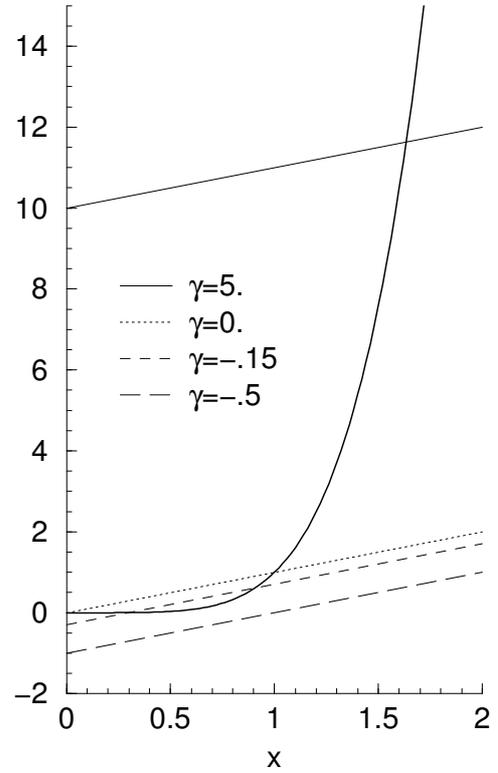
$$0 = \frac{d\epsilon(x)}{dx} = \frac{d}{dx} \left[\frac{3}{4} \left(\frac{1}{x^2} + x^2 \right) + \frac{\gamma}{x^3} \right] = -\frac{3}{2} \left(\frac{1}{x^3} - x \right) - \frac{3\gamma}{x^4}$$

$$\frac{1}{2x^3} + \frac{\gamma}{x^4} = \frac{x}{2} \quad \text{ou simplesmente} \quad x + 2\gamma = x^5. \quad (2.7)$$

Note que para escrever a equação nesta última forma foi feita uma multiplicação por x^4 , o que introduz uma solução espúria em $x = 0$ quando $\gamma = 0$.

A solução gráfica desta equação é representada na figura 2.3. O seu lado direito é uma parábola de quinto grau, representada pela curva cheia, enquanto o seu lado esquerdo é uma reta que encontra o eixo $x = 0$ no ponto 2γ , representada na figura para vários valores de γ . É importante lembrar que o valor do parâmetro γ depende do número de partículas, do comprimento de espalhamento e do potencial harmônico que representa a armadilha, v. definições (2.6).

Figura 2.3: Solução gráfica da eq. (2.7). Dos dois casos representados com valores de γ negativos, o que corresponde a $\gamma = -.15$ mostra a existência de dois extremos, ao passo que o que corresponde a $\gamma = -.5$ já não dá nenhuma solução (real). O caso $\gamma = 0$ corresponde ao gás ideal, e neste caso a solução $x = 1$ corresponde ao estado fundamental do oscilador que representa a armadilha, enquanto a solução $x = 0$ é espúria, resultando da multiplicação por x^4 feita para chegar à eq. (2.7).



Quando o comprimento de espalhamento é *positivo* (i.e., a interação entre bosons é efetivamente repulsiva) existe uma única interseção das duas curvas em um valor $x > 1$ que corresponde a um mínimo de $\epsilon(x)$, pois $\epsilon(x > 0)$ é sempre positiva e se torna muito grande quando $x \rightarrow 0$ e quando $x \rightarrow \infty$. O fato de que o mínimo corresponde a um valor $x > 1$ significa que $\beta > b$, ou seja, a função de onda gaussiana que minimiza a energia é *mais larga* que a que representa o estado fundamental da armadilha. Isto é um efeito do potencial médio adicional visto por cada boson, que é neste caso também repulsivo.

Quando, porém, o comprimento de espalhamento é *negativo* (a interação entre bosons é efetivamente atrativa, e $\gamma < 0$), o eixo $x = 0$ é interceptado pela reta que representa o lado esquerdo da equação em um ponto de ordenada também negativa, o que leva inicialmente a *duas* soluções, ambas com x compreendido entre 0 e 1, para a condição de derivada nula. À medida que γ se torna mais negativo, as duas soluções se aproximam uma da outra, se juntam para um determinado valor de γ e em seguida desaparecem (como números reais, pelo menos). Quando $\gamma < 0$ a energia por partícula $\epsilon(x > 0)$ cresce para $x \rightarrow \infty$ mas *decrece* para $-\infty$ quando $x \rightarrow 0$, pois o termo negativo γ/x^3 finalmente domina o termo positivo $3/4x^2$ nesse limite. Isso permite concluir que a menor das raízes corresponde a um máximo, ao passo que a maior é um

mínimo. À medida que γ se torna mais negativo, o máximo e o mínimo se aproximam até que ambos desapareçam, e $\epsilon(x > 0)$ passe a ter um comportamento monotonicamente crescente (v. figura 2.4).

A interpretação desses resultados em termos das propriedades dos condensados é a de que condensados de átomos que interagem entre si de forma efetivamente repulsiva são estáveis e adquirem numa armadilha dimensões espaciais *maiores* que a que corresponde ao estado fundamental da armadilha. Já quando a interação entre os átomos é efetivamente atrativa, a energia por partícula $\epsilon(x)$ *sempre* se aproxima de $-\infty$ quando $x \rightarrow 0$. Isso significa que a energia diminui à medida que o sistema se torna mais e mais denso. Em outras palavras, o sistema sofre colapso atrativo quando a densidade é suficientemente grande. No entanto, para valores não muito negativos de γ (o que, para um dado valor do comprimento de espalhamento e para uma dada armadilha, pode ser conseguido limitando suficientemente o número de átomos) $\epsilon(x)$ tem um mínimo com $x < 1$, e portanto com $\beta < b$, a gaussiana associada ao estado correspondente do condensado sendo mais estreita que o estado fundamental da armadilha. Esse mínimo é separado da região de colapso por uma “barreira” o que garante uma situação de *metaestabilidade* para o sistema de bosons. À medida que N aumenta, γ se torna mais negativo, o efeito protetor da barreira diminui levando finalmente ao colapso do sistema. *Todas* essas propriedades foram efetivamente observadas no caso de condensados atômicos de ${}^7\text{Li}$, para o qual $a \sim -1.5$ nm. Nas condições experimentais utilizadas, o número máximo de átomos que pode ser acumulado sem que o sistema colapse é da ordem de alguns milhares³.

2.2.2 Limite e aproximação de Thomas-Fermi.

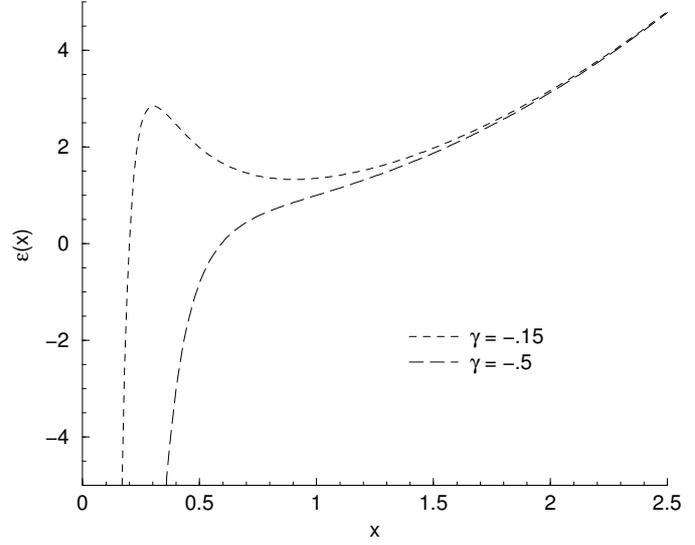
Os valores de γ realizáveis no caso de interações efetivamente repulsivas chegam facilmente a valores apreciavelmente maiores que 1. Nestas condições, o termo da energia total (2.3) que representa a energia cinética se torna pequeno em comparação com a soma dos outros dois, e em vez de simplificar o problema variacional impondo uma forma gaussiana à função $\phi(\vec{r})$, pode-se recorrer à aproximação alternativa de ignorar o termo referente à energia cinética na expressão para a energia total. É claro que os resultados desta aproximação alternativa são tão melhores quanto melhor estiver satisfeita a condição

$$K \ll V_{\text{arm}} + V_{\text{int}}.$$

Situações desse tipo pertencem ao que é chamado o “limite de Thomas-Fermi”, e a função, normalizada segundo a condição (2.2), que minimiza a energia aproximada

³C. A. Sackett, C. C. Bradley, M. Welling e R. G. Hulet, Appl. Phys. **B65**,433 (1997); J. M. Jertton, D. Strekalov, I. Prodan e R. G. Hulet, Nature **408**, 692 (2000).

Figura 2.4: Energia adimensional por partícula $\epsilon(x)$ para os dois valores negativos de γ incluídos na figura 2.3. O mínimo metaestável aparece no caso em que $\gamma = -.15$, enquanto no caso $\gamma = -.5$ já não há “barreira” para inibir o colapso atrativo.



$$E \simeq V_{\text{arm}} + V_{\text{int}} = N \int d^3r |\phi(\vec{r})|^2 V_0(\vec{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a N^2}{M} \int d^3r |\phi(\vec{r})|^4$$

corresponde à chamada “aproximação de Thomas-Fermi” para o estado de menor energia do sistema de muitos bosons. Nesta expressão aproximada para a energia o fator $N(N-1)$ de V_{int} foi substituído simplesmente por N^2 , o que não tem maior gravidade em casos típicos nos quais N é da ordem de 10^5 átomos, e o potencial efetivo de interação $v(\vec{r}, \vec{r}')$ foi substituído por sua forma usual (2.1).

Uma simplificação importante conseguida descartando a contribuição da energia cinética é a de que o problema variacional não leva mais a uma equação diferencial, mas a uma simples equação algébrica. A determinação da função $\phi(\vec{r})$ (que pode ser tomada como sendo real) que minimiza a expressão aproximada para E pode ser feita a partir da condição

$$\delta \int d^3r \left[N\phi(\vec{r})^2 V_0(\vec{r}) + \frac{N^2}{2} \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \phi(\vec{r})^4 - N\mu\phi(\vec{r})^2 \right] = 0 \quad (2.8)$$

onde o símbolo δ indica o termo linear em $\delta\phi(\vec{r})$ da integral sobre \vec{r} quando a função $\phi(\vec{r})$ sofre uma variação

$$\phi(\vec{r}) \longrightarrow \phi(\vec{r}) + \delta\phi(\vec{r}).$$

O último termo em (2.8) dá conta da condição de normalização através de um multiplicador de Lagrange, escrito por conveniência como $N\mu$. A função que minimiza a energia na aproximação de Thomas-Fermi deve portanto satisfazer a condição

$$N \int d^3r \left[\phi(\vec{r}) V_0(\vec{r}) + N \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \phi(\vec{r})^3 - \mu \phi(\vec{r}) \right] \delta\phi(\vec{r}) = 0$$

qualquer que seja a variação $\delta\phi(\vec{r})$ efetuada sobre a função $\phi(\vec{r})$. Isso só é possível se a função entre colchetes for identicamente nula, isto é

$$\phi(\vec{r}) \left[V_0(\vec{r}) - \mu + N \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \phi(\vec{r})^2 \right] = 0.$$

Portanto as possíveis soluções são

$$N\phi(\vec{r})^2 = \frac{\mu - V_0(\vec{r})}{\frac{4\pi\hbar^2 a}{M}} \quad \text{ou} \quad \phi(\vec{r}) = 0.$$

A quantidade $N\phi(\vec{r})^2$ representa a densidade de partículas em \vec{r} , e deve portanto ser positiva. Desse modo, a primeira solução é válida em todos os pontos em que $\mu > V_0(\vec{r})$. Nos demais pontos a única solução possível é a segunda, nula. O valor do multiplicador de Lagrange μ (que resulta ser o potencial químico) é determinado através da condição de normalização (2.2), que agora pode ser escrita como

$$\int_{\mu > V_0(\vec{r})} d^3r \frac{\mu - V_0(\vec{r})}{\frac{4\pi\hbar^2 a}{M}} = N,$$

onde a integração é estendida a toda a região em que $\mu > V_0(\vec{r})$. No caso da armadilha harmônica (2.4) a densidade de partículas tem uma forma de sino, que difere do resultado da aproximação gaussiana notadamente pelo corte abrupto nos pontos em que $V_0(\vec{r}) = \mu$. Esta característica das densidades obtidas através da aproximação de Thomas-Fermi resulta de ter sido ignorada a energia cinética. Como esta é sempre positiva e envolve o laplaciano da função $\phi(\vec{r})$, tem a tendência de suavizar as curvaturas da distribuição de densidades.

Capítulo 3

Ondas de matéria e os condensados.

Na página do grupo de W. Ketterle sobre “gases alcalinos quânticos no MIT” a mecânica quântica é apresentada para leigos como “um modo de descrever as leis do universo pensando tudo como ondas”¹. Curiosamente, este enfoque está na mais completa contra-mão daquele que levou, em primeiro lugar, à idéia dos condensados de Bose-Einstein que, como visto no capítulo 1, foi considerar a luz (então associada a soluções ondulatórias das equações de Maxwell) como *partículas*, ou “quanta de luz”. Este outro enfoque foi desenvolvido por de Broglie e Schrödinger, se relaciona diretamente com os fenômenos de interferência de “ondas de matéria” (hoje associados, por exemplo, às bem conhecidas técnicas de difração de neutrons, elétrons, etc.) e é tido geralmente como algo mais palatável que os métodos algébricos desenvolvidos pouco antes por Heisenberg². Dentro do ponto de vista ondulatório, o ingrediente básico através do qual aparecem os fenômenos de interferência na mecânica quântica é a descrição do estado de uma partícula quântica através de uma onda (em geral complexa) e a possibilidade de realizar estados cuja representação é dada como a superposição (no sentido de soma) de várias ondas, cuja “intensidade” (relacionada com o quadrado do módulo *da soma*) representa uma distribuição de probabilidade de coisas diretamente observáveis, como a posição da partícula.

Isso é talvez melhor explicado através de um exemplo simples: o estado de uma partícula livre (por simplicidade em uma dimensão apenas) com momento $p = \hbar k$ (\hbar tem dimensões de momento vezes comprimento, de modo que k tem dimensões de inverso de comprimento) é representado pela onda plana (que é, no caso, o que se chama função de onda da partícula)

¹[http : //cua.mit.edu/ketterle_group/Introduction_to_BEC/htm](http://cua.mit.edu/ketterle_group/Introduction_to_BEC/htm)

²Essas formulações e contra-formulações aparentemente desencontradas e conflitantes estão na realidade associadas com o fato de o comportamento quântico tanto da luz como do que chamamos partículas é tal que não é possível declarar qualquer uma das duas classes de objetos como sendo ondas ou corpúsculos. V. e.g. a primeira aula do terceiro volume das *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley 1965.

$$\phi_p(x) = Ae^{ikx}$$

onde A é uma constante, de modo que o quadrado de seu módulo $|\phi_p(x)|^2 = |A|^2$ é independente de x . Isso significa que é igualmente provável encontrar a partícula que está nesse estado em qualquer posição x . Isso é muitas vezes expresso dizendo que nesse estado a partícula está “completamente deslocalizada”.

Em seguida, usando a possibilidade de superpor estados (ou funções de onda) para criar novos estados (ou novas funções de onda) o estado da partícula pode tomado como sendo dado pela superposição (isto é, a soma) de dois estados com momentos diferentes, $p_1 = \hbar k_1$ e $p_2 = \hbar k_2$, isto é, algo como a função de onda com duas componentes

$$\phi_{p_1, p_2}(x) = A' (e^{ik_1 x} + e^{ik_2 x}) \quad (3.1)$$

onde A' é também uma constante. Note que esse é o estado de *uma única* partícula. O quadrado do módulo desse estado mais complicado é

$$|\phi_{p_1, p_2}(x)|^2 = |A'|^2 [2 + 2 \cos(k_1 - k_2)x] = 4|A'|^2 \cos^2 \frac{(k_1 - k_2)x}{2} \quad (3.2)$$

e já não é independente de x , significando que será mais provável encontrar a partícula em algumas posições (no caso, nas vizinhanças dos pontos $x = 2n\pi/|k_1 - k_2|$ com n inteiro, em que o cosseno quadrado é máximo) e menos provável encontrá-la em outras (nas vizinhanças de $x = (2n + 1)\pi/|k_1 - k_2|$, em que o cosseno quadrado é mínimo). A distância entre dois máximos ou dois mínimos consecutivos é

$$\frac{2\pi}{|k_1 - k_2|} = \frac{2\pi\hbar}{|p_1 - p_2|} = \lambda_{\Delta p}^{(\text{de Br})},$$

que é o comprimento de onda de de Broglie associado à diferença dos dois momentos. A dependência de x resultou dos termos cruzados ao se tomar o quadrado do módulo da soma, também chamados “termos de interferência”. Como os dois termos da soma são componentes do estado (ou da função de onda) da mesma e única partícula, essa interferência é algumas vezes descrita como sendo “da partícula consigo mesma”. Esse tipo de interferência é absolutamente geral e corriqueiro na vida de uma partícula quântica, e decorre da própria formulação da teoria, quando permite a superposição (soma) de estados que funcionam como *amplitudes*, cujos módulos quadrados é que se relacionam com o que é afinal observado. Isto é, por certo, extremamente peculiar em termos de qualquer tipo de “intuição clássica”, ou “senso comum”. Já no último exemplo, o momento da partícula não tem um valor definido, sendo p_1 e *também*

p_2 , uma situação que produz avalanches de pensamento levando a idéias como a do gato de Schrödinger, por exemplo.

Finalmente, vale enfatizar que o que é predito pela teoria quântica nos exemplos precedentes é apenas a probabilidade de que a partícula seja encontrada em diferentes posições. A forma (ideal) de verificar essa predição é efetuar medidas de posição em um número muito grande de réplicas iguais do sistema (no caso, de uma só partícula, mas no estado apropriado) e em seguida verificar se o comportamento estatístico dos resultados se conforma com a predição. Portanto, a possibilidade prática de verificar a predição depende da possibilidade prática de efetivamente poder reproduzir o sistema em número em com fidelidade suficientes.

3.1 Tipos de interferência com muitos bosons idênticos.

Do caso mais simples de uma única partícula, passamos agora ao caso mais interessante de vários bosons idênticos. Os bosons de interesse aqui são átomos bosônicos, isto é átomos cujo momento angular quântico total (em unidades de \hbar) é inteiro. Os exemplos mais utilizados experimentalmente são os átomos de metais alcalinos, notadamente ${}^7\text{Li}$, ${}^{23}\text{Na}$ e ${}^{87}\text{Rb}$. O que pode tornar o momento angular total do átomo um número semi-inteiro é o spin semi-inteiro ($1/2$) dos férmions que os constituem, prótons, neutrons e elétrons. Os “números de massa” indicados nos átomos citados correspondem ao número de nucleons núcleo (número de prótons mais número de neutrons). Nos três casos esse número é ímpar, o que diz que o momento angular total do núcleo é semi-inteiro. O número de protons para esses átomos é no entanto respectivamente 3, 11 e 37, e para que o átomo seja neutro é preciso que ele contenha um número igual (e portanto também ímpar nos três casos) de elétrons. Cada um dos três átomos contém, portanto, um número *par* de férmions de spin $1/2$ (protons, neutrons e elétrons sendo contados), o que faz com que, embora montado de partes semi-inteiras, o momento angular total atômico seja inteiro. Isso é suficiente para que eles tenham um caráter bosônico. Além disso, sempre que em condições tais que não haja energia suficiente para mexer com a dinâmica interna dos átomos (como efetivamente ocorre nos condensados atômicos), os átomos podem ser tratados como bosons “elementares”.

Em termos de funções de onda, o que caracteriza um conjunto de bosons idênticos é o fato de que a função de onda que representa qualquer estado acessível ao conjunto deve ser *simétrica* em todos os bosons. Isto significa que uma permutação qualquer de variáveis que se referem a diferentes bosons não pode alterar o valor da função de onda. Como será discutido mais adiante, esta condição em geral implica na existência de correlações entre os bosons mesmo que eles não interajam entre si. Como as correlações entre bosons devida a interações entre eles foram chamadas “correlações dinâmicas”, é conveniente distinguir este outro tipo de correlações, proveniente unicamente da condição geral de simetria, como “correlações cinemáticas”.

Passamos então a considerar especificamente as formas mais simples de representar os estados de condensados atômicos, com o intuito de poder entender algo a respeito de superposições e efeitos de interferência neste caso. A imagem mais simples que se pode fazer de um condensado atômico de Bose-Einstein “puro”, isto é, bem descrito numa aproximação de campo médio e à temperatura zero (em termos práticos, isto significa a uma temperatura muito menor que a temperatura T_c^0 definida em (1.11), por exemplo) é a de que todas as partículas (no caso, os átomos bosônicos) tem seu estado descrito por uma *mesma* função de onda $\phi(\vec{r})$. Uma diferença importante com a situação anterior é que agora existe não apenas uma partícula, mas um grande número delas. Isso significa, entre outras coisas, que há muito mais coisas (por exemplo, posições de partículas) que podem ser observadas em *uma única* cópia do sistema.

O estado do condensado puro, com o estado de cada um dos N bosons descrito pela mesma função de onda $\phi(\vec{r})$ é descrito por uma função de onda dependente de N posições, que é dada pelo *produto* das funções de onda de cada um dos bosons. Chamando $\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ essa grande função de onda, ela se escreve então como

$$\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{j=1}^N \phi(\vec{r}_j). \quad (3.3)$$

Para ter uma idéia de que esta é a precrição correta pode-se notar, em primeiro lugar, que ela é simétrica como devido, pois uma permutação qualquer dos \vec{r}_j não tem qualquer efeito sobre $\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. Além disso, o quadrado do módulo dessa grande função de onda é

$$|\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 = \prod_{j=1}^N |\phi(\vec{r}_j)|^2$$

e essa função de N posições deve corresponder à distribuição *conjunta* de probabilidade de localização dos bosons em $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$. Mas cada um dos fatores $|\phi(\vec{r}_j)|^2$ dá a distribuição de probabilidade que descreve a posição de *um* boson em \vec{r}_j , de modo que a distribuição conjunta é dada neste caso como o *produto* de N distribuições de um boson. Essa forma da distribuição conjunta significa que as distribuições de um boson que a constituem são na realidade independentes, isto é, não há correlações de qualquer tipo entre os bosons de um condensado puro descrito por uma função de onda do tipo (3.3). A condição de normalização (2.2) sobre $\phi(\vec{r})$ garante a normalização tanto da distribuição de probabilidade associada a cada boson como à distribuição de probabilidade conjunta.

Sem considerar, por enquanto, os aspectos práticos da questão, podemos agora supor que a função de onda $\phi(\vec{r})$ comum a cada um dos bosons do condensado puro seja manipulada de modo que se transforme na superposição (no sentido de soma) de duas outras funções de onda, exatamente como foi feito no caso de uma única partícula na seção anterior. Uma das superposições interessantes é a que é representada por

$$\phi(\vec{r}) \longrightarrow A'\phi(\vec{r}) (1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}) \quad (3.4)$$

onde A' é uma constante que garante a normalização da nova função de onda de um boson. O fator entre parênteses nada mais é que uma versão tri-dimensional da função de onda com dois momentos (3.1), e a superposição escrita em (3.4) pode ser interpretada como uma superposição da função de onda original $\phi(\vec{r})$, que tem momento médio zero, com $\phi(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, que corresponde a ela mesma animada de um momento médio agora não nulo, dado por $\hbar\vec{k}$. A nova grande função de onda de condensado puro é então escrita exatamente como em (3.3), mas substituindo as funções de onda $\phi(\vec{r})$ de acordo com a última expressão. A distribuição de probabilidade conjunta será novamente o produto de N distribuições, uma para cada um dos bosons, cada uma das quais é agora dada por

$$|A'\phi(\vec{r}) (1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}})|^2 = 4|A'|^2|\phi(\vec{r})|^2 \cos^2 \frac{\vec{k}\cdot\vec{r}}{2} \quad (3.5)$$

que consiste da distribuição espacial associada ao quadrado do módulo de $\phi(\vec{r})$ modificada por um fator que contém efeitos de interferência, com linhas de máximos perpendiculares ao momento $\hbar\vec{k}$ que distam cada um do seguinte do comprimento de onda de de Broglie associada a esse momento. Portanto, se a modificação afeta igualmente as funções de onda de cada um dos bosons, o condensado como um todo mostrará efeitos de interferência desse mesmo tipo. Como o mecanismo que produz a interferência não depende essencialmente de que o condensado contenha um grande número de partículas é conveniente rotulá-lo como *interferência de uma partícula*, ou *interferência de um corpo*.

Esse tipo de interferência nada mais é, portanto que uma reiteração, para cada um dos N bosons idênticos do condensado puro, do que já foi discutido para o caso de uma única partícula. Caso um estado deste tipo possa efetivamente ser realizado com N suficientemente grande, a verificação da predição estatística da teoria quântica pode ser feita (idealmente) medindo a posição *de cada um dos bosons* em uma única cópia do condensado puro. Em outras palavras, a densidade de partículas no condensado puro deve ser modulada da forma prescrita pela distribuição de probabilidade associada a um boson, (3.5).

Este não é, no entanto, o único tipo de interferência que se pode ter em um sistema de muitos bosons. Mesmo dentro dos limites de uma descrição de campo médio, existem efeitos ligados às correlações cinemáticas associadas à exigência de simetria da grande função de onda, sempre que os bosons possam ocupar diferentes estados de uma partícula.

Para expor o mecanismo básico deste outro tipo de interferência, é conveniente retroceder por um momento para o caso $N = 2$, isto é, dois bosons idênticos, apenas, ocupando estados de uma partícula *diferentes*. Além disso, para evitar complicações técnicas, é conveniente tomar esses estados como sendo dois estados de momento bem definido, e em uma única dimensão

$$\phi_{p_1}(x) = A_1 e^{ik_1 x} \quad \text{e} \quad \phi_{p_2}(x) = A_2 e^{ik_2 x}.$$

Se a grande função de onda correspondente é escrita simplesmente na forma (3.3), isto é

$$\Phi_{ns}(x_1, x_2) = A_1 A_2 e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2}$$

ela deixa de satisfazer a condição de simetria, porque desse modo $\Phi_{ns}(x_1, x_2) \neq \Phi_{ns}(x_2, x_1)$. Para garantir que essa condição esteja satisfeita é preciso agora escrever a grande função de onda como

$$\Phi(x_1, x_2) = \frac{A_1 A_2}{\sqrt{2}} \left(e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right)$$

Esta forma difere da anterior por ter sido explicitamente simetrizada nas variáveis dos dois bosons, com o fator adicional de $1/\sqrt{2}$ para preservar a normalização de $\Phi(x_1, x_2)$, que agora é dada como a soma de dois termos. A simetrização é necessária neste caso porque os bosons ocupam estados diferentes, e a simetrização garante a perfeita identidade deles, no sentido que torna impossível identifica-los em termos do estado de uma partícula que ocupam.

Cabe então calcular a distribuição conjunta de probabilidade para os dois bosons neste estado. Um cálculo simples mostra que ela é dada por

$$|\Phi(x_1, x_2)|^2 = 4 \frac{|A_1 A_2|^2}{2} \cos^2 \frac{(k_1 - k_2)(x_1 - x_2)}{2}.$$

Esse resultado tem uma certa semelhança com o que aparece na equação (3.2), mas enquanto ali a distribuição de probabilidade para *uma* partícula depende de sua posição x , aqui é a *distribuição conjunta* de probabilidade para os dois bosons que depende *de sua posição relativa* ($x_1 - x_2$). A distribuição de probabilidade para um único boson pode ser obtida, neste caso, a partir da distribuição conjunta fixando uma das variáveis em x e integrando sobre todos os valores da outra variável (digamos x_2 , embora não importe qual devido à simetria do estado). O resultado é independente de x , portanto cada um dos bosons, tomado individualmente, está completamente deslocalizado! No entanto a simetrização introduz correlações tais entre as posições de ambos que a probabilidade conjunta mostra agora máximos e mínimos *na distância relativa entre eles*. Novamente a separação entre máximos e mínimos consecutivos é dada pelo comprimento de onda de de Broglie, associado agora ao *momento relativo* $|k_1 - k_2|$ entre os estados ocupados pelos bosons. O significado desses resultados é o seguinte: uma medida de posição de um dos bosons apenas tem probabilidades iguais de fornecer qualquer valor, digamos x_1 . Uma vez obtido esse valor, no entanto, a probabilidade de que o segundo boson

seja encontrado em x_2 depende da distância desse ponto ao valor x_1 obtido para o primeiro boson conforme prescito pela probabilidade conjunta. As correlações (que neste caso são apenas as correlações cinemáticas) tornam *não independentes* as distribuições de cada boson, considerado individualmente.

Novamente aqui, a forma ideal de verificar essa predição estatística da teoria quântica envolve efetuar medidas das duas posições em um número muito grande de réplicas iguais do sistema de dois bosons, e em seguida verificar se o comportamento estatístico dos resultados corresponde ao previsto.

Resta agora ver as implicações disso para situações envolvendo condensados atômicos com muitos bosons. A situação que mais se aproxima do caso simples de apenas dois bosons, envolve dois condensados puros (no sentido que em cada um deles todos os bosons vivem na mesma função de onda de uma partícula), espacialmente superpostos, cada um contendo $N/2$ bosons, e produzidos de forma tal que a função de onda ocupada em um deles difira da que é ocupada no outro por um momento relativo $\hbar\vec{k}$. Mais especificamente, chamando uma dessas funções de onda de um boson de $\phi(\vec{r})$, a outra será $\phi(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Deixando, por simplicidade, de escrever explicitamente constantes de normalização, a versão não simetrizada da grande função de onda para os dois condensados será

$$\Phi_{ns}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N/2}, \vec{r}_{N/2+1}, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{j=1}^{N/2} \phi(\vec{r}_j) \prod_{l=N/2+1}^N \phi(\vec{r}_l) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_l}.$$

Esta grande função de onda não é no entanto aceitável, por não ser completamente simétrica com relação a permutações das variáveis dos bosons, e é portanto preciso substitui-la pela sua forma simetrizada, como no caso de apenas dois bosons. O número de permutações distintas que é necessário levar em conta para isso é dado por $N!/[(N/2)!(N/2)!]$, que se reduz de fato a 2 no caso $N = 2$, mas que aqui é supostamente um número enorme³. Como a grande função de onda simetrizada não pode ser escrita explicitamente, vamos representa-la simbolicamente como

$$\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N/2}, \vec{r}_{N/2+1}, \dots, \vec{r}_N) = \mathcal{S} \left[\prod_{j=1}^{N/2} \phi(\vec{r}_j) \prod_{l=N/2+1}^N \phi(\vec{r}_l) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_l} \right]$$

onde \mathcal{S} representa o processo de simetrização e normalização. O que resulta disso é uma grande função de onda com correlações cinemáticas complicadas. Essas correlações foram explicitadas

³Esse número é o número de permutações das N posições, dividido pelo número de permutações dentro de cada um dos grupos de $N/2$ bosons que têm a mesma função de onda, os quais que já são simétricos de partida. Ele vale 6 para $N=4$, 36 para $N=10$, etc.

em um caso unidimensional por Javanainen e Yoo em 1996⁴. As expressões resultantes não são esclarecedoras em si mesmas, mas mostram qualitativamente que i) cada um dos bosons, considerado individualmente, é completamente deslocalizado, como no caso de dois bosons apenas; ii) dada a posição de um primeiro boson, a distribuição de um segundo boson depende da posição obtida para o primeiro; iii) esse resultado se estende para mais bosons de modo que a distribuição do m -ésimo boson depende das posições dos $(m - 1)$ anteriores. Uma simulação numérica da medida de posição de todos os bosons do condensado duplo (com $N = 1000$), feita também por Javanainen e Yoo tendo na devida conta as correlações cinemáticas, leva a uma distribuição de posições com máximos e mínimos consecutivos separados pelo comprimento de onda de de Broglie associado ao momento relativo entre as duas funções de onda de uma partícula, como no caso de dois bosons apenas, e também como no caso da interferência de um corpo! Aqui também a medida da posição de *todos* os muitos bosons do condensado duplo dispensa a replicação múltipla do sistema para obter os efeitos da distribuição conjunta.

Uma característica adicional importante deste tipo de sistema é a de que *a posição* dos máximos e mínimos varia aleatoriamente de uma simulação para outra (e portanto, supostamente deve variar também de uma para outra réplica do sistema)⁵. Em outras palavras, o que se obtém é sempre uma distribuição de pontos com densidade oscilatória, com período de oscilação dado pelo comprimento de onda de de Broglie, mas com uma *fase* que é “a priori” aleatória. A razão para isso pode ser vista na deslocalização completa dos bosons, quando considerados individualmente. Devido a essa deslocalização, a posição do primeiro boson em uma dada simulação pode ser qualquer, e com a mesma probabilidade. As posições seguintes (e já a partir da segunda), no entanto, são condicionadas pelas que foram obtidas anteriormente. A fase das oscilações é gerada pelas correlações cinemáticas *a partir de* uma posição inicial determinada a partir de uma distribuição de probabilidades uniforme, donde o seu caráter aleatório.

O que se pode apreender desse resultados é que a distinção entre este tipo de interferência “de muitos corpos” e o tipo, visitado anteriormente, de interferência de um corpo, não pode ser feita unicamente em termos da distribuição observada de máximos e mínimos nos dois casos. Em termos teóricos, existe a diferença importante que a posição de um boson, considerado individualmente, é condicionada no caso da interferência de um corpo, mas não no caso da de muitos corpos. Essa diferença, no entanto, parece não poder ser imediatamente traduzida em termos de algum critério experimental simples.

⁴J. Javanainen e S. M. Yoo, Phys. Rev. Lett. **76**, 161 (1996).

⁵Pode-se conseguir um deslocamento da figura de interferência de um corpo resultante de (3.4) simplesmente alterando a fase relativa dos dois termos do lado direito dessa relação. Uma alteração correspondente em $\phi_{p_1}(x)$ e/ou $\phi_{p_2}(x)$, no caso da interferência associada a correlações cinemáticas, não produz porém qualquer efeito nas probabilidades conjuntas e portanto tão pouco na distribuição de uma partícula que resulta delas.

3.2 Alguns resultados experimentais.

Os resultados experimentais relativos a fenômenos de interferência em condensados atômicos de Bose-Einstein são numerosíssimos e ainda em processo de franco crescimento, sobretudo a partir do fato de que tais fenômenos estão fortemente ligados a duas utopias técnicas - o “laser de átomos” e o “computador quântico” - e a partir do momento em que elas já não são consideradas como puramente utópicas. Como não cabe aqui sequer mencioná-los todos, o que segue é apenas uma pequena seleção de casos para os quais as idéias discutidas até aqui parecem ser relevantes. Em cada caso, o texto é apenas um guia para interpretar o conteúdo dos trabalhos citados, e referências são feitas a figuras e equações que aparecem neles.

1) M. Kozuma et al., Phys. Rev. Lett. **82**, 871 (1999);
J. E. Simsarian et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 2040 (2000).

O primeiro desses dois trabalhos tem um caráter de certa forma instrumental para o segundo. A figura 1 deste trabalho é útil para esclarecer o que é chamado interferência de Bragg de ordem n : existem dois lasers estimuladores, com frequências ω e $\omega' < \omega$ respectivamente, e $\delta \equiv \omega - \omega'$. Os feixes fazem entre si um ângulo θ , próximo de 180° , como mostrado na figura 1(a). Quando um fóton de frequência ω é absorvido e em seguida é emitido um fóton de frequência ω' , o sistema que faz isso (digamos, um átomo) ganha energia $\hbar\delta$ e momento $(\hbar/c)(\omega + \omega')\sin\theta/2 \simeq 2(\hbar/c)\delta \sin\theta/2$. A *condição de Bragg de ordem n* está satisfeita quando a energia recebida em n etapas desse tipo coincide com a energia cinética do átomo associada ao momento recebido nas mesmas n etapas, isto é

$$n\hbar\delta = \frac{P_n^2}{2M} \quad \text{com} \quad P_n = 2n\frac{\hbar}{c}\delta \sin\theta/2$$

Nessas condições, tudo se passa como se o estado inicial de momento do átomo (digamos, de momento zero, ϕ_0) estivesse acoplado com o estado cujo momento coincide com o da condição de Bragg que esteja satisfeita, ϕ_{P_n} . Esse acoplamento faz com que o estado inicial se transforme gradualmente no outro, e vice versa, de acordo com as equações de movimento quânticas *efetivas*

$$i\hbar\dot{a}(t) = G_n b(t); \quad i\hbar\dot{b}(t) = G_n a(t) \quad (3.6)$$

onde G_n é um acoplamento efetivo entre os dois estados e onde o estado do átomo dependente do tempo foi tomado como tendo sido representado como

$$\phi(t) = a(t)\phi_0 + b(t)\phi_{P_n}, \quad \text{com} \quad a(0) = 1, \quad b(0) = 0.$$

A solução das equações (3.6) com a condição inicial dada é simplesmente

$$a(t) = \cos\left(\frac{G_n t}{\hbar}\right), \quad b(t) = -i \operatorname{sen}\left(\frac{G_n t}{\hbar}\right)$$

(note que $|a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1$), de modo que o estado de momento zero e o de momento P_n ficam se transformando um no outro enquanto os lasers estimuladores estiverem ativos. Interrompendo a sua atividade em um tempo t_n tal que $G_n t_n / \hbar = \pi/4$ o estado resultante do suposto átomo será

$$\phi(t_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_0 - i\phi_{P_n}),$$

que é um estado do tipo considerado em (3.4). Para decidir se o que se consegue dessa forma corresponde a interferência de um corpo, ou a algo parecido com a interferência devida a correlações cinemáticas é preciso decidir se, nas condições experimentais, esse tipo de transformação afeta o estado de *todos* os bosons simultaneamente ou se afeta apenas uma parte deles!

Outros trabalhos relacionados com estes: J. Denschlag et al, Science **287**, 97 (2000); M. Kozuma et al., Science **286**, 2309 (1999).

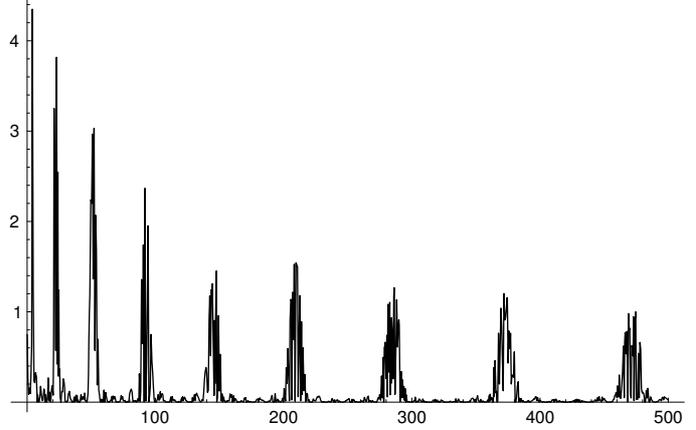
2) M. R. Andrews et al., Science **275**, 637 (1997).

Este é um trabalho muito famoso no qual figuras de interferência entre as duas partes de um condensado, depois de ele ter sido cortado em duas partes por uma “faca óptica” e de as duas partes terem se expandido até que se superpusessem novamente (v. figura 4 do trabalho). Provavelmente o caso mais claro de interferência de muitos corpos? Na região de superposição em que é observada a interferência os átomos de cada uma das partes em que o condensado foi cortado se expandem a partir de centros diferentes, e portanto adquirem momentos quase opostos. Mas é preciso pensar em cada átomo como estando em uma ou outra das duas metades. Interferência de um corpo corresponderia a todos os átomos estarem completamente deslocalizados na extensão total das duas partes! (Isso *não é impossível*, em princípio, segundo os esquemas de teoria quântica).

3) B. P. Anderson e M. A. Kasevich, Science **282**, 1686 (1998).

Um caso intrigante de interferência dos vazamentos em queda livre de vários pedaços de um condensado inicial cortado em fatias finas. Interferência de um corpo em se tratando de uma caso de deslocalização completa cobrindo agora um grande número (o trabalho diz cerca de 30) pedaços espacialmente disjuntos, e seus vazamentos, de muitos corpos em caso contrário?

Figura 3.1: Intensidade $I(q)$ (em unidades arbitrárias) obtidas a partir da expressão (3.7) com os parâmetros numéricos citados no texto e com $n = 6$. A escala das abcissas é dada em μm .



O resultado mostrado nas figuras 4 E e F do trabalho podem ser reproduzidos em termos de um modelo bastante simples superpondo n amplitudes que representam ondas de de Broglie em queda livre, originadas de fontes coerentes separadas em altura por uma distância q_0 , e calculadas usando a aproximação WKB. Orientando o eixo de queda livre q de cima para baixo, e colocando as fontes em posições $q = 0, q = -q_0, \dots, q = -(n-1)q_0$ o vetor de onda local $k(q)$ é dado dessa forma, para a fonte localizada em $q = -jq_0$, por

$$k_j(q) = \sqrt{\frac{2M^2g}{\hbar^2}(q + jq_0)}$$

o que leva à fase em q

$$\varphi_j(q) = \int_{-jq_0}^q k(q')dq' = \int_{-jq_0}^q \frac{M}{\hbar} \sqrt{2g(q' + jq_0)} dq' = \frac{2}{3} \frac{M}{\hbar} \sqrt{2g} (q + jq_0)^{3/2}.$$

Uma amplitude WKB correspondente à j -ésima fonte é então

$$\sqrt{\frac{2\pi}{k_j(q)}} \text{sen } \varphi_j(q),$$

onde o primeiro fator dá conta da velocidade variável na queda livre, e o resultado da interferência de n ondas desse tipo originadas nas n diferentes fontes é a distribuição de “intensidade”

$$I(q) = \left(\sum_{j=0}^{n-1} \sqrt{\frac{2\pi}{k_j(q)}} \text{sen } \varphi_j(q) \right)^2. \quad (3.7)$$

Os números dados no trabalho de Anderson e Kaevich correspondem a $q_0 = .425 \mu m$ (o comprimento de onda da onda estacionária que fragmenta o condensado sendo $.850 \mu m$) e

$$\frac{2}{3} \frac{M}{\hbar} \sqrt{2g} q_0^{3/2} = 1.130.$$

Usando esses números com $n = 6$ resulta a distribuição mostrada na figura 3.1. É curioso observar que, embora reproduzindo a “estrutura grossa” observada, esse resultado sugere a existências de estrutura adicional em uma escala muito mais fina de distâncias, bem como vários pequenos máximos secundários entre os picos principais.