UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

Condensados em Redes Ópticas Periódicas

Eduardo Toshio Domingues Matsushita

Orientador: **Prof.º Dr. Emerson José Veloso de Passos**

Comissão Examinadora

Prof.º Dr. Emerson José Veloso de Passos (IFUSP)

Prof.º Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP)

Prof.º Dr. Tobias Frederico (ITA)

*Dissertação apresentada
ao Instituto de Física da
Universidade de São Paulo
para a obtenção do título
de Mestre em Ciências*

São Paulo – SP

2007

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos pela paciência, pelas boas idéias e pelas soluções sem as quais seria impossível realizar esse trabalho.

Agradeço a toda minha família, em especial, a minha mãe, Maria Domingues Araújo Matsushita e aos meus irmãos, Elenio Araújo Andrade e Nala Maria Matsushita, pelo apoio e incentivo que me deram para seguir nessa carreira de físico.

Agradeço aos meus grandes amigos pessoais, Elisa Ferreira, Wilson Façanha, Thiago e Samantha Scataglia, Fernando Ferreira, Felipe Mavichian, Grazielle Santana, Pedro Tavares, Bruno Amado, Felipe Prado, Karina Neves, Andréa Malafati, Rauflin Carloto e aos colegas de banda por entenderem o meu afastamento e a minha indisponibilidade de horário.

Finalmente agradeço à FAPESP pelo apoio financeiro que possibilitou a realização desse trabalho.

Resumo

Utilizamos o modelo de Bose-Hubbard para estudar as estabilidades dinâmica e termodinâmica dos condensados numa rede óptica periódica circular. O nosso principal objetivo foi investigar a existência de condensados metaestáveis no sistema. Deduzimos e resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii e, a partir da análise das soluções, foi possível mostrar que o sistema se condensa em estados com momento modular bem definido. Esses estados formam uma base que diagonaliza o termo que descreve o tunelamento atômico no hamiltoniano de Bose-Hubbard. No contexto da teoria de Bogoliubov deduzimos para cada condensado, o hamiltoniano efetivo cuja diagonalização determina o espectro das excitações coletivas do sistema. Identificamos corretamente o modo de energia zero, consequência da violação da conservação do número de átomos, e verificamos que este possui momento modular igual ao do condensado. No estudo da estabilidade vimos que todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são termodinamicamente instáveis e as respectivas condições de estabilidade dinâmica dependem dos parâmetros de controle do sistema. Por outro lado os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes são todos dinamicamente estáveis enquanto que, nesse caso, é a estabilidade termodinâmica que depende dos parâmetros de controle do sistema. Nessa análise verificamos que o condensado com momento modular $q = 0$, que corresponde ao mínimo global da energia, é sempre estável. Determinamos exatamente o intervalo nos parâmetros de controle a partir do qual podemos encontrar condensados metaestáveis no sistema. Examinamos como a competição entre as intensidades dos termos de tunelamento e repulsão local afeta a estabilidade dos condensados. Essa competição define dois regimes distintos: Rabi, onde a coerência entre estados localizados nos sítios é mantida, e Fock, onde não há mais essa coerência e a aplicabilidade da aproximação de Bogoliubov é questionável.

Abstract

We use the Bose-Hubbard model to study the dynamical and thermodynamical stabilities of condensates in a circular periodic optical lattice. Our main goal was to investigate the existence of metastable condensates in the system. We derive and solve the Gross-Pitaevskii equation, and from the analysis of the solutions it was possible to show that the system condenses in states with well-defined modular momentum. These states constitute a basis that diagonalizes the term of the Bose-Hubbard Hamiltonian which describes the dynamics of atomic tunneling. In the framework of Bogoliubov theory we determine, for each condensate, the effective Hamiltonian whose diagonalization give us the collective excitation spectrum of the system. We show that the mode associated to a zero eigenvalue, which is a consequence of the violation of atoms number conservation, has the same modular momentum of the condensate. The condensates with modular momentum in the 2nd and 3rd quadrants are all thermodynamically unstable whereas the dynamical stability depends on the control parameters. On the other hand, the condensates with modular momentum in the 1st and 4th quadrants are all dynamically stable whereas the thermodynamical stability depends on the control parameters. Our analysis shows that the condensate with modular momentum $q = 0$, which corresponds to a global minimum of energy, is always stable independently of the control parameters. We determine, exactly, the range on the control parameters where it is possible to detect metastability in the system. We have studied how the competition between the intensities of the tunneling and local interaction terms affects the stability of the condensates. This competition defines two distinct regimes: Rabi, where the coherence between states localized in the sites is achieved, and Fock, where this coherence is not achieved and the validity of Bogoliubov approximation is questionable.

Conteúdo

Capítulo 1 - Introdução.....	7
 Capítulo 2 – O modelo de Bose-Hubbard, o momento modular e os condensados do sistema	13
2.1. O hamiltoniano de Bose-Hubbard	13
2.2. Diagonalização do termo de tunelamento e a representação do momento modular.....	16
2.3. A equação de Gross-Pitaevskii e os condensados.....	20
 Capítulo 3 – A aproximação de Bogoliubov e o hamiltoniano grande-canônico efetivo	25
3.1. O hamiltoniano grande-canônico do sistema	25
3.2. A aproximação de Bogoliubov e o hamiltoniano grande-canônico efetivo	28
3.3. O acoplamento de momentos modulares no hamiltoniano efetivo	29
3.4. Determinação dos pares de momentos modulares que são acoplados nos casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$	31
3.5. Determinação dos pares de momentos modulares que são acoplados no caso $q \neq 0, \frac{M}{2}$	33
3.6. A estrutura em blocos do hamiltoniano grande-canônico efetivo.	46

Capítulo 4 – O espectro das excitações coletivas.....	49
4.1. Os ramos energéticos do espectro das excitações coletivas do sistema.	49
4.2. O espectro das excitações coletivas para os casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$	50
4.3. O espectro das excitações coletivas para o caso geral onde $q \neq 0, \frac{M}{2}$	60
 Capítulo 5 – A estabilidade dos condensados.....	 66
5.1. Estabilidade dinâmica dos condensados.	67
5.2. Estabilidade termodinâmica dos condensados.....	85
 Capítulo 6 – Os condensados metaestáveis e a estabilidade nos regimes de Rabi e de Fock.....	 106
6.1. Os condensados metaestáveis do sistema.	107
6.2. A estabilidade dinâmica dos condensados nos regimes de Rabi e de Fock....	115
 Capítulo 7 - Conclusão.....	 126
 Apêndice.....	 133
A. Os condensados com momento modular $q = \pm \frac{M}{4}$	133
B. A transformação de Bogoliubov que diagonaliza o hamiltoniano efetivo.	136
C. Cálculo da flutuação do número de átomos em cada sítio da rede óptica: caso $q = 0$	141

D. Comportamento assintótico das razões críticas $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ no limite $M \gg 1$ com $n \equiv \frac{N}{M}$ fixo.	147
Referências	150

Capítulo 1

Introdução

A possibilidade de se estudar experimentalmente as propriedades de gases atômicos quânticos ultrafrios em potenciais periódicos criados pela interferência de dois feixes de laser, as chamadas redes ópticas [1-3], impulsionou uma explosão na produção de trabalhos científicos, tanto a nível experimental quanto teórico. Esses sistemas têm se mostrado, nos últimos anos, um campo muito rico para a investigação das aplicações e dos aspectos fundamentais da mecânica quântica e, em especial, das teorias de muitos corpos.

Recentemente observou-se experimentalmente uma transição de fase quântica de uma fase superfluida para uma fase isolante de Mott em átomos bosônicos confinados numa rede óptica periódica [4,5]. As manifestações físicas das flutuações quânticas, relevantes no sistema a uma temperatura igual ao zero absoluto, são determinadas pela competição entre a energia cinética associada com o tunelamento entre os sítios da rede e a energia de interação no sítio resultante da repulsão átomo-átomo.

Na fase superfluida os átomos ocupam todos o mesmo estado. Esse estado não é localizado e existe uma coerência de longo alcance entre as fases dos estados localizados nos sítios da rede. Essa fase superfluida ocorre quando a interação repulsiva átomo-átomo é desprezível comparada ao termo de tunelamento entre

sítios vizinhos. No limite oposto, quando a interação repulsiva átomo-átomo é dominante, os átomos ocupam estados localizados em cada sítio e não existe mais a coerência entre as fases desses estados. Esse estado caracteriza a fase isolante de Mott.

A física do sistema descrito acima é capturada pelo modelo de Bose-Hubbard [6-8], que descreve a dinâmica de um gás de bósons interagentes num potencial de rede óptica. Segundo esse modelo, os átomos passam de um sítio ao outro da rede pelo tunelamento através das barreiras do potencial óptico que define os sítios. A interação repulsiva é local, ou seja, a repulsão átomo-átomo ocorre exclusivamente nos sítios da rede. O modelo de Hubbard foi originalmente introduzido, na física do estado sólido, para descrever de modo aproximado o efeito das correlações dos elétrons d em metais de transição do grupo do ferro [9].

Em geral os condensados produzidos experimentalmente são sistemas confinados, diluídos e fracamente interagentes de gases de átomos bosônicos em regime ultrafrio, ou seja, a temperatura é tão baixa que pode ser considerada como praticamente nula. Gases com essas propriedades podem ser descritos pela teoria de Bogoliubov [10] onde supomos que todos os átomos ocupam o mesmo estado, denominado de função de onda do condensado. Nessa teoria a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo [11] determina os estados de equilíbrio [12]. A dinâmica do sistema é dada pela equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo [13] e sua linearização em torno do estado fundamental descreve as excitações

coletivas de baixa energia [14] e correspondem as equações de Bogoliubov-de Gennes generalizadas para sistemas confinados.

Apresentamos nessa dissertação um estudo das propriedades dos condensados numa rede óptica topologicamente restrita a uma configuração anelar. Nesse estudo supomos que a dinâmica do sistema é descrita pelo modelo de Bose-Hubbard e, no contexto da teoria de Bogoliubov, determinamos os condensados, as excitações coletivas e as respectivas condições de estabilidade. O nosso principal objetivo foi investigar a existência de condensados metaestáveis no sistema. Os condensados metaestáveis são mínimos locais da energia e candidatos a exibirem o fenômeno da superfluidez. De acordo com a referência [15], esses estados de equilíbrio correspondem a condensados excitados.

Muitos autores utilizaram a teoria de Bogoliubov para descrever as propriedades de condensados em redes ópticas [16-19]. A referência [19], em particular, faz um estudo análogo ao realizado nessa dissertação. Entretanto, em vários aspectos importantes, o nosso trabalho se diferencia do estudo feito nessa referência. Basicamente o que faz a diferença é a introdução de uma base de estados com momento modular bem definido [20] que diagonaliza o termo que descreve o tunelamento atômico no hamiltoniano de Bose-Hubbard. Essa representação revela um quadro transparente acerca das propriedades dos condensados e das excitações coletivas. Podemos citar aqui alguns fatos que ilustram essa transparência. Por exemplo, resolvendo a equação de Gross-Pitaevskii, mostramos que os átomos do sistema se condensam em estados com

momento modular bem definido. A partir da dedução do hamiltoniano efetivo, na representação do momento modular, verificamos que apenas pares de momentos modulares são acoplados, e com a identificação desses pares determinamos os momentos modulares que aparecem na composição das excitações coletivas. Identificamos corretamente o modo de energia zero, que aparece como consequência da violação da conservação do número de átomos introduzida pela aproximação de Bogoliubov, e verificamos que este possui momento modular igual ao do condensado. No decorrer da dissertação ficará evidente como a descrição das propriedades do sistema se torna simples e clara quando utilizamos essa representação.

A dissertação está organizada do seguinte modo: no capítulo 2 definimos o hamiltoniano de Bose-Hubbard para um sistema formado por N átomos bosônicos interagentes numa rede óptica circular com M sítios. Observamos que estados com momento modular bem definido formam uma base para os estados do sistema e diagonalizam o termo de tunelamento do hamiltoniano de Bose-Hubbard. Deduzimos e resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii para os condensados.

No capítulo 3, a partir do hamiltoniano grande-canônico foi obtido, com base na aproximação de Bogoliubov, o hamiltoniano efetivo cuja diagonalização determina o espectro das excitações coletivas do sistema. Para cada condensado identificamos os pares de momentos modulares que são acoplados nesse hamiltoniano. Mostramos assim que o hamiltoniano efetivo pode ser escrito como uma soma de termos cada

um dos quais se referindo ou a um par de momentos modulares idênticos ou a um par de momentos modulares distintos.

No capítulo 4 determinamos explicitamente as expressões para as excitações coletivas do sistema. Através dos métodos descritos na referência [21], determinamos, para cada termo do hamiltoniano efetivo, os ramos energéticos que compõem o espectro das excitações coletivas.

No capítulo 5 estudamos as estabilidades dinâmica [21] e termodinâmica [22] dos condensados. No contexto da teoria de Bogoliubov, a estabilidade dinâmica de um condensado impõe que o espectro das excitações coletivas seja real ao passo que a instabilidade termodinâmica requer a existência de ramos energéticos com norma positiva e energia negativa. Observamos a existência de dois mecanismos de instabilidade termodinâmica: cruzamentos e inversões.

No capítulo 6 determinamos o intervalo de valores para $\frac{nJ}{t}$ a partir do qual detectamos metaestabilidade no sistema. Estudamos também como a variação dos parâmetros de controle afeta a estabilidade dos condensados. Nesse estudo destacamos dois limites que surgem em decorrência da competição entre o tunelamento e a repulsão local: os regimes de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$) e de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$) [23]. O regime de Rabi, limite no qual a coerência entre as fases dos estados localizados nos sítios da rede é mantida, é bem descrito pela aproximação de Bogoliubov. Por outro lado, no regime de Fock, onde não há mais essa coerência, a aplicabilidade da aproximação de Bogoliubov é questionável.

No capítulo 7, finalizamos a dissertação com as conclusões acerca do nosso estudo. Apontamentos relevantes foram anexados no Apêndice.

Capítulo 2

O modelo de Bose-Hubbard, o momento modular e os condensados do sistema

Vamos definir o hamiltoniano de Bose-Hubbard para um sistema de átomos bosônicos interagentes numa rede óptica anelar, com tunelamento apenas entre sítios vizinhos e interação repulsiva local. Nessa dissertação trabalharemos com o modelo de Bose-Hubbard na representação do momento modular [20]. A base do momento modular, como veremos, decorre da diagonalização direta do termo de tunelamento atômico no hamiltoniano de Bose-Hubbard. Ao final desse capítulo, deduziremos e resolveremos a equação de Gross-Pitaevskii para os condensados e, a partir da análise das soluções, mostraremos que o sistema se condensa em estados com momento modular bem definido.

2.1. O hamiltoniano de Bose-Hubbard.

Consideremos um sistema de N átomos bosônicos interagentes numa rede óptica periódica topologicamente restrita a uma configuração anelar com M sítios. Tomando o sistema de coordenadas cilíndricas (r, θ, z) , o centro de cada um dos sítios é localizado no espaço pelo vetor $\vec{R}_\lambda = \left(R, \theta_\lambda \equiv \frac{2\pi\lambda}{M}, z = 0\right)$, com $0 \leq \lambda \leq (M-1)$.

Se a interação entre os átomos resulta de colisões binárias a baixas energias, o hamiltoniano padrão que descreve o sistema é dado por

$$\hat{H} = \int d^3x \, \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) + \frac{g}{2} \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) \right] \hat{\psi}(\vec{x}) \quad (2.1)$$

onde $g \equiv \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m}$, a_s é o comprimento de espalhamento da onda s e $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})$ ($\hat{\psi}(\vec{x})$) é o operador de campo bosônico que cria (aniquila) um átomo na posição definida pelo vetor $\vec{x}$.

O potencial óptico $V(\vec{x})$ possui M mínimos, cada um localizado nos pontos (R, θ_λ) , em torno dos quais os átomos tendem a se localizar, definindo assim um sítio da rede óptica. Como os átomos estão sujeitos a um potencial periódico, os respectivos autoestados individuais, na representação das coordenadas, são funções de onda de Bloch e uma superposição apropriada dessas funções resulta nas funções de Wannier, que são bem localizadas em cada sítio da rede.

Para obter o hamiltoniano do modelo de Bose-Hubbard, aplicamos em (2.1) a chamada **aproximação de M -modos** que consiste em expandir o operador de campo $\hat{\psi}(\vec{x})$ na base constituída pelas funções de Wannier $w(\vec{x} - \vec{R}_\lambda)$ da forma

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \sum_{\lambda=0}^{M-1} w(\vec{x} - \vec{R}_\lambda) \hat{a}_\lambda, \quad (2.2)$$

onde o operador bosônico $\hat{a}_\lambda$, que aniquila um átomo no λ -ésimo sítio, satisfaz a condição de periodicidade $\hat{a}_\lambda = \hat{a}_{\lambda+M}$ e a relação de comutação canônica

$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda, \lambda'}$. Substituindo a expansão (2.2) no hamiltoniano padrão (2.1)

obtemos a forma geral do hamiltoniano de Bose-Hubbard

$$\hat{H}_{BH} = \sum_{\lambda, \lambda'=0}^{M-1} t_{\lambda\lambda'} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta=0}^{M-1} J_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\gamma \hat{a}_\delta \quad (2.3)$$

onde

$$\begin{cases} t_{\lambda\lambda'} = \int d^3x w^*(\vec{x} - \vec{R}_\lambda) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right] w(\vec{x} - \vec{R}_{\lambda'}) \\ J_{\alpha\beta\gamma\delta} = g \int d^3x w^*(\vec{x} - \vec{R}_\alpha) w^*(\vec{x} - \vec{R}_\beta) w(\vec{x} - \vec{R}_\gamma) w(\vec{x} - \vec{R}_\delta). \end{cases} \quad (2.4)$$

Vamos admitir que a barreira de potencial entre os sítios da rede tenha altura suficiente para garantir que a deslocalização só ocorra devido à possibilidade de tunelamento entre os sítios vizinhos. Dessa maneira os elementos da matriz de tunelamento $[t_{\lambda\lambda'}]$, dados em (2.4), são não-nulos apenas para aqueles que conectam poços consecutivos, ou seja, quando $\lambda' = \lambda \pm 1$. A aproximação de M -modos juntamente com essa consideração acerca dos elementos da matriz de tunelamento constituem a chamada **aproximação de tight-binding**. Consideraremos também que a repulsão entre os átomos seja local, ou seja, os átomos só interagem quando estão localizados no mesmo sítio da rede. Dessa forma somente os elementos $J_{\alpha\beta\gamma\delta}$, com $\alpha = \beta = \gamma = \delta$, são não-nulos. A partir dessas considerações acerca do modelo, o hamiltoniano de Bose-Hubbard para um gás de átomos bosônicos interagentes numa rede óptica anelar assume a forma

$$\hat{H}_{BH} = -t \sum_{\lambda=0}^{M-1} \left(\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda+1} + \hat{a}_{\lambda+1}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda} \right) + \frac{J}{2} \sum_{\lambda=0}^{M-1} \left(\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda} \hat{a}_{\lambda} \right) \quad (2.5)$$

com

$$\begin{cases} t = \int d^3x \, w^* \left(\vec{x} - \vec{R}_{\lambda} \right) \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V(\vec{x}) \right] w \left(\vec{x} - \vec{R}_{\lambda+1} \right) \\ J = g \int d^3x \, |w(\vec{x})|^4. \end{cases} \quad (2.6)$$

Em resumo, o hamiltoniano (2.5) descreve a dinâmica de um sistema de átomos bosônicos interagentes numa rede anelar com tunelamento apenas entre sítios vizinhos e interação repulsiva local. As intensidades do termo de tunelamento t e da repulsão local J são dadas, explicitamente, em (2.6).

Na próxima seção mostraremos que estados com momento modular bem definido formam uma base que diagonaliza o termo de tunelamento do hamiltoniano de Bose-Hubbard.

2.2. Diagonalização do termo de tunelamento e a representação do momento modular.

No hamiltoniano de Bose-Hubbard (2.5) o termo

$$\hat{H}_{tun} = -t \sum_{\lambda=0}^{M-1} \left(\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda+1} + \hat{a}_{\lambda+1}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda} \right) \quad (2.7)$$

descreve o tunelamento atômico entre os sítios vizinhos da rede óptica. Nessa seção mostraremos que estados com **momento modular** bem definido [20] formam uma base que diagonaliza esse termo.

Se introduzirmos um vetor da forma $\alpha^\dagger = (\hat{a}_0^\dagger \dots \hat{a}_{M-1}^\dagger)$ o termo de tunelamento (2.7) pode ser reescrito na forma matricial

$$\hat{H}_{tun} = -t \alpha^\dagger \Delta \alpha, \quad (2.8)$$

onde

$$\Delta = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

é uma matriz hermiteana de dimensão $M \times M$. A equação de autovalores associada a matriz Δ é dada por

$$\sum_{\lambda'=0}^{M-1} \Delta_{\lambda\lambda'} \varphi_{\lambda'} = \omega \varphi_\lambda \quad \Rightarrow \quad \varphi_{\lambda-1} + \varphi_{\lambda+1} = \omega \varphi_\lambda, \quad (2.10)$$

onde φ_λ denota o λ -ésimo elemento do autovetor associado ao autovalor ω de Δ .

Introduzindo em (2.10) o *ansatz*

$$\varphi_\lambda \equiv C e^{i\theta\lambda} \quad (2.11)$$

a equação se torna independente de λ e o autovalor ω assume a forma

$$\omega = 2 \cos \theta. \quad (2.12)$$

O parâmetro θ é determinado a partir da condição de contorno periódica $\varphi_\lambda = \varphi_{\lambda+M}$ de maneira que, a partir de (2.11), obtemos a igualdade

$$e^{i\theta M} = 1. \quad (2.13)$$

A equação (2.13) possui M soluções da forma

$$\theta = \theta_k = \frac{2\pi k}{M} \quad (2.14)$$

de modo que, se $-\pi < \theta \leq \pi$, k assume os valores inteiros do intervalo

$$\Lambda = \begin{cases} \left[-\frac{(M-1)}{2}, \frac{(M-1)}{2} \right] & \text{se } M \text{ ímpar} \\ \left[-\frac{M}{2}, \frac{M}{2} \right] & \text{se } M \text{ par.} \end{cases} \quad (2.15)$$

Introduzindo (2.14) em (2.12) os M autovalores da matriz Δ assumem a forma

$$\omega_k = 2 \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right), \quad (2.16)$$

com $k \in \Lambda$, e os autovetores normalizados correspondentes são as matrizes colunas cujos elementos são da forma

$$\varphi_\lambda^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{i \frac{2\pi k}{M} \lambda}. \quad (2.17)$$

De (2.17) é fácil verificar que os autovetores de (2.9) satisfazem a relação de ortogonalidade

$$\sum_{\lambda=0}^{M-1} \varphi_{\lambda}^{(k')*} \varphi_{\lambda}^{(k)} = \delta_M(k - k'), \quad (2.18)$$

onde

$$\delta_M(x) \equiv \begin{cases} 1 & \text{se } x \bmod M = 0 \\ 0 & \text{se } x \bmod M \neq 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

é o chamado **delta modular**. Note que, se $k \in \Lambda$, o delta modular em (2.18) se reduz ao delta de Kröneckers usual $\delta_{k,k'}$.

Podemos construir uma matriz unitária S que diagonaliza a matriz (2.9), ou seja,

$$S \Delta S^\dagger = \text{diag}(\omega), \quad (2.20)$$

onde $\text{diag}(\omega)$ denota a matriz diagonal de dimensão $M \times M$ formada pelos autovalores (2.16). Os elementos da matriz S são tais que

$$S_{k\lambda}^* = \varphi_{\lambda}^{(k)}. \quad (2.21)$$

Utilizando o fato de que S é unitária, o termo de tunelamento (2.8) pode ser reescrito na forma

$$\hat{H}_{\text{tun}} = -t \beta^\dagger \text{diag}(\omega) \beta, \quad (2.22)$$

onde $\beta \equiv S \alpha$.

Se definirmos por $\hat{A}_k$ a k -ésima componente do vetor transformado β , segue que

$$\hat{A}_k^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\lambda=0}^{M-1} e^{i \frac{2\pi k \lambda}{M}} \hat{a}_\lambda^\dagger. \quad (2.23)$$

O operador $\hat{A}_k^\dagger (\hat{A}_k)$ cria (aniquila) um átomo com momento modular igual a k . O termo de tunelamento (2.7) assume a forma diagonal

$$\hat{H}_{tun} = -2t \sum_{k \in \Lambda} \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right) \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k. \quad (2.24)$$

Para escrever o hamiltoniano de Bose-Hubbard na base dos estados com momento modular bem definido, ou simplesmente na **representação do momento modular**, invertamos a equação (2.23) e substituimos o resultado em (2.5) obtendo

$$\hat{H}_{BH} = -2t \sum_{k \in \Lambda} \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right) \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \frac{J}{2M} \sum_{k_j \in \Lambda} \delta_M(k_1 + k_2 - k_3 - k_4) \hat{A}_{k_4}^\dagger \hat{A}_{k_3}^\dagger \hat{A}_{k_2} \hat{A}_{k_1}. \quad (2.25)$$

Na próxima seção deduziremos e resolveremos a equação de Gross-Pitaevskii. Através da análise das suas soluções será possível mostrar que os átomos se condensam em estados com momento modular bem definido.

2.3. A equação de Gross-Pitaevskii e os condensados.

Aqui deduziremos a equação de Gross-Pitaevskii cujas soluções são os possíveis **condensados** do sistema. No contexto de uma teoria de campo médio mostraremos que, para o hamiltoniano de Bose-Hubbard, os átomos se condensam em estados com momento modular bem definido.

A equação de Gross-Pitaevskii é uma equação de campo médio que resulta da minimização do valor médio do hamiltoniano de Bose-Hubbard relativo a um estado variacional que descreve um condensado de bósons. O estado de um condensado de bósons, que denotaremos por $|c_N\rangle$, é dado por

$$|c_N\rangle = \frac{(\hat{\mathfrak{S}}^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle \quad (2.26)$$

onde

$$\hat{\mathfrak{S}}^\dagger = \sum_{\lambda=0}^{M-1} \chi_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger. \quad (2.27)$$

Os coeficientes χ_λ são complexos e, como consequência de $\hat{\mathfrak{S}}^\dagger$ ser um operador bosônico, satisfazem o vínculo

$$\sum_{\lambda=0}^{M-1} |\chi_\lambda|^2 = 1. \quad (2.28)$$

O valor médio do hamiltoniano de Bose-Hubbard $\langle c_N | \hat{H}_{BH} | c_N \rangle$ relativo ao estado de um condensado de bósons (2.26) é dado por

$$\langle c_N | \hat{H}_{BH} | c_N \rangle = \sum_{\lambda=0}^{M-1} \left[-t N (\chi_{\lambda+1}^* \chi_\lambda + \chi_\lambda^* \chi_{\lambda+1}) + \frac{J}{2} N (N-1) |\chi_\lambda|^4 \right]. \quad (2.29)$$

Introduzindo a mudança de variável

$$z_\lambda = \sqrt{N} \chi_\lambda, \quad (2.30)$$

referente à chamada **função de onda do condensado**, o valor médio (2.29) pode ser reescrito na forma

$$\langle c_N | \hat{H}_{BH} | c_N \rangle = \sum_{\lambda=0}^{M-1} \left[-t (z_{\lambda+1}^* z_{\lambda} + z_{\lambda}^* z_{\lambda+1}) + \frac{J}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) |z_{\lambda}|^4 \right]. \quad (2.31)$$

Note que em termos de (2.30) o vínculo (2.28) passa a ser dado por

$$N = \sum_{\lambda=0}^{M-1} |z_{\lambda}|^2. \quad (2.32)$$

A equação de Gross-Pitaevskii decorre da minimização de (2.31) condicionada ao vínculo de normalização dado em (2.32). O vínculo é adequadamente levado em consideração, no método dos multiplicadores de Lagrange, introduzindo o potencial químico μ de modo que

$$\begin{aligned} \delta \left[\langle c_N | \hat{H}_{BH} | c_N \rangle - \mu \left(\sum_{\lambda=0}^{M-1} |z_{\lambda}|^2 - N \right) \right] &= 0 \\ \Rightarrow -t (z_{\lambda+1} + z_{\lambda-1}) + J \left(1 - \frac{1}{N} \right) |z_{\lambda}|^2 z_{\lambda} &= \mu z_{\lambda}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

A equação de campo médio (2.33) é a **equação de Gross-Pitaevskii** do sistema.

Os condensados podem ser determinados introduzindo em (2.33) o *ansatz*

$$z_{\lambda} \equiv z_0 e^{i\theta_{\lambda}} \quad (2.34)$$

que torna a equação de Gross-Pitaevskii independente de λ . Substituindo (2.34) na equação (2.32) obtemos facilmente a constante z_0 dada por

$$z_0 = \sqrt{\frac{N}{M}}. \quad (2.35)$$

Recorrendo à condição de contorno periódica $z_\lambda = z_{\lambda+M}$ novamente obtemos a equação (2.13) cujas M soluções são da forma

$$\theta_q = \frac{2\pi q}{M}, \quad (2.36)$$

com $q \in \Lambda$ e Λ dado em (2.15). Substituindo (2.35) e (2.36) na equação (2.34) obtemos a forma explícita da λ -ésima componente da função de onda do condensado

$$z_\lambda^{(q)} = \sqrt{\frac{N}{M}} e^{i \frac{2\pi q}{M} \lambda}. \quad (2.37)$$

De (2.33) e (2.37) extraímos uma expressão para o potencial químico μ do sistema da forma

$$\mu^{(q)} = -2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) + \frac{J}{M}(N-1). \quad (2.38)$$

Utilizando a expressão explícita da λ -ésima componente da função de onda do condensado (2.37), o operador bosônico $\mathfrak{Z}^\dagger$, dado em (2.27), pode ser reescrito como

$$\hat{\mathfrak{Z}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\lambda=0}^{M-1} e^{i \frac{2\pi q}{M} \lambda} \hat{a}_\lambda^\dagger \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathfrak{Z}}^\dagger = \hat{A}_q^\dagger, \quad (2.39)$$

de maneira que o estado condensado de bósons assume a forma

$$|c_N, q\rangle = \frac{(\hat{A}_q^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle. \quad (2.40)$$

Concluimos assim que os átomos do sistema se condensam em estados com **momento modular** q bem definido. A energia do estado condensado é dada, a partir de (2.31), pela expressão

$$\frac{E^{(q)}}{N} = -2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) + \frac{J}{2M}(N-1). \quad (2.41)$$

Note, a partir de (2.41), que a energia é mínima para o condensado com momento modular $q = 0$ e que condensados com momentos modulares $\pm q$ são degenerados.

Nos próximos dois capítulos determinaremos o hamiltoniano grande-canônico efetivo do sistema cuja diagonalização resulta no espectro das excitações coletivas do sistema.

Capítulo 3

A aproximação de Bogoliubov e o hamiltoniano grande-canônico efetivo

O intuito desse capítulo é determinar o hamiltoniano grande-canônico efetivo do sistema e identificar, dados o momento modular q do condensado e o número M de sítios da rede óptica, os momentos modulares que são acoplados nesse hamiltoniano. Verificaremos que somente pares de momentos modulares se acoplam. Para o caso $q \neq 0, \frac{M}{2}$, construiremos parametrizações para esses pares que serão úteis no estudo da estabilidade desses condensados. No final desse capítulo mostraremos que o hamiltoniano efetivo pode ser escrito como uma soma de termos cada um dos quais se referindo ou a um par de momentos modulares idênticos ou a um par de momentos modulares distintos. Tal fato indica que o hamiltoniano efetivo é diagonal em blocos de dimensões 2×2 e 4×4 .

3.1. O hamiltoniano grande-canônico do sistema.

O hamiltoniano grande-canônico $\hat{H}_{gc}$ de um sistema cuja dinâmica, a $T = 0$, é descrita pelo hamiltoniano $\hat{H}$ é definido por

$$\hat{H}_{gc} = \hat{H} - \mu \hat{N}, \quad (3.1)$$

onde $\hat{N}$ é o operador número total de partículas e μ o potencial químico do sistema. No caso da rede óptica anelar, o operador número total de átomos $\hat{N}$, na representação do momento modular, é dado por

$$\hat{N} = \sum_{k \in \Lambda} \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k. \quad (3.2)$$

A partir desse operador e do hamiltoniano de Bose-Hubbard (2.25) podemos escrever o hamiltoniano grande-canônico do sistema da forma

$$\hat{H}_{gc} = \sum_{k \in \Lambda} \left[-2t \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right) - \mu \right] \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \frac{J}{2M} \sum_{k_j \in \Lambda} \delta_M(k_1 + k_2 - k_3 - k_4) \hat{A}_{k_4}^\dagger \hat{A}_{k_3}^\dagger \hat{A}_{k_2} \hat{A}_{k_1}. \quad (3.3)$$

No hamiltoniano grande-canônico (3.3) podemos separar o termo que descreve o condensado dos demais termos que descrevem as excitações introduzindo a transformação

$$\hat{A}_k = z_q \delta_{k,q} + \hat{b}_k. \quad (3.4)$$

O número complexo z_q é identificado como a função de onda do condensado. Note que o vácuo dos operadores deslocados $\hat{b}_k$ é um estado coerente com momento modular igual a q . Ao realizarmos a transformação (3.4), o hamiltoniano grande-canônico (3.3) é expandido na ordem normal dos operadores deslocados da forma

$$\hat{H}_{gc} = \hat{h}_0 + \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3 + \hat{h}_4, \quad (3.5)$$

onde

$$\hat{h}_0 = \left[-2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) - \mu \right] |z_q|^2 + \frac{J}{2M} |z_q|^4, \quad (3.6)$$

$$\hat{h}_1 = \left[-2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) z_q^* + \frac{J}{M} z_q^* |z_q|^2 - \mu z_q^* \right] \hat{b}_q + \left[-2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) z_q + \frac{J}{M} z_q |z_q|^2 - \mu z_q \right] \hat{b}_q^\dagger, \quad (3.7)$$

$$\hat{h}_2 = \sum_{k \in \Lambda} \left[-2t \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right) + \frac{2J}{M} |z_q|^2 - \mu \right] \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{J}{2M} \sum_{k, k' \in \Lambda} \delta_M(k + k' - 2q) \left(z_q^2 \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger + z_q^{*2} \hat{b}_k \hat{b}_{k'} \right), \quad (3.8)$$

$$\hat{h}_3 = \frac{J}{M} z_q^* \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \Lambda} \delta_M(k_1 + k_2 - k_3 - q) \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_1} + \frac{J}{M} z_q \sum_{k_1, k_2, k_3 \in \Lambda} \delta_M(q + k_1 - k_2 - k_3) \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_2}^\dagger \hat{b}_{k_1}, \quad (3.9)$$

$$\hat{h}_4 = \frac{J}{2M} \sum_{k_j \in \Lambda} \delta_M(k_1 + k_2 - k_3 - k_4) \hat{b}_{k_4}^\dagger \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_1}. \quad (3.10)$$

A ordem normal estabelece uma hierarquia no hamiltoniano grande-canônico. O termo $\hat{h}_0$ envolve somente átomos no estado condensado, $\hat{h}_1$ envolve um átomo fora do condensado, $\hat{h}_2$ dois, $\hat{h}_3$ três e, finalmente, $\hat{h}_4$ envolve somente átomos fora do condensado.

Introduzindo a transformação (3.4) no operador número total de átomos $\hat{N}$, dado em (3.2), obtemos

$$\hat{N} = |z_q|^2 + z_q^* \hat{b}_q + z_q \hat{b}_q^\dagger + \sum_{k \in \Lambda} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k. \quad (3.11)$$

O operador acima comuta com o hamiltoniano grande-canônico (3.5) indicando assim a **conservação do número de átomos** no sistema.

O valor médio do hamiltoniano grande-canônico relativo ao vácuo normalizado dos operadores deslocados $\hat{b}_k$ é o próprio termo $\hat{h}_0$. Impondo que a derivada de $\hat{h}_0$ em relação a z_q (ou z_q^*) é nula obtemos a equação

$$\left[-2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) + \frac{J}{M} |z_q|^2 - \mu \right] z_q = 0. \quad (3.12)$$

Note que o valor médio do operador número relativo ao vácuo dos operadores deslocados $\hat{b}_k$ tem como resultado

$$N = |z_q|^2. \quad (3.13)$$

A partir da equação (3.12) e da relação (3.13) obtemos diretamente uma expressão para o potencial químico μ da forma

$$\mu^{(q)} = -2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) + \frac{JN}{M}. \quad (3.14)$$

Observe que a expressão (3.14) obtida para o potencial químico é consistente com a expressão (2.38) no limite para $N \gg 1$. Um outro ponto que podemos destacar é que a equação variacional (3.12) e sua respectiva complexa conjugada anulam o termo de primeira ordem $\hat{h}_1$ no hamiltoniano grande-canônico (3.5).

Na próxima seção, sob a hipótese de que a fração de átomos fora do condensado (depleção) é desprezível, aplicaremos ao hamiltoniano grande-canônico a chamada **aproximação de Bogoliubov** determinando assim sua forma efetiva.

3.2. A aproximação de Bogoliubov e o hamiltoniano grande-canônico efetivo.

Segundo a teoria de Bogoliubov [10], desde que a depleção seja desprezível, a dinâmica do sistema pode ser descrita em termos de um hamiltoniano quadrático no produto de operadores deslocados. Dessa forma a aproximação de Bogoliubov consiste em desprezar no hamiltoniano grande-canônico (3.5) os termos de terceira

e quarta ordem no número de operadores deslocados, ou seja, $\hat{h}_3$ e $\hat{h}_4$. Assim, o conteúdo dinâmico do hamiltoniano grande-canônico é descrito apenas pelo termo quadrático $\hat{h}_2$, já que $\hat{h}_0$ trata-se apenas de uma constante aditiva. Nessas condições dizemos que (3.5) assume sua forma efetiva, que denotaremos por $\hat{H}_{eff}^{(q)}$, dada por

$$\hat{H}_{eff}^{(q)} = \hat{h}_2, \quad (3.15)$$

e com o uso de (3.8), (3.13) e (3.14), obtemos sua forma explícita

$$\hat{H}_{eff}^{(q)} = \sum_{k \in \Lambda} \left(\varepsilon_k^{(q)} + \frac{JN}{M} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{JN}{2M} \sum_{k, k' \in \Lambda} \delta_M(k + k' - 2q) \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger + \hat{b}_{k'} \hat{b}_k \right), \quad (3.16)$$

onde

$$\varepsilon_k^{(q)} = 2t \left[\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) - \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right) \right] \quad (3.17)$$

é a **energia de partícula independente** do estado com momento modular k . O hamiltoniano grande-canônico efetivo (3.16), ou simplesmente **hamiltoniano efetivo**, depende do momento modular do condensado. Na próxima seção determinaremos os momentos modulares que são acoplados no hamiltoniano efetivo.

3.3. O acoplamento de momentos modulares no hamiltoniano efetivo.

O termo não-diagonal do hamiltoniano efetivo (3.16) descreve a dinâmica de criação e aniquilação de pares de átomos, cada um deles com momento modular

bem definido. O operador $\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger$ ($\hat{b}_k \hat{b}_{k'}$) cria (aniquila) um par de átomos em que um deles se encontra num estado com momento modular k e o outro num estado com momento modular k' , de modo que $k + k'$ satisfaça

$$(k + k' - 2q) \bmod M = 0. \quad (3.18)$$

A condição acima é satisfeita se, e somente se, $k + k' - 2q$ for um múltiplo inteiro de M , ou seja,

$$k + k' - 2q = \alpha M \quad (3.19)$$

para α inteiro.

Dados o momento modular q do condensado e o número M de sítios da rede óptica podemos identificar, a partir da condição (3.18), os momentos modulares (k, k') de Λ^2 , com Λ dado em (2.15), que são **acoplados** no hamiltoniano efetivo.

Em geral os observáveis do sistema são simétricos na permutação de k com k' de maneira que não é necessário haver distinção entre os pares (k, k') e (k', k) , que envolvem momentos modulares distintos. Entretanto essa distinção se torna necessária quando queremos especificar uma rotulação para os modos normais. Como será visto no capítulo 4, a diagonalização de cada termo do hamiltoniano efetivo que envolve pares de momentos modulares distintos determina dois ramos energéticos que definem um dubleto. Quando permutamos k com k' ocorre um rearranjo entre os ramos dos dubletos, mantendo a simetria, porém invertendo a rotulação dos modos normais. Para contornar essa situação torna-se necessário

introduzir um procedimento que escolha um dos pares (k, k') e (k', k) de forma a estabelecer uma relação biunívoca entre os pares de momentos modulares distintos e a rotulação dos modos normais.

Nas próximas duas seções determinaremos todos os pares de momentos modulares (k, k') de Λ^2 que satisfazem (3.18) para os casos $q = 0$, $q = \frac{M}{2}$ para M par e $q \neq 0, \frac{M}{2}$. Discutiremos, para cada caso, o procedimento que será adotado para estabelecer a escolha de um dos pares entre (k, k') e (k', k) .

3.4. Determinação dos pares de momentos modulares que são acoplados nos casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$.

Esses dois casos serão estudados separadamente, pois ambos apresentam estruturas de pares semelhantes e, como será visto no capítulo 4, são os únicos dois casos onde ocorre degenerescência entre os ramos energéticos que definem os dubletos.

3.4.1. Caso $q = 0$.

Nesse caso a equação (3.19) assume a forma

$$k + k' = \alpha M. \quad (3.20)$$

Se M for **ímpar**, é fácil verificar que, para todos os pares de momentos modulares (k, k') em Λ^2 , a soma $k + k'$ está restrita ao intervalo $-(M-1) \leq k + k' \leq (M-1)$. Dessa forma a equação (3.20) só admite soluções em Λ^2 para $\alpha = 0$. É trivial observar que as soluções para $\alpha = 0$ são da forma $(k, -k)$

com $-\frac{(M-1)}{2} \leq k \leq \frac{(M-1)}{2}$. Note que uma das soluções é o par $(0,0)$ que envolve um único momento modular. Tal solução indica que o momento modular $k=0$ não se acopla a nenhum outro momento modular.

Se M for **par**, a soma $k+k'$ é também limitada e está restrita ao intervalo $-(M-2) \leq k+k' \leq M$. Nessa situação somente as equações (3.20) com $\alpha=0$ e $\alpha=1$ admitem soluções em Λ^2 . Diferente do que ocorre no caso M ímpar, aqui são necessárias **duas** equações para determinarmos todos os pares de momentos modulares que são acoplados. As soluções para $\alpha=0$ são da forma $(k,-k)$ com $-\frac{M}{2}+1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1$. Já a equação para $\alpha=1$ possui uma única solução dada por $(\frac{M}{2}, \frac{M}{2})$, relativa ao momento modular $k=\frac{M}{2}$. Observe que as soluções $(0,0)$ e $(\frac{M}{2}, \frac{M}{2})$ indicam, respectivamente, que os momentos modulares $k=0$ e $k=\frac{M}{2}$ não se acoplam a nenhum outro momento modular.

3.4.2. Caso $q = \frac{M}{2}$, para M par.

Nesse caso a equação (3.19) assume a forma

$$k+k' = (1+\alpha)M. \quad (3.21)$$

Como vimos anteriormente a soma $k+k'$ é limitada da forma $-(M-2) \leq k+k' \leq M$. Assim observamos que somente as equações com $\alpha=0$ e $\alpha=-1$ admitem soluções. A equação para $\alpha=0$ admite somente uma única solução dada por $(\frac{M}{2}, \frac{M}{2})$, relativa ao momento modular $k=\frac{M}{2}$. Já a equação para $\alpha=-1$ admite soluções da forma $(k,-k)$ com $-\frac{M}{2}+1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1$. As soluções

$(\frac{M}{2}, \frac{M}{2})$ e $(0,0)$ indicam, respectivamente, que os momentos modulares $k = \frac{M}{2}$ e $k = 0$ não se acoplam a nenhum outro momento modular.

3.4.3. Procedimento para a escolha de um dos pares entre $(k, -k)$ e $(-k, k)$.

Um procedimento arbitrário que permite estabelecer uma relação biunívoca entre os pares de momentos modulares distintos e a rotulação dos modos normais, para os casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$, é tomar o par $(k, -k)$ com k assumindo somente os **valores positivos** de Λ , ou seja,

- se $q = 0$ o conjunto dos pares de momentos modulares será dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ (0,0), (k, -k) \middle|_{1 \leq k \leq \frac{(M-1)}{2}} \right\} \quad \text{se } M \text{ ímpar} \\ \left\{ (0,0), (\frac{M}{2}, \frac{M}{2}), (k, -k) \middle|_{1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1} \right\} \quad \text{se } M \text{ par} \end{array} \right\} \quad (3.22)$$

- se $q = \frac{M}{2}$ o conjunto dos pares de momentos modulares será dado por

$$\left\{ (\frac{M}{2}, \frac{M}{2}), (0,0), (k, -k) \middle|_{1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1} \right\}. \quad (3.23)$$

3.5. Determinação dos pares de momentos modulares que são acoplados no caso $q \neq 0, \frac{M}{2}$.

Agora vamos analisar o caso geral onde $q \neq 0, \frac{M}{2}$. Dados o momento modular $q \neq 0, \frac{M}{2}$ do condensado e o número M de sítios da rede óptica, os pares de momentos modulares (k, k') de Λ^2 que são acoplados no hamiltoniano efetivo são determinados pelas equações

$$\begin{cases} k + k' = 2q & (\alpha = 0) \\ k + k' = 2q - M \operatorname{sgn}(q) & (\alpha = -\operatorname{sgn}(q)), \end{cases} \quad (3.24)$$

onde

$$\operatorname{sgn}(q) = \begin{cases} -1 & \text{se } q < 0 \\ +1 & \text{se } q > 0 \end{cases} \quad (3.25)$$

denota o sinal do momento modular do condensado. As equações em (3.24) introduzem duas estruturas distintas para os pares de momentos modulares que são acoplados. Observe que para $\alpha = 0$ os pares são da forma $(k, 2q - k)$ e para $\alpha = -\operatorname{sgn}(q)$ da forma $(k, 2q - k - M \operatorname{sgn}(q))$.

Cada uma dessas estruturas de pares é válida para um certo subintervalo de Λ . Se denotarmos esses subintervalos **disjuntos** por $I_{(\alpha=0)}$ e $I_{(\alpha=-\operatorname{sgn}(q))}$, os pares de momentos modulares serão da forma $(k, 2q - k)$ para todos os valores de k em $I_{(\alpha=0)}$ e da forma $(k, 2q - k - M \operatorname{sgn}(q))$ para todos os valores de k em $I_{(\alpha=-\operatorname{sgn}(q))}$. Dizemos, dessa maneira, que as equações (3.24) **particionam** o intervalo Λ em dois subintervalos disjuntos. Para dados $q \neq 0, \frac{M}{2}$ e M , é possível mostrar que esses subintervalos $I_{(\alpha)}$ são da forma

(i) M **ímpar**

$$\begin{array}{cc} q > 0 & q < 0 \\ \left\{ \begin{array}{l} I_{(\alpha=-1)} = \left[-\frac{(M-1)}{2}, -\frac{(M-1)}{2} + 2q - 1 \right] \\ I_{(\alpha=0)} = \left[-\frac{(M-1)}{2} + 2q, \frac{(M-1)}{2} \right] \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{l} I_{(\alpha=0)} = \left[-\frac{(M-1)}{2}, \frac{(M-1)}{2} - 2|q| \right] \\ I_{(\alpha=+1)} = \left[\frac{(M-1)}{2} - 2|q| + 1, \frac{(M-1)}{2} \right] \end{array} \right\} \end{array} \quad (3.26)$$

(ii) M par

$$\begin{array}{cc}
 q > 0 & q < 0 \\
 \left\{ \begin{array}{l} I_{(\alpha=-1)} = \left[-\frac{M}{2} + 1, -\frac{M}{2} + 2q - 1 \right] \\ I_{(\alpha=0)} = \left[-\frac{M}{2} + 2q, \frac{M}{2} \right] \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{l} I_{(\alpha=0)} = \left[-\frac{M}{2} + 1, \frac{M}{2} - 2|q| - 1 \right] \\ I_{(\alpha=+1)} = \left[\frac{M}{2} - 2|q|, \frac{M}{2} \right] \end{array} \right\}
 \end{array} \quad (3.27)$$

A partir do conhecimento desses subintervalos verificaremos que é possível estabelecer um procedimento prático para determinar o conjunto dos pares de momentos modulares que são acoplados no hamiltoniano efetivo.

Observe, a partir de (3.26) e (3.27), que os valores máximo e mínimo de um subintervalo $I_{(\alpha)}$ se acoplam como um par de momentos modulares solução da equação de vínculo α . Dessa maneira, podemos de forma recursiva obter todos os outros demais pares efetuando subtrações e adições sucessivas de uma unidade, respectivamente, do máximo e mínimo de cada subintervalo, de modo que cada processo resulte num novo par de momentos modulares. O número de processos é bem definido, ou seja, o máximo é subtraído de uma unidade até assumir o valor mínimo ao mesmo tempo em que o mínimo é adicionado de uma unidade até assumir o valor máximo.

Se denotarmos por $\sup I_{(\alpha)}$ o valor máximo do subintervalo $I_{(\alpha)}$ e por $\inf I_{(\alpha)}$ seu valor mínimo, o conjunto dos pares de momentos modulares (k, k') de Λ^2 que satisfazem as equações (3.24), para dados $q \neq 0, \frac{M}{2}$ e M , pode ser obtido a partir do processo recursivo finito

$$\left(\sup I_{(\alpha)}, \inf I_{(\alpha)}\right), \left(\sup I_{(\alpha)} - 1, \inf I_{(\alpha)} + 1\right), \dots, \left(\inf I_{(\alpha)}, \sup I_{(\alpha)}\right) \quad (3.28)$$

efetuado para $\alpha = 0$ e $\alpha = -\text{sgn}(q)$. Com auxílio desse processo recursivo e a partir dos subintervalos $I_{(\alpha)}$, dados em (3.26) e (3.27), determinamos explicitamente, nas tabelas abaixo, os pares de momentos modulares (k, k') de Λ^2 que satisfazem as equações (3.24) com $q \neq 0, \frac{M}{2}$.

$q > 0$			
$M \text{ par}$		$M \text{ ímpar}$	
$k + k' = 2q \quad (\alpha = 0)$	$k + k' = 2q - M \quad (\alpha = -1)$	$k + k' = 2q \quad (\alpha = 0)$	$k + k' = 2q - M \quad (\alpha = -1)$
$\left(\frac{M}{2}, -\frac{M}{2} + 2q\right)$	$\left(-\frac{M}{2} + 2q - 1, -\frac{M}{2} + 1\right)$	$\left(\frac{(M-1)}{2}, -\frac{(M-1)}{2} + 2q\right)$	$\left(-\frac{(M-1)}{2} + 2q - 1, -\frac{(M-1)}{2}\right)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
(q, q)	$\left(q - \frac{M}{2}, q - \frac{M}{2}\right)$	(q, q)	$\vdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\left(-\frac{(M-1)}{2}, -\frac{(M-1)}{2} + 2q - 1\right)$
$\left(-\frac{M}{2} + 2q, \frac{M}{2}\right)$	$\left(-\frac{M}{2} + 1, -\frac{M}{2} + 2q - 1\right)$	$\left(-\frac{(M-1)}{2} + 2q, \frac{(M-1)}{2}\right)$	

Tabela 3.I – Pares de momentos modulares que satisfazem as equações de vínculo em (3.24) com

$q > 0$.

$q < 0$			
$M \text{ par}$		$M \text{ ímpar}$	
$k + k' = -2 q \quad (\alpha = 0)$	$k + k' = -2 q + M \quad (\alpha = 1)$	$k + k' = -2 q \quad (\alpha = 0)$	$k + k' = -2 q + M \quad (\alpha = 1)$
$\left(\frac{M}{2} - 2 q - 1, -\frac{M}{2} + 1\right)$	$\left(\frac{M}{2}, \frac{M}{2} - 2 q \right)$	$\left(\frac{(M-1)}{2} - 2 q , -\frac{(M-1)}{2}\right)$	$\left(\frac{(M-1)}{2}, \frac{(M-1)}{2} - 2 q + 1\right)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$(- q , - q)$	$\left(- q + \frac{M}{2}, - q + \frac{M}{2}\right)$	$(- q , - q)$	$\vdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\left(\frac{(M-1)}{2} - 2 q + 1, \frac{(M-1)}{2}\right)$
$\left(-\frac{M}{2} + 1, \frac{M}{2} - 2 q - 1\right)$	$\left(\frac{M}{2} - 2 q , \frac{M}{2}\right)$	$\left(-\frac{(M-1)}{2}, \frac{(M-1)}{2} - 2 q \right)$	

Tabela 3.II – Pares de momentos modulares que satisfazem as equações de vínculo em (3.24) com

$q < 0$.

Observe que, nos casos M par e ímpar, encontramos a solução (q, q) proveniente da equação de vínculo com $\alpha = 0$. Essa solução indica que o momento modular $k = q$, igual ao do condensado, não se acopla a nenhum outro momento modular. Para M par ainda encontramos a solução $\left(q - \frac{M}{2} \operatorname{sgn}(q), q - \frac{M}{2} \operatorname{sgn}(q)\right)$, proveniente da equação de vínculo com $\alpha = -\operatorname{sgn}(q)$, indicando que o momento modular $k = q - \frac{M}{2} \operatorname{sgn}(q)$ não se acopla a nenhum outro.

Na próxima subseção construiremos representações paramétricas para os pares de momentos modulares tabelados acima. Essas parametrizações serão úteis no estudo da estabilidade dos condensados com momento modular $q \neq 0, \frac{M}{2}$, que será realizado posteriormente no capítulo 5. Introduziremos também um procedimento para a escolha de um dos pares entre (k, k') e (k', k) no conjunto dos pares de momentos modulares distintos que são acoplados.

3.5.1. Parametrização dos pares de momentos modulares que são acoplados no caso $q \neq 0, \frac{M}{2}$.

Vamos denotar por $(k(p), k'(p))_\alpha$ a representação paramétrica dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo α , com $\alpha = 0, -\operatorname{sgn}(q)$. A parametrização associa a cada par de momentos modulares um número inteiro p . A forma de parametrizar esses pares é completamente arbitrária.

Escolhemos inicialmente, no conjunto das soluções provenientes da equação de vínculo α , o par de momentos modulares que será associado ao parâmetro $p = 0$. Se tal equação de vínculo admite como solução um par de momentos modulares

idênticos, este será associado ao parâmetro $p = 0$. Por outro lado, se a equação não admite tal tipo de solução, associaremos ao parâmetro $p = 0$ o par de momentos modulares tal que $|k - k'| = 1$ de tal modo que tenhamos $|k| > |k'|$. A justificativa para a última escolha ficará evidente na subseção 3.5.2.

Dessa forma, se denotarmos por $(k(0), k'(0))_\alpha$ o par de momentos modulares associados ao parâmetro $p = 0$, de acordo com o processo recursivo (3.28), uma possível parametrização $(k(p), k'(p))_\alpha$, para as soluções provenientes da equação de vínculo α , pode ser definida pelas relações

$$\begin{cases} k(p) = k(0) + p \\ k'(p) = k'(0) - p \end{cases} \quad (3.29)$$

com p variando dentro de um intervalo finito $p_{\min} \leq p \leq p_{\max}$. O menor valor de p , denotado por $p_{\min}$, será associado ao par $(\inf I_{(\alpha)}, \sup I_{(\alpha)})$ enquanto que o maior valor de p , denotado por $p_{\max}$, será associado ao par $(\sup I_{(\alpha)}, \inf I_{(\alpha)})$. Dessa maneira, conhecidos o par de momentos modulares $(k(0), k'(0))_\alpha$ e os valores de $\inf I_{(\alpha)}$ e $\sup I_{(\alpha)}$, os parâmetros $p_{\min}$ e $p_{\max}$ podem ser obtidos a partir de (3.29) da forma

$$\begin{cases} p_{\min} = \inf I_{(\alpha)} - k(0) \\ p_{\max} = \sup I_{(\alpha)} - k(0). \end{cases} \quad (3.30)$$

Construiremos agora as parametrizações para os casos específicos $\alpha = 0$ e $\alpha = -\text{sgn}(q)$. Basicamente o intuito é determinar, para cada um desses casos, o par

$(k(0), k'(0))_\alpha$ e os valores $p_{\min}$ e $p_{\max}$, dados em (3.30), que definem a parametrização (3.29).

(A) Parametrização dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$.

Analisando o conjunto dos pares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$, observamos que, para M par e ímpar, o par (q, q) é o único que envolve apenas um momento modular. Dessa forma a parametrização será tal que $k(0) = k'(0) = q$.

Os parâmetros $p_{\min}$ e $p_{\max}$ são obtidos a partir das relações em (3.30) e dos valores de $\inf I_{(\alpha=0)}$ e $\sup I_{(\alpha=0)}$ que extraímos diretamente de (3.26) e (3.27). Na tabela abaixo são dadas as parametrizações para os pares provenientes da equação com $\alpha = 0$ para M par e ímpar.

$(k(p), k'(p))_{\alpha=0}$	
M par	M ímpar
$\begin{cases} k(p) = q + p \\ k'(p) = q - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> $q > 0 \Rightarrow -\left(\frac{M}{2} - q\right) \leq p \leq \left(\frac{M}{2} - q\right)$ $q < 0 \Rightarrow -\left(\frac{M}{2} - 1 - q \right) \leq p \leq \left(\frac{M}{2} - 1 - q \right)$ 	$\begin{cases} k(p) = q + p \\ k'(p) = q - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> $q > 0 \Rightarrow -\left(\frac{(M-1)}{2} - q\right) \leq p \leq \left(\frac{(M-1)}{2} - q\right)$ $q < 0 \Rightarrow -\left(\frac{(M-1)}{2} - q \right) \leq p \leq \left(\frac{(M-1)}{2} - q \right)$

Tabela 3.III – Representação paramétrica dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$.

(B) Parametrização dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$.

Aqui a escolha do par de momentos modulares associado ao parâmetro $p = 0$ será distinta nos casos M par e ímpar.

Para M par, é trivial observar que a parametrização será tal que $k(0) = k'(0) = q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)$. Já para M ímpar, em virtude de não encontramos no conjunto dos pares provenientes da equação com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ um par que envolva um único momento modular, associamos ao parâmetro $p = 0$ o par de momentos modulares (k, k') tal que $k - k' = -\text{sgn}(q)$. É fácil verificar que o par de momentos modulares $\left(q - \left(\frac{M-1}{2} + 1\right) \text{sgn}(q), q - \frac{(M-1)}{2} \text{sgn}(q)\right)$ satisfaz essa condição. Note que tal par possui, em módulo, a menor diferença entre os momentos modulares e além disso temos que $|k| > |k'|$. Desse modo, para M ímpar, a parametrização (3.29) deve ser tal que $k(0) = q - \left(\frac{M-1}{2} + 1\right) \text{sgn}(q)$ e $k'(0) = q - \frac{(M-1)}{2} \text{sgn}(q)$. Na tabela abaixo são dadas as parametrizações para os pares provenientes da equação com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ para M par e ímpar.

$(k(p), k'(p))_{\alpha = -\text{sgn}(q)}$	
M par	M ímpar
$\begin{cases} k(p) = \left(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)\right) + p \\ k'(p) = \left(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)\right) - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> • $q > 0 \Rightarrow -(q-1) \leq p \leq (q-1)$ • $q < 0 \Rightarrow - q \leq p \leq q$ 	$\begin{cases} k(p) = \left[q - \left(\frac{M-1}{2} + 1\right) \text{sgn}(q)\right] + p \\ k'(p) = \left(q - \frac{(M-1)}{2} \text{sgn}(q)\right) - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> • $q > 0 \Rightarrow -(q-1) \leq p \leq q$ • $q < 0 \Rightarrow - q \leq p \leq q - 1$

Tabela 3.IV – Representação paramétrica dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$.

3.5.2. Procedimento para a escolha de um dos pares entre (k, k') e (k', k) .

Para a escolha de um dos pares entre (k, k') e (k', k) no conjunto dos pares de momentos modulares distintos, optamos por um critério que compara as energias de partícula independente $\varepsilon_k^{(q)}$, dada em (3.17). Salientamos que a escolha desse procedimento é arbitrária. Dentro desse critério, tomaremos no conjunto de todos os pares que satisfazem as equações (3.24) somente os pares de momentos modulares (k, k') tais que

$$\varepsilon_k^{(q)} \geq \varepsilon_{k'}^{(q)}. \quad (3.31)$$

A condição (3.31) implica que os pares de momentos modulares (k, k') tomados são tais que $|k| \geq |k'|$. A igualdade $|k| = |k'|$ considera os pares de momentos modulares idênticos e a desigualdade $|k| > |k'|$ considera os pares de momentos modulares distintos.

Verificaremos, a seguir, que a escolha do par de momentos modulares através do uso do vínculo (3.31) impõe uma restrição sobre o intervalo de variação do parâmetro p . Note ainda, a partir das parametrizações construídas anteriormente, que o par associado ao parâmetro $p = 0$ satisfaz a condição (3.31)

(A) Conjunto dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$.

Note que se $q > 0$, todos os pares de momentos modulares, obtidos no processo recursivo onde $k(0) = q$ é adicionado de uma unidade até assumir o valor $\sup I_{(\alpha=0)}$

ao mesmo tempo em que $k'(0) = q$ é subtraído até $\inf I_{(\alpha=0)}$, satisfazem o vínculo (3.31). Se $q < 0$ o processo se inverte. Com base nesse raciocínio tabelamos abaixo todos os pares de momentos modulares que satisfazem o vínculo de (3.31), para os casos $q > 0$ e $q < 0$.

$q > 0$	$q < 0$
(q, q)	$(- q , - q)$
$(q+1, q-1)$	$(- q -1, - q +1)$
$\vdots$	$\vdots$
$(\sup I_{(\alpha=0)}, \inf I_{(\alpha=0)})$	$(\inf I_{(\alpha=0)}, \sup I_{(\alpha=0)})$

Tabela 3.V – Conjunto dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$ que satisfazem (3.31).

Abaixo segue uma representação esquemática do acoplamento de pares de momentos modulares que satisfazem o vínculo (3.31).

Figura 3.1 – Esquema do acoplamento de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$.

Retomando as parametrizações tabeladas em 3.III e tomando como base os pares tabelados acima, podemos facilmente verificar que para todos os valores do parâmetro p tais que

$$\begin{cases} 0 \leq p \leq p_{m\acute{a}x} & \text{para } q > 0 \\ p_{m\acute{i}n} \leq p \leq 0 & \text{para } q < 0, \end{cases} \quad (3.32)$$

os pares de momentos modulares $(k(p), k'(p))_{\alpha=0}$ satisfazem o vínculo (3.31).

$(k(p), k'(p))_{\alpha=0}$	
M par	M ímpar
$\begin{cases} k(p) = q + p \\ k'(p) = q - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> • $q > 0 \Rightarrow 0 \leq p \leq \left(\frac{M}{2} - q\right)$ • $q < 0 \Rightarrow -\left(\frac{M}{2} - 1 - q \right) \leq p \leq 0$ 	$\begin{cases} k(p) = q + p \\ k'(p) = q - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> • $q > 0 \Rightarrow 0 \leq p \leq \left(\frac{(M-1)}{2} - q\right)$ • $q < 0 \Rightarrow -\left(\frac{(M-1)}{2} - q \right) \leq p \leq 0$

Tabela 3.VI – Representação paramétrica dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$ que satisfazem (3.31).

(B) Conjunto dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$.

Vamos começar nosso estudo com o caso M par. Se $q > 0$ é fácil verificar que $k(0) = k'(0) = q - \frac{M}{2}$ é estritamente negativo. Nessa situação, observe que todos os pares de momentos modulares, obtidos no processo recursivo onde $k(0) = q - \frac{M}{2}$ é subtraído de uma unidade até assumir o valor $\inf I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}$ ao mesmo tempo em que $k'(0) = q - \frac{M}{2}$ é adicionado até $\sup I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}$, satisfazem o vínculo (3.31). Se

$q < 0$ o processo recursivo é invertido. Com base nesse raciocínio tabelamos abaixo todos os pares de momentos modulares que satisfazem o vínculo (3.31), para os casos $q > 0$ e $q < 0$.

M par	
$q > 0$	$q < 0$
$\left(q - \frac{M}{2}, q - \frac{M}{2} \right)$ $\vdots$ $\left(\inf I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}, \sup I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))} \right)$	$\left(\frac{M}{2} - q , \frac{M}{2} - q \right)$ $\vdots$ $\left(\sup I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}, \inf I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))} \right)$

Tabela 3.VII – Conjunto dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$, com M par, que satisfazem (3.31).

No caso M ímpar obteremos um processo recursivo análogo ao caso par. Se $q > 0$ é possível verificar que $k(0) = q - \left(\frac{(M-1)}{2} + 1 \right)$ é estritamente negativo e que $k'(0) = q - \frac{(M-1)}{2}$ é menor ou igual a zero. Além disso é fácil notar que $k(0) < k'(0)$. Dessa forma, todos os pares de estados, obtidos no processo recursivo onde $k(0) = q - \left(\frac{(M-1)}{2} + 1 \right)$ é subtraído de uma unidade até assumir o valor $\inf I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}$ ao mesmo tempo em que $k'(0) = q - \frac{(M-1)}{2}$ é adicionado até $\sup I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}$, satisfazem o vínculo (3.31). Se $q < 0$ o processo recursivo é invertido.

Com base nesse raciocínio tabelamos abaixo todos os pares de momentos modulares que satisfazem o vínculo (3.31), para os casos $q > 0$ e $q < 0$.

M ímpar	
$q > 0$	$q < 0$
$\left(q - \left(\frac{(M-1)}{2} + 1 \right), q - \frac{(M-1)}{2} \right)$ $\vdots$ $\left(\inf I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}, \sup I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))} \right)$	$\left(\left(\frac{(M-1)}{2} + 1 \right) - q , \frac{(M-1)}{2} - q \right)$ $\vdots$ $\left(\sup I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))}, \inf I_{(\alpha=-\text{sgn}(q))} \right)$

Tabela 3.VIII – Conjunto dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$, com M ímpar, que satisfazem (3.31).

Tomando como base os pares tabelados acima, podemos facilmente verificar que para todos os valores do parâmetro p tais que

$$\begin{cases} p_{\min} \leq p \leq 0 & \text{para } q > 0 \\ 0 \leq p \leq p_{\max} & \text{para } q < 0, \end{cases} \quad (3.33)$$

os pares de momentos modulares $(k(p), k'(p))_{\alpha=-\text{sgn}(q)}$ satisfazem o vínculo (3.31).

$(k(p), k'(p))_{\alpha=-\text{sgn}(q)}$	
M par	M ímpar
$\begin{cases} k(p) = \left(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q) \right) + p \\ k'(p) = \left(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q) \right) - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> • $q > 0 \Rightarrow -(q-1) \leq p \leq 0$ • $q < 0 \Rightarrow 0 \leq p \leq q$ 	$\begin{cases} k(p) = \left[q - \left(\frac{(M-1)}{2} + 1 \right) \text{sgn}(q) \right] + p \\ k'(p) = \left(q - \frac{(M-1)}{2} \text{sgn}(q) \right) - p \end{cases}$ <ul style="list-style-type: none"> • $q > 0 \Rightarrow -(q-1) \leq p \leq 0$ • $q < 0 \Rightarrow 0 \leq p \leq q - 1$

Tabela 3.IX – Representação paramétrica dos pares de momentos modulares provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$, que satisfazem (3.31).

3.6. A estrutura em blocos do hamiltoniano grande-canônico efetivo.

Identificados os pares de momentos modulares que são acoplados podemos escrever o hamiltoniano efetivo como uma soma de termos cada um dos quais se referindo ou a um par de momentos modulares idênticos ou a um par de momentos modulares distintos. A forma geral do hamiltoniano efetivo é dada por

$$\hat{H}_{eff}^{(q)} = \sum_k \hat{H}_1(k) + \sum_{k \neq k'}' \hat{H}_2(k, k'), \quad (3.34)$$

onde os termos $\hat{H}_1(k)$, relativos aos pares de momentos modulares idênticos, envolvem um único momento modular e os termos $\hat{H}_2(k, k')$ envolvem os pares de momentos modulares distintos. A soma Σ' é efetuada sobre o conjunto dos pares de momentos modulares distintos que são acoplados levando-se em conta o procedimento de escolha de um dos pares entre (k, k') e (k', k) . Abaixo segue a estrutura explícita do hamiltoniano efetivo para os casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$, este último exclusivo para M par, e para o caso geral $q \neq 0, \frac{M}{2}$.

- $q = 0$

$$\hat{H}_{eff}^{(0)} = \begin{cases} \hat{H}_1(0) + \sum_{1 \leq k \leq \frac{(M-1)}{2}} \hat{H}_2(k, -k) & \text{se } M \text{ ímpar} \\ \hat{H}_1(0) + \hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right) + \sum_{1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1} \hat{H}_2(k, -k) & \text{se } M \text{ par} \end{cases} \quad (3.35)$$

com

$$\hat{H}_1(0) = \frac{JN}{M} \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0 + \frac{JN}{2M} (\hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0^\dagger + \hat{b}_0 \hat{b}_0), \quad (3.36)$$

$$\hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right) = \left(4t + \frac{JN}{M}\right) \hat{b}_{\frac{M}{2}}^\dagger \hat{b}_{\frac{M}{2}} + \frac{JN}{2M} (\hat{b}_{\frac{M}{2}}^\dagger \hat{b}_{\frac{M}{2}}^\dagger + \hat{b}_{\frac{M}{2}} \hat{b}_{\frac{M}{2}}), \quad (3.37)$$

$$\hat{H}_2(k, -k) = \left(\varepsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M}\right) (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \hat{b}_{-k}^\dagger \hat{b}_{-k}) + \frac{JN}{M} (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_{-k} \hat{b}_k). \quad (3.38)$$

- $q = \frac{M}{2}$, com M par

$$\hat{H}_{eff}^{(\frac{M}{2})} = \hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right) + \hat{H}_1(0) + \sum_{1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1} \hat{H}_2(k, -k) \quad (3.39)$$

com

$$\hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right) = \frac{JN}{M} \hat{b}_{\frac{M}{2}}^\dagger \hat{b}_{\frac{M}{2}} + \frac{JN}{2M} (\hat{b}_{\frac{M}{2}}^\dagger \hat{b}_{\frac{M}{2}}^\dagger + \hat{b}_{\frac{M}{2}} \hat{b}_{\frac{M}{2}}), \quad (3.40)$$

$$\hat{H}_1(0) = \left(-4t + \frac{JN}{M}\right) b_0^\dagger b_0 + \frac{JN}{2M} (b_0^\dagger b_0^\dagger + b_0 b_0), \quad (3.41)$$

$$\hat{H}_2(k, -k) = \left(\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} + \frac{JN}{M}\right) (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \hat{b}_{-k}^\dagger \hat{b}_{-k}) + \frac{JN}{M} (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_{-k} \hat{b}_k). \quad (3.42)$$

- $q \neq 0, \frac{M}{2}$

$$\hat{H}_{eff}^{(q)} = \begin{cases} \hat{H}_1(q) + \sum_{|k| > |k'|} \hat{H}_2(k, k') & \text{se } M \text{ ímpar} \\ \hat{H}_1(q) + \hat{H}_1\left(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)\right) + \sum_{|k| > |k'|} \hat{H}_2(k, k') & \text{se } M \text{ par} \end{cases} \quad (3.43)$$

com

$$\hat{H}_1(q) = \frac{JN}{M} \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + \frac{JN}{2M} (\hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q^\dagger + \hat{b}_q \hat{b}_q), \quad (3.44)$$

$$\hat{H}_1 \left(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q) \right) = \left(\varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{JN}{M} \right) \hat{b}_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^\dagger \hat{b}_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)} + \frac{JN}{2M} \left(\hat{b}_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^\dagger \hat{b}_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^\dagger + \right. \\ \left. + \hat{b}_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)} \hat{b}_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)} \right), \quad (3.45)$$

$$\hat{H}_2(k, k') = \left(\varepsilon_k^{(q)} + \frac{JN}{M} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \left(\varepsilon_{k'}^{(q)} + \frac{JN}{M} \right) \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_{k'} + \frac{JN}{M} \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{k'} \right). \quad (3.46)$$

Em geral a diagonalização de um hamiltoniano bosônico quadrático se reduz a diagonalização de uma matriz hermiteana com respeito à métrica bosônica (*veja* seção **B** do Apêndice e para maiores detalhes referência [21]). A estrutura (3.34) indica que a matriz (**B.5**) associada ao hamiltoniano efetivo é diagonal em blocos de dimensões 2×2 e 4×4 . Os blocos de dimensão 2×2 são associados aos termos do hamiltoniano efetivo que envolvem um único momento modular. Já os blocos de dimensão 4×4 são associados aos termos que envolvem pares de momentos modulares distintos.

Dessa forma, a determinação do espectro das excitações coletivas se reduz a diagonalização individual desses blocos. Veremos no próximo capítulo que a diagonalização de um bloco que envolve um único momento modular resulta num único ramo energético e que a diagonalização de um bloco que envolve dois momentos modulares distintos resulta em dois ramos energéticos que definem um dubleto. O conjunto de todos esses ramos, para um dado condensado, forma o espectro das excitações coletivas do sistema.

Capítulo 4

O espectro das excitações coletivas

A identificação dos pares de momentos modulares que são acoplados no hamiltoniano efetivo permitiu escrevê-lo como uma soma de termos cada um dos quais se referindo ou a um par de momentos modulares idênticos ou a um par de momentos modulares distintos. Esse fato indica que o hamiltoniano efetivo é diagonal em blocos de dimensões 2×2 e 4×4 . Os blocos de dimensão 2×2 envolvem um único momento modular e os blocos de dimensão 4×4 envolvem pares de momentos modulares distintos. Através dos métodos de diagonalização da teoria de Bogoliubov, descritos na referência [21], determinaremos, para cada um desses blocos, os ramos energéticos que compõem o espectro das excitações coletivas e nesse processo identificaremos o chamado modo de energia zero do sistema.

4.1. Os ramos energéticos do espectro das excitações coletivas do sistema.

De acordo com a teoria de Bogoliubov, se as energias de excitação decorrentes da diagonalização de um hamiltoniano bosônico quadrático são todas reais, elas podem ser agrupadas em pares da forma $(E, -E)$.

Um par $(E, -E)$ está associado a um **ramo energético** e sua energia é o elemento do par associado à solução de norma positiva. Verificaremos que a

diagonalização dos blocos de dimensão 2×2 do hamiltoniano efetivo, que envolvem um único momento modular, determina apenas um ramo energético. Já a diagonalização dos blocos de dimensão 4×4 , que envolvem pares de momentos modulares distintos, determina dois ramos energéticos que definem um dubleto. O conjunto desses ramos energéticos, para um dado condensado, forma o espectro das excitações coletivas do sistema.

Na seção **B** do Apêndice apresentamos um roteiro do procedimento utilizado para diagonalizar um hamiltoniano quadrático. Mostramos a transformação de Bogoliubov que diagonaliza esse hamiltoniano e a estrutura geral do problema de autovalores (equação (B.4)) que determina os coeficientes que definem essa transformação. Maiores detalhes podem ser encontrados na referência [21].

4.2. O espectro das excitações coletivas para os casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$.

Vamos determinar o espectro das excitações coletivas do sistema para os casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$, este último exclusivo para M par.

4.2.1. Caso $q = 0$.

Para o caso $q = 0$ vimos que o hamiltoniano efetivo assume a forma

$$\hat{H}_{eff}^{(0)} = \begin{cases} \hat{H}_1(0) + \sum_{1 \leq k \leq \frac{(M-1)}{2}} \hat{H}_2(k, -k) & \text{se } M \text{ ímpar} \\ \hat{H}_1(0) + \hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right) + \sum_{1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1} \hat{H}_2(k, -k) & \text{se } M \text{ par} \end{cases} \quad (4.1)$$

onde os termos $\hat{H}_1(0)$, $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$ e $\hat{H}_2(k, -k)$ são dados, respectivamente, em (3.36), (3.37) e (3.38). A energia de partícula independente $\varepsilon_k^{(0)}$, duplamente degenerada, é dada, a partir de (3.17), por

$$\varepsilon_k^{(0)} = \varepsilon_{-k}^{(0)} = 4t \sin^2 \left(\frac{\pi k}{M} \right). \quad (4.2)$$

Primeiramente determinaremos os ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos blocos de dimensão 2×2 associados aos termos $\hat{H}_1(0)$ e $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$ que envolvem um único momento modular.

(A) Diagonalização dos blocos que envolvem um único momento modular: $\hat{H}_1(0)$ e $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$ com M par.

Vamos determinar o ramo de excitação decorrente da diagonalização do bloco associado ao termo $\hat{H}_1(0)$, dado explicitamente em (3.36), relativo ao momento modular $k = 0$. Para o bloco associado ao termo $\hat{H}_1(0)$, o problema de autovalores (B.4) assume a forma

$$\frac{JN}{M} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = E_0^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

onde $\tilde{\Gamma}_0^{(0)} = \begin{pmatrix} u_0 & v_0 \end{pmatrix}$ denota o autovetor correspondente à energia de excitação $E_0^{(0)}$.

Segue de (4.3) que

$$E_0^{(0)} = 0. \quad (4.4)$$

Esse autovalor nulo permite identificar o estado com momento modular $k = 0$ ao **modo de energia zero** do sistema. Fisicamente esse modo está associado à violação da conservação do número de átomos introduzida pela aproximação de Bogoliubov.

Se definirmos o operador hermiteano $\hat{\mathbf{P}}_0 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}_0^\dagger + \hat{b}_0)$, a menos de uma constante

aditiva, o termo $\hat{H}_1(0)$ assume uma estrutura cinética da forma

$$\hat{H}_1(0) = \frac{\hat{\mathbf{P}}_0^2}{2m_I} \quad (4.5)$$

onde $m_I \equiv \frac{M}{2JN}$ pode ser interpretado como um parâmetro inercial do sistema.

Substituindo o autovalor nulo (4.4) na equação de autovalores (4.3) obtemos a igualdade

$$v_0 = -u_0, \quad (4.6)$$

o que permite constatar que o modo de energia zero é não-normalizável.

No caso M par encontramos o termo $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$, dado explicitamente em (3.37), relativo ao momento modular $k = \frac{M}{2}$. Para o bloco associado a esse termo, o problema de autovalores (B.4) assume a forma

$$\begin{pmatrix} 4t + \frac{JN}{M} & \frac{JN}{M} \\ \frac{JN}{M} & 4t + \frac{JN}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\frac{M}{2}} \\ v_{\frac{M}{2}} \end{pmatrix} = E_{\frac{M}{2}}^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\frac{M}{2}} \\ v_{\frac{M}{2}} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

onde denotamos por $\tilde{\Gamma}_{\frac{M}{2}}^{(0)} = \begin{pmatrix} u_{\frac{M}{2}} & v_{\frac{M}{2}} \end{pmatrix}$ o autovetor correspondente à energia de excitação $E_{\frac{M}{2}}^{(0)}$. Segue de (4.7) os autovalores

$$E_{\frac{M}{2}}^{(0)\pm} = \pm \sqrt{4t \left(4t + \frac{2JN}{M} \right)}. \quad (4.8)$$

Note que esses dois autovalores podem ser agrupados num par da forma $\left(E_{\frac{M}{2}}^{(0)+}, E_{\frac{M}{2}}^{(0)-} = -E_{\frac{M}{2}}^{(0)+} \right)$, que constitui um ramo energético. Os autovetores correspondentes às energias desse ramo são dados por

$$\begin{cases} E_{\frac{M}{2}}^{(0)+} \mapsto \tilde{\Gamma}_{\frac{M}{2}}^{(0)+} = \begin{pmatrix} u_{\frac{M}{2}}^{(+)} & v_{\frac{M}{2}}^{(+)} \end{pmatrix} \\ E_{\frac{M}{2}}^{(0)-} \mapsto \tilde{\Gamma}_{\frac{M}{2}}^{(0)-} = \begin{pmatrix} u_{\frac{M}{2}}^{(-)} & v_{\frac{M}{2}}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{\frac{M}{2}}^{(+)*} & u_{\frac{M}{2}}^{(+)*} \end{pmatrix} \end{cases} \quad (4.9)$$

onde as igualdades $u_{\frac{M}{2}}^{(-)} = v_{\frac{M}{2}}^{(+)*}$ e $v_{\frac{M}{2}}^{(-)} = u_{\frac{M}{2}}^{(+)*}$ são decorrentes da relação

$$\Gamma_{\frac{M}{2}}^{(0)-} = \gamma \left(\Gamma_{\frac{M}{2}}^{(0)+} \right)^*, \text{ com } \gamma \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \text{ Observe que conhecidas as amplitudes } u_{\frac{M}{2}}^{(+)} \text{ e } v_{\frac{M}{2}}^{(+)}$$

determinamos os dois autovetores em (4.9).

Substituindo a expressão da energia $E_{\frac{M}{2}}^{(0)+}$, dada em (4.8), na equação de autovalores (4.7), obtemos a razão entre as amplitudes $u_{\frac{M}{2}}^{(+)}$ e $v_{\frac{M}{2}}^{(+)}$ da forma

$$\frac{v_{\frac{M}{2}}^{(+)}}{u_{\frac{M}{2}}^{(+)}} = - \frac{\left[4t + \frac{JN}{M} - \sqrt{4t \left(4t + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (4.10)$$

Agora determinaremos os ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos blocos de dimensão 4×4 associados aos termos $\hat{H}_2(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$ para M par e $1 \leq k \leq \frac{(M-1)}{2}$ para M ímpar, que envolvem pares de momentos modulares distintos.

(B) Diagonalização dos blocos que envolvem momentos modulares distintos: $\hat{H}_2(k, -k)$.

Vamos diagonalizar os blocos associados aos termos $\hat{H}_2(k, -k)$, dados explicitamente em (3.38), que acoplam momentos modulares distintos da forma $(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$ para M par e $1 \leq k \leq \frac{(M-1)}{2}$ para M ímpar.

Diferentemente do que ocorre com os blocos que envolvem um único momento modular, onde encontramos um único ramo energético, determinaremos para cada $(k, -k)$ dois ramos energéticos que definem um **dubleto**. Para o bloco associado ao particular termo $\hat{H}_2(k, -k)$, o problema de autovalores **(B.4)** assume a forma

$$\begin{pmatrix} \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} & 0 & 0 & \frac{JN}{M} \\ 0 & \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} & \frac{JN}{M} & 0 \\ 0 & \frac{JN}{M} & \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} & 0 \\ \frac{JN}{M} & 0 & 0 & \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ u_{-k} \\ v_k \\ v_{-k} \end{pmatrix} = E_{(k, -k)}^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ u_{-k} \\ v_k \\ v_{-k} \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Note que a equação de autovalores acima é desacoplada em dois sistemas de equações de ordem dois, onde um envolve as amplitudes (u_k, v_{-k}) e o outro envolve as amplitudes (u_{-k}, v_k) . Abaixo seguem os dois sistemas de equações que decorrem de (4.11).

$$\begin{aligned} (I) \quad & \begin{pmatrix} \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} & \frac{JN}{M} \\ \frac{JN}{M} & \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_{-k} \end{pmatrix} = E_{(k, -k), I}^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_{-k} \end{pmatrix} \\ (II) \quad & \begin{pmatrix} \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} & \frac{JN}{M} \\ \frac{JN}{M} & \epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{-k} \\ v_k \end{pmatrix} = E_{(k, -k), II}^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{-k} \\ v_k \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.12)$$

A partir dos sistemas (I) e (II) obtemos, respectivamente, as amplitudes das soluções

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{(k,-k),I}^{(0)} &= \begin{pmatrix} u_k & 0 & 0 & v_{-k} \end{pmatrix} \\ \tilde{\Gamma}_{(k,-k),II}^{(0)} &= \begin{pmatrix} 0 & u_{-k} & v_k & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{4.13}$$

De (4.12) determinamos os autovalores

$$E_{(k,-k),I}^{(0)\pm} = E_{(k,-k),II}^{(0)\pm} = \pm \sqrt{\epsilon_k^{(0)} \left(\epsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)}\tag{4.14}$$

a partir dos quais identificamos dois ramos energéticos. O **ramo 1** será identificado pelo par $(E_{(k,-k),I}^{(0)+}, E_{(k,-k),II}^{(0)-})$, onde

$$\text{ramo 1 : } \begin{cases} E_{(k,-k),I}^{(0)+} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),I}^{(0)+} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} & 0 & 0 & v_{-k}^{(+)} \end{pmatrix} \\ E_{(k,-k),II}^{(0)-} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),II}^{(0)-} = \begin{pmatrix} 0 & u_{-k}^{(-)} & v_k^{(-)} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & v_{-k}^{(+)*} & u_k^{(+)*} & 0 \end{pmatrix}, \end{cases}\tag{4.15}$$

e o **ramo 2** será identificado pelo par $(E_{(k,-k),II}^{(0)+}, E_{(k,-k),I}^{(0)-})$, onde

$$\text{ramo 2 : } \begin{cases} E_{(k,-k),II}^{(0)+} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),II}^{(0)+} = \begin{pmatrix} 0 & u_{-k}^{(+)} & v_k^{(+)} & 0 \end{pmatrix} \\ E_{(k,-k),I}^{(0)-} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),I}^{(0)-} = \begin{pmatrix} u_k^{(-)} & 0 & 0 & v_{-k}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_k^{(+)*} & 0 & 0 & u_{-k}^{(+)*} \end{pmatrix}. \end{cases}\tag{4.16}$$

Observe que as energias dos **ramos 1** e **2** coincidem, ou seja, os ramos que definem os dubletos associados aos pares $(k, -k)$ são **degenerados**.

Substituindo as energias, dadas explicitamente em (4.14), em suas respectivas equações de autovalores, observamos que os sistemas (I) e (II) coincidem, de modo que extraímos as igualdades

$$u_k^{(+)} = u_{-k}^{(+)} \quad (4.17)$$

e

$$v_k^{(+)} = v_{-k}^{(+)} \quad (4.18)$$

As igualdades (4.17) e (4.18) indicam que as amplitudes das soluções são invariantes na troca $k \leftrightarrow -k$. Decorre também dos sistemas em (4.12) que as amplitudes satisfazem a razão

$$\frac{v_{-k}^{(+)}}{u_k^{(+)}} = \frac{v_k^{(+)}}{u_{-k}^{(+)}} = - \frac{\left[\epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} - \sqrt{\epsilon_k^{(0)} \left(\epsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}, \quad (4.19)$$

o que implica que as normas das soluções $\Gamma_{(k,-k),I}^{(0)+}$ e $\Gamma_{(k,-k),II}^{(0)+}$ possuem o mesmo sinal.

4.2.2. Caso $q = \frac{M}{2}$, para M par.

Estudaremos o caso $q = \frac{M}{2}$, para M par. O hamiltoniano efetivo assume a forma

$$\hat{H}_{eff}^{(\frac{M}{2})} = \hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right) + \hat{H}_1(0) + \sum_{1 \leq k \leq \frac{M}{2}-1} \hat{H}_2(k, -k) \quad (4.20)$$

onde os termos $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$, $\hat{H}_1(0)$ e $\hat{H}_2(k, -k)$ são dados, respectivamente, em (3.40), (3.41) e (3.42). A energia de partícula independente $\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})}$, duplamente degenerada, é dada, a partir de (3.17), por

$$\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} = \varepsilon_{-k}^{(\frac{M}{2})} = -4t \cos^2 \left(\frac{\pi k}{M} \right). \quad (4.21)$$

Primeiramente determinaremos os ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos blocos de dimensão 2×2 associados aos termos $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$ e $\hat{H}_1(0)$ que envolvem um único momento modular. Em virtude do processo de diagonalização ser semelhante ao caso $q = 0$, nessa subseção não explicitaremos as equações de autovalores e tomaremos a liberdade de apenas expor os resultados.

(A) Diagonalização dos blocos que envolvem um único momento modular: $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$ e $\hat{H}_1(0)$.

A energia de excitação decorrente da diagonalização do bloco associado ao termo $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$, dado em (3.40), é dada por

$$E_{\frac{M}{2}}^{(\frac{M}{2})} = 0. \quad (4.22)$$

Note que podemos identificar o estado com momento modular $k = \frac{M}{2}$ ao modo de energia zero do sistema. O autovetor correspondente é não-normalizável e quando definimos o operador hermiteano $\hat{P}_{\frac{M}{2}} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}_{\frac{M}{2}}^\dagger + \hat{b}_{\frac{M}{2}})$, o termo $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$ assume, a menos de uma constante, uma estrutura cinética análoga a (4.5).

Encontramos ainda o termo $\hat{H}_1(0)$, dado em (3.41), relativo ao momento modular $k = 0$. Resultam, da diagonalização do bloco associado a esse termo, os autovalores

$$E_0^{(\frac{M}{2})\pm} = \pm \sqrt{4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right)} \quad (4.23)$$

que podem ser agrupados num par da forma $\left(E_0^{(\frac{M}{2})+}, E_0^{(\frac{M}{2})-} = -E_0^{(\frac{M}{2})+} \right)$ constituindo um ramo energético, onde

$$\begin{cases} E_0^{(\frac{M}{2})+} \mapsto \tilde{\Gamma}_0^{(\frac{M}{2})+} = \begin{pmatrix} u_0^{(+)} & v_0^{(+)} \end{pmatrix} \\ E_0^{(\frac{M}{2})-} \mapsto \tilde{\Gamma}_0^{(\frac{M}{2})-} = \begin{pmatrix} u_0^{(-)} & v_0^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_0^{(+)*} & u_0^{(+)*} \end{pmatrix}. \end{cases} \quad (4.24)$$

As amplitudes $u_0^{(+)}$ e $v_0^{(+)}$ satisfazem a razão

$$\frac{v_0^{(+)}}{u_0^{(+)}} = - \frac{\left[-4t + \frac{JN}{M} - \sqrt{4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (4.25)$$

Agora exibiremos as expressões para os ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos blocos de dimensão 4×4 associados aos termos $\hat{H}_2(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$, que envolvem pares de momentos modulares distintos.

(B) Diagonalização dos blocos que envolvem momentos modulares distintos: $\hat{H}_2(k, -k)$.

A diagonalização dos blocos associados aos termos $\hat{H}_2(k, -k)$, dados em (3.42), que acoplam momentos modulares distintos $(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$, também

resulta em dubletos **degenerados**. Os autovalores decorrentes da diagonalização do bloco associado ao particular termo $\hat{H}_2(k, -k)$ são

$$E_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})\pm} = E_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})\pm} = \pm \sqrt{\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} \left(\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} + \frac{2JN}{M} \right)} \quad (4.26)$$

a partir dos quais identificamos o **ramo 1**, dado por $\left(E_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})+}, E_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})-} \right)$, onde

$$\text{ramo 1:} \quad \begin{cases} E_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})+} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})+} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} & 0 & 0 & v_{-k}^{(+)} \end{pmatrix} \\ E_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})-} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})-} = \begin{pmatrix} 0 & u_{-k}^{(-)} & v_k^{(-)} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & v_{-k}^{(+)*} & u_k^{(+)*} & 0 \end{pmatrix}, \end{cases} \quad (4.27)$$

e o **ramo 2**, dado por $\left(E_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})+}, E_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})-} \right)$, onde

$$\text{ramo 2:} \quad \begin{cases} E_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})+} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})+} = \begin{pmatrix} 0 & u_{-k}^{(+)} & v_k^{(+)} & 0 \end{pmatrix} \\ E_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})-} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})-} = \begin{pmatrix} u_k^{(-)} & 0 & 0 & v_{-k}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_k^{(+)*} & 0 & 0 & u_{-k}^{(+)*} \end{pmatrix}. \end{cases} \quad (4.28)$$

As amplitudes também são simétricas na troca de $k \leftrightarrow -k$ e satisfazem a razão

$$\frac{v_{-k}^{(+)}}{u_k^{(+)}} = \frac{v_k^{(+)}}{u_{-k}^{(+)}} - \frac{\left[\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} + \frac{JN}{M} - \sqrt{\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} \left(\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}, \quad (4.29)$$

o que implica que as normas das soluções $\Gamma_{(k,-k),I}^{(\frac{M}{2})+}$ e $\Gamma_{(k,-k),II}^{(\frac{M}{2})+}$ possuem o mesmo sinal.

4.3. O espectro das excitações coletivas para o caso geral onde

$$q \neq 0, \frac{M}{2}.$$

Para o caso geral onde $q \neq 0, \frac{M}{2}$, o hamiltoniano efetivo assume a forma

$$\hat{H}_{eff}^{(q)} = \begin{cases} \hat{H}_1(q) + \sum_{|k| > |k'|} \hat{H}_2(k, k') & \text{se } M \text{ ímpar} \\ \hat{H}_1(q) + \hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)) + \sum_{|k| > |k'|} \hat{H}_2(k, k') & \text{se } M \text{ par} \end{cases} \quad (4.30)$$

onde os termos $\hat{H}_1(q)$, $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$ e $\hat{H}_2(k, k')$ são dados, respectivamente, em (3.44), (3.45) e (3.46).

(A) Diagonalização dos blocos que envolvem um único momento modular: $\hat{H}_1(q)$ e $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$ com M par.

A diagonalização do bloco associado ao termo $\hat{H}_1(q)$, dado em (3.44), relativo ao momento modular $k = q$, tem como resultado

$$E_q^{(q)} = 0. \quad (4.31)$$

Essa conclusão é imediata pois o termo $\hat{H}_1(q)$ possui uma estrutura semelhante aos demais termos associados ao modo de energia zero dos casos anteriores. Identificamos dessa maneira o estado com momento modular $k = q$ ao modo de energia zero do sistema. O autovetor correspondente é não-normalizável e definindo o operador hermiteano $\hat{P}_q \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}_q^\dagger + \hat{b}_q)$ o termo $\hat{H}_1(q)$ assume, a menos de uma constante, uma estrutura cinética análoga a (4.5).

No caso M par precisamos obter ainda o ramo energético decorrente da diagonalização do bloco associado ao termo $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$, dado em (3.45), relativo ao momento modular $k = q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)$. A energia de partícula independente do estado com momento modular $k = q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)$ é dada, a partir de (3.17), por

$$\mathfrak{E}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} = 4t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right). \quad (4.32)$$

Utilizando os mesmos procedimentos anteriores de diagonalização obtemos, para o bloco associado ao termo $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$, os autovalores

$$E_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)\pm} = \pm \sqrt{\mathfrak{E}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \left(\mathfrak{E}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{2JN}{M} \right)} \quad (4.33)$$

que podem ser agrupados num par da forma $\left(E_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)+}, E_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)-} = -E_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)+} \right)$ que constitui um ramo energético, onde

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} \mapsto \tilde{\Gamma}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} = \begin{pmatrix} u_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} & v_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} \end{pmatrix} \\ E_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(-)} \mapsto \tilde{\Gamma}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(-)} = \begin{pmatrix} u_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(-)} & v_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(-)} \end{pmatrix} = \\ \qquad \qquad \qquad = \begin{pmatrix} v_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)*} & u_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)*} \end{pmatrix}. \end{array} \right. \quad (4.34)$$

As amplitudes $u_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}$ e $v_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}$ satisfazem a razão

$$\frac{v_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}}{u_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}} = - \frac{\left[\mathfrak{E}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{JN}{M} - \sqrt{\mathfrak{E}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \left(\mathfrak{E}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (4.35)$$

(B) Diagonalização dos blocos que envolvem momentos modulares distintos: $\hat{H}_2(k, k')$.

Para cada bloco associado aos termos $\hat{H}_2(k, k')$, dados em (3.46), que acoplam momentos modulares distintos, encontramos um dubleto de ramos energéticos. Veremos que nesse caso mais geral os ramos energéticos associados a esses dubletos são não-degenerados. O problema de autovalores (B.4) para o bloco associado ao particular termo $\hat{H}_2(k, k')$ assume a forma

$$\begin{pmatrix} \epsilon_k^{(q)} + \frac{JN}{M} & 0 & 0 & \frac{JN}{M} \\ 0 & \epsilon_{k'}^{(q)} + \frac{JN}{M} & \frac{JN}{M} & 0 \\ 0 & \frac{JN}{M} & \epsilon_k^{(q)} + \frac{JN}{M} & 0 \\ \frac{JN}{M} & 0 & 0 & \epsilon_{k'}^{(q)} + \frac{JN}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ u_{k'} \\ v_k \\ v_{k'} \end{pmatrix} = E_{(k, k')}^{(q)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ u_{k'} \\ v_k \\ v_{k'} \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Note que a equação de autovalores acima é desacoplada em dois sistemas de equações de ordem dois, onde um envolve as amplitudes $(u_k, v_{k'})$ e o outro envolve as amplitudes $(u_{k'}, v_k)$. Abaixo seguem os dois sistemas de equações que decorrem de (4.36).

$$(I) \quad \begin{pmatrix} \epsilon_k^{(q)} + \frac{JN}{M} & \frac{JN}{M} \\ \frac{JN}{M} & \epsilon_{k'}^{(q)} + \frac{JN}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_{k'} \end{pmatrix} = E_{(k, k'), I}^{(q)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_{k'} \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

$$(II) \quad \begin{pmatrix} \epsilon_{k'}^{(q)} + \frac{JN}{M} & \frac{JN}{M} \\ \frac{JN}{M} & \epsilon_k^{(q)} + \frac{JN}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k'} \\ v_k \end{pmatrix} = E_{(k, k'), II}^{(q)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k'} \\ v_k \end{pmatrix}.$$

A partir dos sistemas (I) e (II) obtemos, respectivamente, as amplitudes das soluções

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{(k,k'),I}^{(q)} &= \begin{pmatrix} u_k & 0 & 0 & v_{k'} \end{pmatrix} \\ \tilde{\Gamma}_{(k,k'),II}^{(q)} &= \begin{pmatrix} 0 & u_{k'} & v_k & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{4.38}$$

De (4.37) obtemos os autovalores

$$\begin{cases} E_{(k,k'),I}^{(q)\pm} = \bar{\varepsilon}_d(k,k') \pm \sqrt{\bar{\varepsilon}(k,k') \left[\bar{\varepsilon}(k,k') + \frac{2JN}{M} \right]} \\ E_{(k,k'),II}^{(q)\pm} = -\bar{\varepsilon}_d(k,k') \pm \sqrt{\bar{\varepsilon}(k,k') \left[\bar{\varepsilon}(k,k') + \frac{2JN}{M} \right]} \end{cases}\tag{4.39}$$

onde

$$\bar{\varepsilon}_d(k,k') \equiv \frac{\varepsilon_k^{(q)} - \varepsilon_{k'}^{(q)}}{2} = 2t \sin \left[\frac{2\pi}{M} \left(\frac{k+k'}{2} \right) \right] \sin \left[\frac{2\pi}{M} \left(\frac{k-k'}{2} \right) \right]\tag{4.40}$$

e

$$\bar{\varepsilon}(k,k') \equiv \frac{\varepsilon_k^{(q)} + \varepsilon_{k'}^{(q)}}{2} = 2t \cos \left(\frac{2\pi q}{M} \right) - 2t \cos \left[\frac{2\pi}{M} \left(\frac{k+k'}{2} \right) \right] \cos \left[\frac{2\pi}{M} \left(\frac{k-k'}{2} \right) \right].\tag{4.41}$$

Vale a pena salientar que a energia relativa $\bar{\varepsilon}_d(k,k')$, dada em (4.40), é

estritamente positiva para todos os pares de momentos modulares distintos (k,k')

pois, pela parametrização adotada para esses pares, temos $\varepsilon_k^{(q)} > \varepsilon_{k'}^{(q)}$.

Podemos agrupar os autovalores dados em (4.39) em dois pares energéticos. O

ramo 1 será associado ao par $\left(E_{(k,k'),I}^{(q)+}, E_{(k,k'),II}^{(q)-} \right)$, onde

$$\text{ramo 1: } \begin{cases} E_{(k,k'),I}^{(q)+} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,k'),I}^{(q)+} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} & 0 & 0 & v_{k'}^{(+)} \end{pmatrix} \\ E_{(k,k'),II}^{(q)-} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,k'),II}^{(q)-} = \begin{pmatrix} 0 & u_{k'}^{(-)} & v_k^{(-)} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & v_{k'}^{(+)*} & u_k^{(+)*} & 0 \end{pmatrix}, \end{cases} \quad (4.42)$$

e o **ramo 2** ao par $(E_{(k,k'),II}^{(q)+}; E_{(k,k'),I}^{(q)-})$, onde

$$\text{ramo 2: } \begin{cases} E_{(k,k'),II}^{(q)+} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,k'),II}^{(q)+} = \begin{pmatrix} 0 & u_{k'}^{(+)} & v_k^{(+)} & 0 \end{pmatrix} \\ E_{(k,k'),I}^{(q)-} \mapsto \tilde{\Gamma}_{(k,k'),I}^{(q)-} = \begin{pmatrix} u_k^{(-)} & 0 & 0 & v_{k'}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_k^{(+)*} & 0 & 0 & u_{k'}^{(+)*} \end{pmatrix}. \end{cases} \quad (4.43)$$

Note que as energias dos **ramos 1** e **2** são distintas, ou seja, os ramos que definem os dubletos associados aos pares (k, k') são **não-degenerados**.

Substituindo as energias (4.39) em suas respectivas equações de autovalores, dadas em (4.37), extraímos as igualdades

$$u_k^{(+)} = u_{k'}^{(+)} \quad (4.44)$$

e

$$v_k^{(+)} = v_{k'}^{(+)} \quad (4.45)$$

As igualdades (4.44) e (4.45) indicam que as amplitudes das soluções são invariantes na troca $k \leftrightarrow k'$. Substituindo (4.39) em (4.37) podemos mostrar que as amplitudes dos autovetores (4.42) e (4.43) satisfazem a relação

$$\frac{v_{k'}^{(+)}}{u_k^{(+)}} = \frac{v_k^{(+)}}{u_{k'}^{(+)}} = - \frac{\left(\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{JN}{M} - \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]} \right)}{\frac{JN}{M}} \quad (4.46)$$

o que implica que as normas das soluções $\Gamma_{(k,-k),I}^{(q)+}$ e $\Gamma_{(k,-k),II}^{(q)+}$ possuem o mesmo sinal.

No próximo capítulo estudaremos, dentro do contexto da teoria de Bogoliubov, as estabilidades dinâmica e termodinâmica dos condensados do sistema.

Capítulo 5

A estabilidade dos condensados

Numa visão geral do conceito, podemos dizer que a estabilidade dinâmica [21] de um estado de equilíbrio está relacionada com a idéia de que se o sistema for encontrado numa vizinhança arbitrária suficientemente próxima desse equilíbrio ele permanecerá nessa região indefinidamente. Já um estado de equilíbrio termodinamicamente estável [22] é a situação limite que um sistema tende a convergir espontaneamente, por um processo dissipativo, a partir de um determinado estado inicial na vizinhança do equilíbrio. No contexto da teoria de Bogoliubov, a estabilidade dinâmica de um condensado impõe a realidade das excitações coletivas ao passo que a instabilidade termodinâmica requer a existência de ramos energéticos com norma positiva e energia negativa. Verificaremos a existência de dois mecanismos de instabilidade termodinâmica. Um desses mecanismos, o cruzamento, ocorre quando a energia do ramo com norma positiva se anula e se torna negativa. Já a inversão é caracterizada por um ramo energético com norma positiva e energia estritamente negativa. Um condensado é dito **estável** se satisfaz ambos os requisitos de estabilidade dinâmica e termodinâmica. Se pelo menos um desses requisitos for violado o condensado será **instável**. Nesse capítulo investigaremos as estabilidades dinâmica e termodinâmica dos condensados com momento modular $q = 0$, $q = \frac{M}{2}$ exclusivo para M par e $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$. Aqui não

consideraremos os condensados com momento modular $q = \pm \frac{M}{4}$, com M múltiplo de quatro, por apresentarem um comportamento anômalo comparado aos demais estados de equilíbrio (*veja* seção **A** do Apêndice).

5.1. Estabilidade dinâmica dos condensados.

No contexto da teoria de Bogoliubov, o critério utilizado para atestar se o condensado é dinamicamente estável é verificar se as energias de todos os ramos energéticos que compõem o espectro das excitações coletivas são reais [21]. A existência de um único ramo energético com energia complexa é suficiente para garantir a instabilidade dinâmica de um condensado.

5.1.1. A estabilidade dinâmica do condensado com momento modular $q = 0$.

Mostraremos nessa subseção que o condensado com momento modular $q = 0$ é dinamicamente estável. Verificaremos que as energias dos ramos energéticos que compõem o espectro das excitações coletivas são reais.

(A) Ramos energéticos que envolvem um único momento modular: $k = 0$ e $k = \frac{M}{2}$ com M par.

No capítulo anterior vimos que a energia de excitação resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1(0)$ é identicamente nula, o que permitiu identificar o estado com momento modular $k = 0$ como sendo o modo de energia zero do sistema. O aparecimento desse modo está relacionado com a violação da

conservação do número de átomos devido à aproximação de Bogoliubov. A existência desse modo não interfere na condição de estabilidade do condensado, pois corresponde a um ponto de equilíbrio indiferente.

Para M par ainda temos o ramo energético resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right)$. Pode-se verificar, a partir de (4.8), que a energia desse ramo é real pois a desigualdade $4t\left(4t + \frac{2JN}{M}\right) > 0$ é sempre satisfeita.

(B) Ramos energéticos que envolvem pares de momentos modulares distintos: $(k, -k)$.

Agora só nos resta verificar se as energias dos dubletos degenerados, decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$ para M par e $1 \leq k \leq \frac{(M-1)}{2}$ para M ímpar, são reais.

Podemos observar que a energia de partícula independente $\varepsilon_k^{(0)}$, dada em (4.2), é estritamente positiva, ou seja,

$$\varepsilon_k^{(0)} = 4t \sin^2\left(\frac{\pi k}{M}\right) > 0 \quad (5.1)$$

para todos os valores possíveis de k . Desse modo é possível verificar diretamente, a partir de (4.14), que as energias dos dubletos são reais, pois a desigualdade

$$\varepsilon_k^{(0)}\left(\varepsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M}\right) > 0 \quad (5.2)$$

é sempre satisfeita.

Levando em conta que as energias de todos os ramos energéticos que compõem o espectro das excitações coletivas do sistema são reais, concluimos, dessa maneira, que o condensado com momento modular $q = 0$ é dinamicamente estável, independentemente dos parâmetros de controle t , J , N e M do sistema.

O condensado com momento modular $q = 0$ é **dinamicamente estável**, independentemente dos parâmetros de controle t , J , N e M do sistema.

5.1.2. A estabilidade dinâmica do condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$, para M par.

Agora investigaremos a estabilidade dinâmica do condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$, para M par. Diferente do que ocorre no caso $q = 0$, que é sempre estável do ponto de vista dinâmico, esse condensado pode ser dinamicamente instável.

(A) Ramos energéticos que envolvem um único momento modular: $k = \frac{M}{2}$ e $k = 0$.

A energia de excitação resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$ é nula. Dessa maneira, verificamos que o estado com momento modular $k = \frac{M}{2}$ é o modo de energia zero, que surge como consequência da violação da conservação do número de átomos. Como dito anteriormente, o modo de energia zero não interfere

na condição de estabilidade do condensado já que se trata apenas de um ponto de equilíbrio indiferente.

Note, a partir de (4.23), que a energia do ramo energético resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1(0)$ é real se, e somente se,

$$4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right) \geq 0. \quad (5.3)$$

Veja que essa desigualdade só pode ser válida se

$$\frac{JN}{2Mt} \leq 1. \quad (5.4)$$

Assim, se $\frac{JN}{2Mt} > 1$ a energia do ramo energético será complexa e tal fato é suficiente para garantir a instabilidade dinâmica do condensado. Se $\frac{JN}{2Mt} \leq 1$ a energia do ramo energético será real. Neste último caso torna-se necessário examinar os demais ramos para atestar se o condensado é estável ou instável dinamicamente.

(B) Ramos energéticos que envolvem pares de momentos modulares distintos: $(k, -k)$.

Podemos observar facilmente, a partir de (4.26), que as energias dos dubletos degenerados decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$, são reais se, e somente se,

$$\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} \left(\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} + \frac{2JN}{M} \right) \geq 0. \quad (5.5)$$

Entretanto a energia de partícula independente $\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})}$, dada em (4.21), é estritamente negativa, quaisquer que sejam os valores de k no intervalo $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$, ou seja,

$$\varepsilon_k^{(\frac{M}{2})} = -4t \cos^2\left(\frac{\pi k}{M}\right) < 0. \quad (5.6)$$

Desse modo, a desigualdade (5.5) será satisfeita somente se

$$\cos^2\left(\frac{\pi k}{M}\right) \geq \frac{JN}{2Mt}. \quad (5.7)$$

Note que a condição (5.7) assegura que a energia do particular dubleto degenerado associado ao par $(k, -k)$ é real. Queremos, entretanto, determinar uma condição que garanta que as energias de todos os dubletos, quaisquer que sejam os pares de momentos modulares distintos que estejam associados, sejam reais.

Observe que, se a desigualdade (5.7) for satisfeita para o **mínimo** do seu primeiro membro, as energias de todos os dubletos associados aos pares $(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$, serão reais. É fácil notar que o primeiro membro de (5.7) assume seu mínimo valor, dentro intervalo $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$, para $k = \frac{M}{2} - 1$. Dessa maneira obtemos a condição

$$\frac{JN}{2Mt} \leq \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right). \quad (5.8)$$

Veja que a condição acima domina a condição (5.4), ou seja, ela é suficiente para atestar se o condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$ é estável ou instável do ponto de vista dinâmico.

O condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$, para M par, é

dinamicamente estável se, e somente se,

$$\frac{JN}{2Mt} \leq \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right).$$

Estabelecemos aqui um critério de estabilidade dinâmica para o condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$. Diferente do que ocorre com o condensado com momento modular $q = 0$, a estabilidade dinâmica do condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$ depende dos parâmetros de controle t , J , N e M do sistema.

5.1.3. A estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$.

Nessa subseção estudaremos a estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$.

(A) Ramos energéticos que envolvem um único momento modular: $k = q$ e $k = q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)$ com M par.

A energia de excitação resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1(q)$ é nula, e tal fato permitiu identificar o estado com momento modular $k = q$ como sendo o modo de energia zero do sistema. Esse modo não interfere na estabilidade do condensado por se tratar de um ponto de equilíbrio indiferente.

Para o caso M par, verificamos, a partir de (4.33), que a energia do ramo energético resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$ é real se, e somente se,

$$\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \left(\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{2JN}{M} \right) \geq 0, \quad (5.9)$$

onde a energia de partícula independente $\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)}$ é dada explicitamente em (4.32).

Observe que a desigualdade (5.9) é satisfeita somente se

- $\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \geq 0$; ou
- $\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \leq -\frac{2JN}{M}$.

Vamos analisar as duas condições separadamente. Vale salientar que a análise a seguir é válida somente para o caso M par.

(A1) $\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \geq 0$

Utilizando a expressão para a energia $\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)}$, dada em (4.32), a condição

$\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \geq 0$ pode ser reescrita explicitamente da forma

$$\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq 0. \quad (5.10)$$

A igualdade em (5.10) tem como soluções: $q = \pm \frac{M}{4}$, para M múltiplo de quatro.

Como dito anteriormente, não consideraremos esses condensados por apresentarem um comportamento anômalo comparado aos demais estados de equilíbrio (*veja*

seção **A** do Apêndice). Desconsiderando sua igualdade, a condição (5.10) informa que, para todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 1º e 4º quadrantes, a energia do ramo energético resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1\left(q - \frac{M}{2}\text{sgn}(q)\right)$ é real. Note que esse fato ainda não é suficiente para atestar a estabilidade dinâmica desses condensados havendo ainda a necessidade de analisar os dubletos do espectro.

$$(A2) \quad \varepsilon_{q - \frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} \leq -\frac{2JN}{M}$$

Já a condição $\varepsilon_{q - \frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} \leq -\frac{2JN}{M}$ assume explicitamente a forma

$$\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \leq -\frac{JN}{2Mt}. \quad (5.11)$$

Para todos os condensados com momento modular $q \neq \frac{M}{2}$ tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 2º e 3º quadrantes que satisfazem a condição (5.11), a energia do ramo energético resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1\left(q - \frac{M}{2}\text{sgn}(q)\right)$ será real. Entretanto note que, nesse caso, a condição para que a energia do ramo energético seja real depende dos parâmetros de controle t , J , N e M do sistema.

(B) Ramos energéticos que envolvem pares de momentos modulares distintos: (k, k') .

Verificamos, a partir de (4.39), que as energias dos dubletos não-degenerados decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, k')$ são reais se, e somente se,

$$\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right] \geq 0 \quad (5.12)$$

onde $\bar{\varepsilon}(k, k')$ é dado em (4.41). A desigualdade (5.12) é satisfeita somente se

- $\bar{\varepsilon}(k, k') \geq 0$; ou
- $\bar{\varepsilon}(k, k') \leq -\frac{2JN}{M}$.

Vimos no capítulo 3 que no conjunto dos pares de momentos modulares que são acoplados no hamiltoniano efetivo, identificamos pares (k, k') que provêm da equação de vínculo $k + k' = 2q$ ($\alpha = 0$) e pares que provêm da equação de vínculo $k + k' = 2q - M \operatorname{sgn}(q)$ ($\alpha = -\operatorname{sgn}(q)$). Se distinguirmos esses pares de acordo com a equação de vínculo de que provêm, a média das energias de partícula independente $\bar{\varepsilon}(k, k')$, dada em (4.41), assume explicitamente a forma

$$\bar{\varepsilon}(k, k') = \begin{cases} 4t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \sin^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] & \text{se } k + k' = 2q \\ 4t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \cos^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] & \text{se } k + k' = 2q - M \operatorname{sgn}(q). \end{cases} \quad (5.13)$$

Vamos analisar separadamente as duas possíveis condições que asseguram a validade da desigualdade (5.12).

(B1) $\bar{\varepsilon}(k, k') \geq 0$

Podemos observar, a partir de (5.13), que a condição $\bar{\varepsilon}(k, k') \geq 0$ assume explicitamente a forma

$$\left\{ \begin{array}{ll} (1) \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \sin^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k-k'}{2}\right)\right] \geq 0 & se \quad k+k' = 2q \\ (2) \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \cos^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k-k'}{2}\right)\right] \geq 0 & se \quad k+k' = 2q - M \operatorname{sgn}(q). \end{array} \right. \quad (5.14)$$

Note, a partir das desigualdades (1) e (2) em (5.14), que obtemos novamente a desigualdade (5.10). Desconsideraremos os condensados com momento modular $q = \pm \frac{M}{4}$, para M múltiplo de quatro, sob a mesma justificativa dada anteriormente.

Concluimos que, para todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$, com M par ou ímpar, esteja contido nos 1º e 4º quadrantes, as energias dos dubletos não-degenerados decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, k')$ são reais.

Levando em conta que o condensado com momento modular $q = 0$ é também dinamicamente estável, como visto na subseção 5.1.1, podemos enunciar um importante resultado que segue abaixo.

Todos os condensados com momento modular q tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$, para M par ou ímpar, esteja contido nos 1º e 4º quadrantes são **dinamicamente estáveis**, independentemente dos parâmetros de controle t , J , N e M do sistema.

Abaixo temos um esquema ilustrando a região dinamicamente estável formada pelos 1º e 4º quadrantes.

Figura 5.1 - Os condensados com momento modular q tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 1° e 4° quadrantes são todos dinamicamente estáveis.

$$(B2) \quad \bar{\varepsilon}(k, k') \leq -\frac{2JN}{M}$$

Nesse caso os ângulos $\frac{2\pi q}{M}$ estão contidos na região formada pelos 2° e 3° quadrantes. A partir de (5.13), podemos reescrever a condição $\bar{\varepsilon}(k, k') \leq -\frac{2JN}{M}$ explicitamente da forma

$$\left\{ \begin{array}{ll} (1) - 2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \sin^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] \geq \frac{JN}{M} & \text{se } k + k' = 2q \\ (2) - 2t \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \cos^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] \geq \frac{JN}{M} & \text{se } k + k' = 2q - M \operatorname{sgn}(q). \end{array} \right. \quad (5.15)$$

Observe que as desigualdades em (5.15) garantem que as energias do particular dubleto associado ao par de momentos modulares distintos (k, k') são reais. Entretanto queremos obter uma condição geral que assegure que as energias de todos os dubletos, quaisquer que sejam os pares de momentos modulares distintos que estejam associados, sejam reais.

Note que se garantirmos a validade da desigualdade (1), em (5.15), para o **mínimo** do seu primeiro membro, as energias de todos os dubletos associados aos pares de momentos modulares distintos provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$ serão reais. Um raciocínio análogo se aplica à desigualdade (2).

Torna-se necessário, dessa forma, analisar os mínimos das funções $\sin^2 \left[\frac{\pi}{M} \left(\frac{k - k'}{2} \right) \right]$ e $\cos^2 \left[\frac{\pi}{M} \left(\frac{k - k'}{2} \right) \right]$ relativamente ao argumento $k - k'$ não-nulo. Abaixo seguem os gráficos esquemáticos dessas funções.

Figura 5.2 – Gráficos esquemáticos das funções $\sin^2 \left[\frac{\pi}{M} \left(\frac{k - k'}{2} \right) \right]$ e $\cos^2 \left[\frac{\pi}{M} \left(\frac{k - k'}{2} \right) \right]$.

Vamos começar nossa análise com a desigualdade (1) em (5.15). Observando a figura 5.2 podemos observar que a função $\sin^2 \left[\frac{\pi}{M} \left(\frac{k - k'}{2} \right) \right]$ assume seu valor mínimo não-nulo quando $|k - k'|$ assume seu **menor** valor. Com auxílio da parametrização $(k(p), k'(p))_{\alpha=0}$, tabelada em 3.VI, podemos expressar a diferença $k - k'$ da forma

$$k(p) - k'(p) = 2p \quad (M \text{ par e ímpar}). \quad (5.16)$$

Observando o intervalo de variação do parâmetro p na tabela 3.VI, para os casos M par e ímpar, notamos que a diferença $|k(p) - k'(p)|$ é mínima quando $p = \text{sgn}(q)$. Assim, concluímos que, para todos os condensados que satisfazem a desigualdade

$$-\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right) \geq \frac{JN}{2Mt}, \quad (5.17)$$

as energias dos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$ são reais.

Agora consideraremos a desigualdade (2) em (5.15). A função $\cos^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right]$ assume seu valor mínimo não-nulo quando $|k - k'|$ assume seu **maior** valor. Com auxílio das parametrizações $(k(p), k'(p))_{\alpha = -\text{sgn}(q)}$, tabeladas em 3.IX, podemos expressar a diferença $k - k'$, para os casos M par e ímpar, da forma

$$k(p) - k'(p) = \begin{cases} 2p & \text{se } M \text{ par} \\ 2p - \text{sgn}(q) & \text{se } M \text{ ímpar.} \end{cases} \quad (5.18)$$

Observando o intervalo de variação do parâmetro p na tabela 3.IX, notamos que o máximo de $|k(p) - k'(p)|$ depende do momento modular q do condensado e do número M de sítios da rede óptica. Na tabela abaixo seguem os valores máximos de $|k(p) - k'(p)|$.

	M par	M ímpar
$q > 0$	$ k - k' _{\text{máx}} = 2(q - 1)$	$ k - k' _{\text{máx}} = 2q - 1$
$q < 0$	$ k - k' _{\text{máx}} = 2 q $	$ k - k' _{\text{máx}} = 2 q - 1$

Tabela 5.I – Valores máximos da diferença $|k(p) - k'(p)|$ envolvendo os pares de momentos modulares distintos provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$.

Em virtude do máximo de $|k(p) - k'(p)|$ depender explicitamente de q e M , a estrutura da desigualdade (2) em (5.15) também varia com essa dependência. Na tabela abaixo podemos observar essa dependência.

	M par	M ímpar
$q > 0$	$-\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)\cos^2\left[\frac{\pi}{M}(q - 1)\right] \geq \frac{JN}{2Mt}$	$-\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)\cos^2\left[\frac{\pi}{2M}(2q - 1)\right] \geq \frac{JN}{2Mt}$
$q < 0$	$-\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)\cos^2\left(\frac{\pi}{M} q \right) \geq \frac{JN}{2Mt}$	$-\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)\cos^2\left[\frac{\pi}{2M}(2 q - 1)\right] \geq \frac{JN}{2Mt}$

Tabela 5.II – Para todos os condensados que satisfazem uma dessas desigualdades, as energias dos dubletos associados aos pares de momentos modulares distintos (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ são reais.

Concluimos dessa maneira que, para todos os condensados que satisfazem uma das desigualdades tabeladas acima, as energias dos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ são reais. Note, a partir da tabela 5.II, que temos uma condição geral da forma

$$-\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)\cos^2[\phi(q, M)] \geq \frac{JN}{2Mt}, \quad (5.19)$$

onde a expressão para $\phi(q, M)$ pode ser facilmente identificada nessa tabela, para dados q e M .

Observe que temos duas condições distintas, (5.17) e (5.19). A primeira identifica os condensados para os quais as energias dos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação com $\alpha = 0$ são reais. A segunda identifica os condensados para os quais as energias dos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ são reais.

Queremos, entretanto, encontrar uma **condição global** que permita identificar os condensados para os quais as energias dos dubletos sejam reais, quaisquer que sejam os pares de momentos modulares distintos que estejam associados. Podemos investigar, pela análise das desigualdades (5.17) e (5.19), qual delas é dominante, ou seja, aquela que quando satisfeita garante a validade da outra. Essa desigualdade dominante é a condição global que procuramos.

É fácil observar que a condição global será a desigualdade associada ao **menor** valor entre $\sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right) = \cos^2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{M}\right)$ e $\cos^2[\phi(q, M)]$. Para determinar a menor dentre essas duas quantidades devemos comparar os argumentos dos co-senos estabelecendo o seguinte critério

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{M} - \phi(q, M) > 0 \\ \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{M} - \phi(q, M) < 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \Rightarrow (5.17) \text{ domina} \\ \Rightarrow (5.19) \text{ domina.} \end{array} \quad (5.20)$$

No critério acima, se a diferença entre o argumento dos co-senos for zero, as desigualdades serão equivalentes de modo que ambas podem ser tomadas como

condição global. Na tabela abaixo são dadas as expressões para a diferença

$$\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{M} - \phi(q, M).$$

	$M \text{ par}$	$M \text{ ímpar}$
$q > 0$	$\frac{\pi}{M} \left(\frac{M}{2} - q \right)$	$\frac{\pi}{M} \left[\frac{(M-1)}{2} - q \right]$
$q < 0$	$\frac{\pi}{M} \left(\frac{M}{2} - 1 - q \right)$	$\frac{\pi}{M} \left[\frac{(M-1)}{2} - q \right]$

Tabela 5.III – Tabela com as quantidades $\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{M} - \phi(q, M)$ que permitem, de acordo com o critério (5.20), determinar a condição global que atesta a estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes.

Podemos facilmente observar, a partir da tabela 5.III, que a diferença entre o argumento dos co-senos é **maior ou igual a zero**, quaisquer que sejam q e M .

Concluimos assim, de acordo com o critério (5.20), que a desigualdade (5.17) é global, pois garante que as energias dos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes tanto da equação de vínculo com $\alpha = 0$ quanto da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ são reais. Para M par ela ainda engloba a condição (5.11) que dá a condição para que a energia do ramo energético resultante da diagonalização do termo $\hat{H}_1 \left(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q) \right)$ seja real.

Note ainda que, se a desigualdade (5.17) for tomada para $q = \frac{M}{2}$, com M par, obtemos a condição (5.8) que atesta a estabilidade dinâmica desse condensado. Dessa maneira a desigualdade (5.17) pode ser tomada como uma condição geral que

identifica condensados dinamicamente estáveis com momento modular q nos 2º e 3º quadrantes.

Todos os condensados com momento modular q tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$, para M par ou ímpar, esteja contido nos 2º e 3º quadrantes e que satisfazem a condição

$$\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \leq -\frac{JN}{2Mt \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right)}$$

são **dinamicamente estáveis**.

Note, a partir de (5.17), que se

$$\frac{JN}{2Mt} \leq \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right) \quad (5.21)$$

podemos definir um **ângulo-crítico** Ω_c , $\frac{\pi}{2} < \Omega_c \leq \pi$, que estabelece na região formada pelos 2º e 3º quadrantes as **zonas de estabilidade e instabilidade dinâmica**.

Esse ângulo é dado por

$$\Omega_c = \cos^{-1} \left[-\frac{JN}{2M t \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right)} \right]. \quad (5.22)$$

Todos os condensados com momento modular q nos 2º e 3º quadrantes, tal que $\frac{2\pi|q|}{M} \geq \Omega_c$, são **dinamicamente estáveis**.

Se a condição (5.21) for violada, de modo que ângulo-crítico (5.22) não possa ser definido, todos os condensados com momento modular q nos 2º e 3º quadrantes

serão **dinamicamente instáveis**. Na figura abaixo temos uma representação esquemática das zonas de estabilidade e instabilidade dinâmica delimitadas pelo ângulo-crítico Ω_c .

Figura 5.3 – Representação esquemática das zonas de estabilidade e instabilidade dinâmica nos 2º e 3º quadrantes.

Podemos nos perguntar se existe a possibilidade de não encontrarmos uma zona de instabilidade dinâmica nos 2º e 3º quadrantes, ou seja, se existe a possibilidade de todos os condensados do sistema serem dinamicamente estáveis. A resposta é sim. De fato existe um intervalo angular no qual se o ângulo-crítico Ω_c estiver contido, teremos todos os condensados do sistema dinamicamente estáveis. Determinaremos a seguir esse intervalo angular.

Dado o número M de sítios da rede óptica, sempre podemos identificar no 2º quadrante o menor ângulo $\frac{2\pi}{M} q_{\min}$ mais próximo pela esquerda de $\frac{\pi}{2}$. Note que para todos os valores de Ω_c , tal que $\frac{\pi}{2} < \Omega_c \leq \frac{2\pi}{M} q_{\min}$, a região formada pelos 2º e 3º quadrantes será uma zona de estabilidade dinâmica. Introduzindo a função $\text{Floor}[x]$, que retorna o maior inteiro menor ou igual a x , podemos obter

explicitamente o ângulo $\frac{2\pi}{M}q_{\min}$, dado em termos do número M de sítios da rede óptica. Assim, se o ângulo-crítico Ω_c assume valores tais que

$$\frac{\pi}{2} < \Omega_c \leq \frac{2\pi}{M}q_{\min}, \quad (5.23)$$

com $q_{\min} = 1 + \text{Floor}\left[\frac{M}{4}\right]$, todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes serão dinamicamente estáveis.

Se $\frac{JN}{2Mt} \leq \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right)$, todos os condensados com momento modular q na região dos 2º e 3º quadrantes, tal que $\frac{2\pi|q|}{M} \geq \Omega_c$ com Ω_c dado em (5.22), serão **dinamicamente estáveis**. No caso onde $\frac{\pi}{2} < \Omega_c \leq \frac{2\pi}{M}q_{\min}$, com $q_{\min} = 1 + \text{Floor}\left[\frac{M}{4}\right]$, temos o limite onde todos os condensados são **dinamicamente estáveis**, ou seja, não encontramos nenhuma zona de instabilidade dinâmica.

5.2. Estabilidade termodinâmica dos condensados.

No contexto da teoria de Bogoliubov dizemos que um condensado é termodinamicamente instável se existe, no espectro das excitações coletivas, pelo menos um ramo energético com norma positiva e energia negativa [22]. Veremos nesse estudo a existência de dois mecanismos de instabilidade termodinâmica. Um desses mecanismos, o cruzamento, ocorre quando a energia de um ramo energético com norma positiva se anula e troca de sinal. Já a inversão é caracterizada por um

ramo energético com norma positiva e energia estritamente negativa. A existência de um único ramo energético com cruzamento ou inversão no espectro das excitações coletivas é suficiente para atestar a instabilidade termodinâmica do correspondente condensado.

Discutiremos, separadamente, a estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular $q = 0$, $q = \frac{M}{2}$ para M par e $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$. Para cada condensado, identificaremos as soluções de norma positiva. Para isso estudaremos o sinal das razões v/u , onde u e v são as amplitudes das soluções obtidas no capítulo 4, e utilizaremos o critério

$$\begin{cases} -1 < \frac{v}{u} < 1 \\ \frac{v}{u} < -1 \quad \text{ou} \quad \frac{v}{u} > 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{matrix} \text{norma positiva} \\ \text{norma negativa.} \end{matrix} \quad (5.24)$$

Sabemos que a energia de um ramo energético é o elemento do par $(E, -E)$ cuja solução possui norma positiva. Identificada a solução de norma positiva do ramo, o passo final é estudar o sinal da energia de excitação associada, a fim de observar se o ramo apresenta ou não um dos mecanismos de instabilidade termodinâmica mencionados anteriormente.

Para cada condensado analisaremos, primeiramente, os ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos termos do hamiltoniano efetivo que envolvem um único momento modular e, por fim, analisaremos os dubletos decorrentes da diagonalização dos termos que envolvem pares de momentos modulares distintos.

5.2.1. A estabilidade termodinâmica do condensado com momento modular $q = 0$.

Nessa subseção vamos mostrar que o condensado com momento modular $q = 0$ é termodinamicamente estável.

(A) Ramos energéticos que envolvem um único momento modular: $k = 0$ e $k = \frac{M}{2}$ com M par.

Como dito anteriormente, o modo de energia zero, com momento modular $k = 0$ e associado com a violação da conservação do número de átomos, corresponde a um ponto de equilíbrio indiferente e sua existência não afeta a estabilidade do condensado.

Consideraremos aqui, para M par, apenas o ramo energético decorrente da diagonalização do termo $\hat{H}_1(\frac{M}{2})$. Vamos mostrar primeiramente que a solução

$$\tilde{\Gamma}_{\frac{M}{2}}^{(0)+} = \begin{pmatrix} u_{\frac{M}{2}}^{(+)} & v_{\frac{M}{2}}^{(+)} \end{pmatrix} \text{ associada à energia de excitação } E_{\frac{M}{2}}^{(0)+} = \sqrt{4t \left(4t + \frac{2JN}{M} \right)},$$

estritamente positiva, possui norma positiva. Para verificar esse fato devemos analisar a razão entre suas amplitudes dada em (4.10) por

$$\frac{v_{\frac{M}{2}}^{(+)}}{u_{\frac{M}{2}}^{(+)}} = - \frac{\left[4t + \frac{JN}{M} - \sqrt{4t \left(4t + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.25)$$

Note que a razão (5.25) é estritamente negativa. Podemos facilmente constatar essa afirmação escrevendo o numerador como o quadrado de uma diferença, ou seja,

$$-\left[4t + \frac{JN}{M} - \sqrt{4t\left(4t + \frac{2JN}{M}\right)}\right] = -\frac{1}{2}\left(\sqrt{4t + \frac{2JN}{M}} - \sqrt{4t}\right)^2 < 0. \quad (5.26)$$

Além disso, é possível observar que

$$\frac{\left[4t + \frac{JN}{M} - \sqrt{4t\left(4t + \frac{2JN}{M}\right)}\right]}{\frac{JN}{M}} < 1 \quad (5.27)$$

pois $\sqrt{4t} - \sqrt{4t + \frac{2JN}{M}} < 0$. Verificamos assim que $-1 < v_{\frac{M}{2}}^{(+)} / u_{\frac{M}{2}}^{(+)} < 0$, o que de acordo com (5.24), nos permite concluir que o modo de excitação $\Gamma_{\frac{M}{2}}^{(0)+}$ possui **norma positiva**.

O fato da energia do ramo energético decorrente da diagonalização do termo $\hat{H}_1\left(\frac{M}{2}\right)$ ser estritamente positiva ainda não é suficiente para atestar a estabilidade termodinâmica do condensado com momento modular $q = 0$. Precisamos investigar os demais ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos termos do hamiltoniano efetivo que envolvem pares de momentos modulares distintos.

(B) Ramos energéticos que envolvem pares de momentos modulares distintos: $(k, -k)$.

Vamos investigar os dubletos degenerados decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, -k)$. Mostraremos que as soluções, $\tilde{\Gamma}_{(k, -k), I}^{(0)+} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} & 0 & 0 & v_{-k}^{(+)} \end{pmatrix}$ e $\tilde{\Gamma}_{(k, -k), II}^{(0)+} = \begin{pmatrix} 0 & u_{-k}^{(+)} & v_k^{(+)} & 0 \end{pmatrix}$, associadas, respectivamente, à energia de excitação

$E_{(k,-k)}^{(0)+} = \sqrt{\epsilon_k^{(0)} \left(\epsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)}$, **estritamente positiva**, dos **ramos 1 e 2**, possuem normas positivas.

As amplitudes dessas duas soluções satisfazem, a partir de (4.19), a relação

$$\frac{v_k^{(+)}}{u_{-k}^{(+)}} = \frac{v_{-k}^{(+)}}{u_k^{(+)}} = - \frac{\left[\epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M} - \sqrt{\epsilon_k^{(0)} \left(\epsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.28)$$

Note que se determinarmos o sinal da norma de $\Gamma_{(k,-k),I}^{(0)+}$ também determinamos o sinal da norma de $\Gamma_{(k,-k),II}^{(0)+}$ pois eles são iguais.

Observe que a expressão (5.28) possui a mesma estrutura da expressão (5.25). Procedendo de maneira análoga ao caso anterior, levando em conta que a energia de partícula independente $\epsilon_k^{(0)} = 4t \sin^2 \left(\frac{\pi k}{M} \right)$ é estritamente positiva, verificamos que $-1 < v_k^{(+)} / u_{-k}^{(+)} = v_{-k}^{(+)} / u_k^{(+)} < 0$. Dessa maneira concluímos que os modos $\Gamma_{(k,-k),I}^{(0)+}$ e $\Gamma_{(k,-k),II}^{(0)+}$ possuem **normas positivas**.

Como não ocorre cruzamentos ou inversões nesses ramos energéticos somos levados a concluir que o condensado com momento modular $q = 0$ é **termodinamicamente estável**.

O condensado com momento modular $q = 0$ é **termodinamicamente estável**. Esse estado corresponde a um **mínimo global** do funcional de energia.

5.2.2. A estabilidade termodinâmica do condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$, para M par.

Ao contrário do que ocorre no caso $q = 0$, mostraremos que o condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$, para M par, é termodinamicamente instável. Verificaremos que todos os ramos energéticos que compõem o espectro das excitações coletivas do sistema possuem **inversões**.

(A) Ramos energéticos que envolvem um único momento modular:
 $k = \frac{M}{2}$ e $k = 0$.

Como dito anteriormente, o modo de energia zero, com momento modular $k = \frac{M}{2}$ e associado com a violação da conservação do número de átomos, corresponde a um ponto de equilíbrio indiferente e sua existência não afeta a estabilidade do condensado.

Consideraremos aqui apenas o ramo energético decorrente da diagonalização do termo $\hat{H}_1(0)$. Mostraremos que a solução $\tilde{\Gamma}_0^{(\frac{M}{2})+} = \begin{pmatrix} u_0^{(+)} & v_0^{(+)} \end{pmatrix}$ associada à energia de excitação $E_0^{(\frac{M}{2})+} = \sqrt{4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right)}$, **estritamente positiva**, possui norma negativa.

As amplitudes da solução $\Gamma_0^{(\frac{M}{2})+}$ satisfazem, de acordo com (4.25), a relação

$$\frac{v_0^{(+)}}{u_0^{(+)}} = \frac{\left[4t - \frac{JN}{M} + \sqrt{4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.29)$$

Levando em conta que $4t > \frac{2JN}{M}$, podemos mostrar que a razão (5.29) é estritamente positiva. Podemos constatar esse fato escrevendo o numerador como o quadrado de uma soma, ou seja,

$$\left[4t - \frac{JN}{M} + \sqrt{4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right)} \right] = \frac{1}{2} \left(\sqrt{4t - \frac{2JN}{M}} + \sqrt{4t} \right)^2 > 0. \quad (5.30)$$

Note que a razão satisfaz a desigualdade

$$\frac{\left[4t - \frac{JN}{M} + \sqrt{4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}} > 1 \quad (5.31)$$

pois $\sqrt{4t - \frac{2JN}{M}} + \sqrt{4t} > 0$. Verificamos dessa maneira que $v_0^{(+)} / u_0^{(+)} > 1$, o que de

acordo com (5.24), nos permite concluir que a solução $\Gamma_0^{(\frac{M}{2})+}$ possui **norma negativa**.

Essa verificação é equivalente à constatação de que a solução $\tilde{\Gamma}_0^{(\frac{M}{2})-} = \begin{pmatrix} v_0^{(+)*} & u_0^{(+)*} \end{pmatrix}$,

associada à energia de excitação $E_0^{(\frac{M}{2})-} = -\sqrt{4t \left(4t - \frac{2JN}{M} \right)}$, estritamente negativa,

possui norma positiva.

Note que aqui temos uma **inversão**. A existência dessa inversão já é suficiente para atestar a instabilidade termodinâmica desse condensado. Entretanto é instrutivo observar que os demais ramos energéticos, que constituem os dubletos degenerados decorrentes da diagonalização dos termos do hamiltoniano efetivo que envolvem pares de momentos modulares distintos, também apresentam inversões.

(B) Ramos energéticos que envolvem pares de momentos modulares distintos: $(k, -k)$.

Vamos investigar os dubletos degenerados decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, -k)$, com $1 \leq k \leq \frac{M}{2} - 1$. Mostraremos que as soluções, $\tilde{\Gamma}_{(k, -k), I}^{(\frac{M}{2})+} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} & 0 & 0 & v_{-k}^{(+)} \end{pmatrix}$ e $\tilde{\Gamma}_{(k, -k), II}^{(\frac{M}{2})+} = \begin{pmatrix} 0 & u_{-k}^{(+)} & v_k^{(+)} & 0 \end{pmatrix}$, associadas, respectivamente, à energia de excitação $E_{(k, -k)}^{(\frac{M}{2})+} = \sqrt{\epsilon_k^{(\frac{M}{2})} \left(\epsilon_k^{(\frac{M}{2})} + \frac{2JN}{M} \right)}$, **estritamente positiva**, dos **ramos 1 e 2**, possuem normas negativas.

As amplitudes dessas duas soluções satisfazem, de acordo com (4.29), a relação

$$\frac{v_k^{(+)}}{u_{-k}^{(+)}} = \frac{v_{-k}^{(+)}}{u_k^{(+)}} = \frac{\left[\left| \epsilon_k^{(\frac{M}{2})} \right| - \frac{JN}{M} + \sqrt{\left| \epsilon_k^{(\frac{M}{2})} \right| \left(\left| \epsilon_k^{(\frac{M}{2})} \right| - \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.32)$$

Observe que temos uma estrutura semelhante à (5.29). Procedendo de maneira análoga ao caso anterior, levando em conta que $\left| \epsilon_k^{(\frac{M}{2})} \right| > \frac{2JN}{M}$, verificamos que $v_k^{(+)} / u_{-k}^{(+)} = v_{-k}^{(+)} / u_k^{(+)} > 1$.

Dessa maneira concluímos que as soluções $\Gamma_{(k, -k), I}^{(\frac{M}{2})+}$ e $\Gamma_{(k, -k), II}^{(\frac{M}{2})+}$ possuem **normas negativas**. Essa verificação é equivalente à constatação de que as soluções $\Gamma_{(k, -k), II}^{(\frac{M}{2})-}$ e $\Gamma_{(k, -k), I}^{(\frac{M}{2})-}$, dadas em (4.27) e (4.28), associadas, respectivamente, à energia de excitação $E_{(k, -k)}^{(\frac{M}{2})-} = -\sqrt{\epsilon_k^{(\frac{M}{2})} \left(\epsilon_k^{(\frac{M}{2})} + \frac{2JN}{M} \right)}$, **estritamente negativa**, dos **ramos 1 e 2**, possuem normas positivas.

Verificamos, assim, que todos os ramos energéticos que compõem o espectro das excitações coletivas possuem inversão. Dessa forma somos levados a concluir que tal condensado é **termodinamicamente instável**.

O condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$ é **termodinamicamente instável**, independentemente dos parâmetros de controle t , J , N e M do sistema.

5.2.3. A estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$.

Nessa subseção estudaremos a estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$.

(A) Ramos energéticos que envolvem um único momento modular: $k = q$ e $k = q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)$ com M par.

Como dito anteriormente, o modo de energia zero, com momento modular $k = q$ e associado com a violação da conservação do número de átomos, corresponde a um ponto de equilíbrio indiferente e sua existência não afeta a estabilidade do condensado.

Consideraremos, para M par, apenas o ramo energético decorrente da diagonalização do termo $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$. Estudaremos o sinal da norma da solução $\tilde{\Gamma}_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)+} = \begin{pmatrix} u_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} & v_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} \end{pmatrix}$ associada à energia de excitação

$$E_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)+} = \sqrt{\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \left(\epsilon_{q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{2JN}{M} \right)}, \text{ estritamente positiva.}$$

Note, a partir de (4.35), que a razão entre as amplitudes $u_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)}$ e $v_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)}$ depende do momento modular do condensado. Essa dependência está na energia de partícula independente $\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)}$, dada explicitamente em (4.32). Dessa maneira estudaremos o sinal dessa norma em dois casos distintos:

- $\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} > 0$, que identifica os condensados com momento modular $q \neq 0$ tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 1º e 4º quadrantes; e
- $\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} \leq -\frac{2JN}{M}$, que identifica os condensados com momento modular $q \neq \frac{M}{2}$ tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 2º e 3º quadrantes.

(A1) $\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} > 0$

De acordo com (4.35) as amplitudes $u_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)}$ e $v_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)}$ da solução $\Gamma_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)+}$ satisfazem a relação

$$\frac{v_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)}}{u_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)}} = -\frac{\left[\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{JN}{M} - \sqrt{\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} \left(\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.33)$$

Levando em conta que $\varepsilon_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)} > 0$, podemos notar que a razão acima possui a mesma estrutura das razões (5.25) e (5.28).

Dessa maneira verificamos que $-1 < v_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)}/u_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)} < 0$ o que nos permite concluir, de acordo com o critério (5.24), que a solução $\Gamma_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(q)+}$ possui **norma positiva**.

Para todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 1º e 4º quadrantes, o ramo energético decorrente da diagonalização do termo $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$ não apresenta nenhum dos mecanismos de instabilidade termodinâmica.

$$(A2) \quad \varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \leq -\frac{2JN}{M}$$

Nesse segundo caso a razão (4.35) para as amplitudes $u_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}$ e $v_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}$ da solução $\Gamma_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)+}$ assume a forma

$$\frac{v_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}}{u_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)}} = \frac{\left[\left| \varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \right| - \frac{JN}{M} + \sqrt{\left| \varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \right| \left(\left| \varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \right| - \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.34)$$

Levando em conta que $\left| \varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \right| > \frac{2JN}{M}$, notamos que a razão acima possui a mesma estrutura de (5.29) e (5.32).

Dessa maneira verificamos que $v_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} / u_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)} > 1$ o que nos permite concluir, de acordo com o critério (5.24), que a solução $\Gamma_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)+}$ possui **norma negativa**.

Essa conclusão é equivalente à constatação de que a solução

$$\tilde{\Gamma}_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(-)} = \begin{pmatrix} v_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)*} & u_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(+)*} \end{pmatrix}, \quad \text{associada à energia de excitação}$$

$E_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)-} = -\sqrt{\varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} \left(\varepsilon_{q-\frac{M}{2} \text{sgn}(q)}^{(q)} + \frac{2JN}{M} \right)}$, estritamente negativa, possui norma positiva.

Perceba que para todos os condensados com momento modular $q \neq \frac{M}{2}$ tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 2º e 3º quadrantes, o ramo energético decorrente da diagonalização do termo $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$ possui **inversão**. A existência dessa inversão já é suficiente para garantir a instabilidade termodinâmica desses condensados.

(B) Ramos energéticos que envolvem pares de momentos modulares distintos: (k, k') .

Vamos investigar os dubletos não-degenerados decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, k')$ que envolvem pares de momentos modulares distintos.

Estudaremos o sinal das normas das soluções $\tilde{\Gamma}_{(k, k'), I}^{(q)+} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} & 0 & 0 & v_{k'}^{(+)} \end{pmatrix}$ e $\tilde{\Gamma}_{(k, k'), II}^{(q)+} = \begin{pmatrix} 0 & u_k^{(+)} & v_{k'}^{(+)} & 0 \end{pmatrix}$ associadas, respectivamente, às energias de excitação

$$E_{(k, k'), I}^{(q)+} = \bar{\varepsilon}_d(k, k') + \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]} \quad \text{do} \quad \mathbf{ramo} \quad \mathbf{1} \quad \text{e}$$

$$E_{(k, k'), II}^{(q)+} = -\bar{\varepsilon}_d(k, k') + \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]} \quad \text{do} \quad \mathbf{ramo} \quad \mathbf{2}, \quad \text{com} \quad \bar{\varepsilon}_d(k, k') \quad \text{e} \quad \bar{\varepsilon}(k, k')$$

dados em (4.40) e (4.41). Consideraremos dois casos distintos:

- $\bar{\varepsilon}(k, k') > 0$, que envolve condensados com momento modular $q \neq 0$ tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 1º e 4º quadrantes; e

- $\bar{\varepsilon}(k, k') \leq -\frac{2JN}{M}$, que envolve condensados com momento modular $q \neq \frac{M}{2}$

tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 2º e 3º quadrantes.

(B1) $\bar{\varepsilon}(k, k') > 0$

Vamos mostrar que, nesse caso, as soluções $\Gamma_{(k,k'),I}^{(q)+}$ e $\Gamma_{(k,k'),II}^{(q)+}$ possuem normas positivas. As amplitudes desses dois modos satisfazem, de acordo com (4.46), a relação

$$\frac{v_k^{(+)}}{u_{k'}^{(+)}} = \frac{v_{k'}^{(+)}}{u_k^{(+)}} = - \frac{\left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{JN}{M} - \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left(\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.35)$$

Levando em conta que $\bar{\varepsilon}(k, k') > 0$ podemos notar que a razão acima possui a mesma estrutura das razões (5.25), (5.28) e (5.33), de modo que verificamos $-1 < v_k^{(+)} / u_{k'}^{(+)} = v_{k'}^{(+)} / u_k^{(+)} < 0$. De acordo com o critério (5.24) concluimos, assim, que as soluções $\Gamma_{(k,k'),I}^{(q)+}$ e $\Gamma_{(k,k'),II}^{(q)+}$ possuem **normas positivas**.

Agora analisaremos as energias de excitação $E_{(k,k'),I}^{(q)+}$ e $E_{(k,k'),II}^{(q)+}$. É fácil observar que a energia $E_{(k,k'),I}^{(q)+} = \bar{\varepsilon}_d(k, k') + \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]}$ do **ramo 1** é **estritamente positiva**. Devemos nos recordar que a energia relativa $\bar{\varepsilon}_d(k, k')$, dada em (4.40), é estritamente positiva, pois, como visto no capítulo 3, os pares de momentos modulares são tais que $\varepsilon_k^{(q)} > \varepsilon_{k'}^{(q)}$, o que fixa o sinal dessa diferença. Concluimos assim que o **ramo 1** não apresenta nenhum dos mecanismos de instabilidade termodinâmica.

Entretanto, a energia $E_{(k,k'),II}^{(q)+} = -\bar{\varepsilon}_d(k, k') + \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]}$ do **ramo 2** pode se **anular e trocar de sinal**, ou seja, o dubleto pode apresentar um

cruzamento. A existência de pelo menos um único ramo energético com cruzamento garante a instabilidade termodinâmica do condensado.

O intuito agora é determinar para quais condensados, com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes, os dubletos não-degenerados decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, k')$ não apresentam cruzamentos, o que equivale a impor a condição

$$E_{(k, k'), II}^{(q)+} \geq 0 \quad (5.36)$$

que assume explicitamente a forma

$$-\bar{\varepsilon}_d(k, k') + \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]} \geq 0. \quad (5.37)$$

A expressão (5.37) pode ser reescrita numa forma mais conveniente. Note que se $a^2 - b^2 \geq 0$, com $a, b > 0$, necessariamente devemos ter $a - b \geq 0$. Dessa maneira, podemos reescrever (5.37) da forma

$$\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right] - [\bar{\varepsilon}_d(k, k')]^2 \geq 0. \quad (5.38)$$

Novamente distinguiremos os pares de momentos modulares distintos que provêm da equação de vínculo com $\alpha = 0$ dos pares que provêm da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$. A energia relativa $\bar{\varepsilon}_d(k, k')$, dada em (4.40), assume dessa maneira a forma

$$\bar{\varepsilon}_d(k, k') = \begin{cases} 2t \sin\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \sin\left[\frac{2\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] & se \quad k + k' = 2q \\ -2t \sin\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \sin\left[\frac{2\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] & se \quad k + k' = 2q - M \operatorname{sgn}(q). \end{cases} \quad (5.39)$$

Introduzindo as expressões explícitas de $\bar{\varepsilon}(k, k')$ e $\bar{\varepsilon}_d(k, k')$, dadas respectivamente em (5.13) e (5.39), na desigualdade (5.38) obtemos

$$\begin{cases} (1) \frac{JN}{2Mt} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq \cos^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] - \cos^2\left(\frac{2\pi q}{M}\right) & se \quad k + k' = 2q \\ (2) \frac{JN}{2Mt} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq \sin^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right] - \cos^2\left(\frac{2\pi q}{M}\right) & se \quad k + k' = 2q - M \operatorname{sgn}(q). \end{cases} \quad (5.40)$$

Note que as desigualdades acima garantem a ausência de cruzamento no particular dubleto associado ao par de momentos modulares distintos (k, k') . Entretanto queremos uma condição que ateste a ausência de cruzamento em todos os dubletos, quaisquer que sejam os pares de momentos modulares distintos que estejam associados.

Observe que se a desigualdade (1) de (5.40) for válida para o **máximo** do seu segundo membro então será válida qualquer que seja o par de momentos modulares distintos provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$. O mesmo raciocínio vale para a desigualdade (2).

Torna-se necessário, dessa maneira, analisar os máximos das funções $\sin^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right]$ e $\cos^2\left[\frac{\pi}{M}\left(\frac{k - k'}{2}\right)\right]$ relativamente ao argumento $k - k'$ não-

nulo. Os procedimentos de análise desses máximos são análogos aos utilizados para a análise dos mínimos realizada no estudo da estabilidade dinâmica. Os gráficos esquemáticos dessas funções encontram-se na figura 5.2.

Vamos começar nossa análise com a desigualdade (1) em (5.40). Observando a figura 5.2 podemos notar que a função $\cos^2 \left[\frac{\pi}{M} \left(\frac{k - k'}{2} \right) \right]$ assume seu valor máximo quando $|k - k'|$ assume seu **menor** valor. Novamente com o auxílio da parametrização $(k(p), k'(p))_{\alpha=0}$, tabelada em 3.VI, verificamos que a diferença $|k(p) - k'(p)|$ é mínima quando $p = \text{sgn}(q)$. Concluimos dessa maneira que para todos os condensados que satisfazem a desigualdade

$$\frac{JN}{2Mt} \cos^2 \left(\frac{2\pi q}{M} \right) \geq \cos^2 \left(\frac{\pi}{M} \right) - \cos^2 \left(\frac{2\pi q}{M} \right) \quad (5.41)$$

os dubletos associados aos pares de momentos modulares distintos (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$ não admitem cruzamentos.

Agora consideraremos a desigualdade (2) em (5.40). A função $\sin^2 \left[\frac{\pi}{M} \left(\frac{k - k'}{2} \right) \right]$ assume seu valor máximo quando $|k - k'|$ assume seu **maior** valor. Com o auxílio das parametrizações $(k(p), k'(p))_{\alpha=-\text{sgn}(q)}$, tabeladas em 3.IX, para os casos M par e ímpar, verificamos que máximo de $|k(p) - k'(p)|$ depende do momento modular q do condensado e do número M de sítios da rede. Esses máximos encontram-se tabelados em 5.I. Em virtude da dependência do máximo de

$|k(p) - k'(p)|$ com q e M , a estrutura da desigualdade (2) em (5.40) também varia com essa dependência como pode ser observado na tabela abaixo.

	M par	M ímpar
$q > 0$	$\frac{JN}{2Mt} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq \sin^2\left[\frac{\pi}{M}(q-1)\right] - \cos^2\left(\frac{2\pi q}{M}\right)$	$\frac{JN}{2Mt} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq \sin^2\left[\frac{\pi}{2M}(2q-1)\right] - \cos^2\left(\frac{2\pi q}{M}\right)$
$q < 0$	$\frac{JN}{2Mt} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq \sin^2\left(\frac{\pi}{M} q \right) - \cos^2\left(\frac{2\pi q}{M}\right)$	$\frac{JN}{2Mt} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq \sin^2\left[\frac{\pi}{2M}(2 q -1)\right] - \cos^2\left(\frac{2\pi q}{M}\right)$

Tabela 5.IV – Para todos os condensados que satisfazem uma dessas desigualdades, os dubletos associados aos pares de momentos modulares distintos (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ não apresentam cruzamentos.

Concluimos dessa maneira que, para todos os condensados que satisfazem uma das desigualdades tabeladas acima, os dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ não apresentam cruzamentos. Note, a partir da tabela 5.IV, que temos uma condição geral da forma

$$\frac{JN}{2Mt} \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \geq \sin^2[\phi(q, M)] - \cos^2\left(\frac{2\pi q}{M}\right), \quad (5.42)$$

onde a expressão $\phi(q, M)$ pode ser facilmente identificada nessa tabela, para dados q e M .

Novamente temos duas condições distintas, (5.41) e (5.42). A primeira identifica os condensados para os quais os dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação com $\alpha = 0$ não apresentam cruzamentos. A segunda identifica os condensados cujos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação com $\alpha = -\text{sgn}(q)$ não apresentam cruzamentos. Queremos, entretanto, encontrar

uma **condição global** que permita identificar os condensados cujos dubletos não apresentem cruzamentos, quaisquer que sejam os pares de momentos modulares distintos que estejam associados. Podemos investigar qual dessas duas condições é dominante, ou seja, identificar aquela que quando satisfeita garante a validade da outra.

É fácil observar que a condição global será a desigualdade associada ao **maior** valor entre $\cos^2\left(\frac{\pi}{M}\right)$ e $\sin^2[\phi(q, M)] = \cos^2\left[\frac{\pi}{2} - \phi(q, M)\right]$. Para determinar a maior dentre essas duas quantidades devemos comparar os argumentos dos co-senos estabelecendo o seguinte critério

$$\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{M} - \phi(q, M) \begin{cases} > 0 & \Rightarrow \quad (5.41) \quad \text{domina} \\ < 0 & \Rightarrow \quad (5.42) \quad \text{domina.} \end{cases} \quad (5.43)$$

Na tabela 5.III vimos que diferença entre o argumento dos co-senos é **maior ou igual a zero**, quaisquer que sejam q e M .

Concluimos assim, de acordo com o critério (5.43), que a desigualdade (5.41) é global pois além que garantir a ausência de cruzamentos nos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = 0$ também garante a ausência de cruzamentos nos dubletos associados aos pares (k, k') provenientes da equação de vínculo com $\alpha = -\text{sgn}(q)$.

Com auxílio de algumas transformações trigonométricas a condição (5.41) pode ser convenientemente reescrita da forma

$$\frac{2Mt}{JN} \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q-1)\right] \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q+1)\right] \leq \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right). \quad (5.44)$$

Abaixo enunciamos um importante resultado acerca da estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular $q \neq 0$ na região dos 1º e 4º quadrantes.

Todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$, com M par ou ímpar, esteja contido nos 1º e 4º quadrantes e que satisfazem a desigualdade

$$\frac{2Mt}{JN} \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q-1)\right] \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q+1)\right] \leq \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)$$

são **termodinamicamente estáveis**.

Todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ na região dos 1º e 4º quadrantes que satisfazem a condição (5.44) correspondem aos mínimos locais da energia e são ditos **metaestáveis**. É a partir desse resultado que determinaremos, no capítulo 6, o intervalo de valores para os parâmetros de controle a partir do qual detectamos metaestabilidade no sistema.

$$\textbf{(B2)} \quad \bar{\varepsilon}(k, k') \leq -\frac{2JN}{M}$$

Mostraremos nesse caso que as soluções $\Gamma_{(k,k'),I}^{(q)+}$ e $\Gamma_{(k,k'),II}^{(q)+}$ possuem normas negativas. As amplitudes dessas soluções, na situação onde $\bar{\varepsilon}(k, k') \leq -\frac{2JN}{M}$, satisfazem, de acordo com (4.46), a relação

$$\frac{v_k^{(+)}}{u_{k'}^{(+)}} = \frac{v_{k'}^{(+)}}{u_k^{(+)}} = \frac{\left[|\bar{\varepsilon}(k, k')| - \frac{JN}{M} + \sqrt{|\bar{\varepsilon}(k, k')| \left(|\bar{\varepsilon}(k, k')| - \frac{2JN}{M} \right)} \right]}{\frac{JN}{M}}. \quad (5.45)$$

Levando em conta que $|\bar{\varepsilon}(k, k')| > \frac{2JN}{M}$, notamos que a razão acima possui a mesma estrutura das razões (5.29), (5.32) e (5.34).

Dessa maneira verificamos que $v_k^{(+)} / u_{k'}^{(+)} = v_{k'}^{(+)} / u_k^{(+)} > 1$ o que nos permite concluir, de acordo com o critério (5.24), que as soluções $\Gamma_{(k, k'), I}^{(q)+}$ e $\Gamma_{(k, k'), II}^{(q)+}$ possuem normas negativas. Essa conclusão é equivalente à constatação de que as soluções

$\Gamma_{(k, k'), II}^{(q)-}$ e $\Gamma_{(k, k'), I}^{(q)-}$, associadas, respectivamente, às energias

$$E_{(k, k'), II}^{(q)-} = -\bar{\varepsilon}_d(k, k') - \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]}, \quad \text{estritamente negativa, e}$$

$$E_{(k, k'), I}^{(q)-} = \bar{\varepsilon}_d(k, k') - \sqrt{\bar{\varepsilon}(k, k') \left[\bar{\varepsilon}(k, k') + \frac{2JN}{M} \right]}, \quad \text{que pode cruzar, dos ramos 1 e 2,}$$

possuem **normas positivas**.

Observe que nesse caso encontramos os dois mecanismos de instabilidade termodinâmica. No **ramo 1** do duplete encontramos inversão e no **ramo 2** cruzamento. Esse fato, juntamente com a inversão do ramo energético decorrente da diagonalização do termo $\hat{H}_1(q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q))$, para M par, nos permite concluir que todos os condensados com momento modular $q \neq \frac{M}{2}$ tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$ esteja restrito aos 2º e 3º quadrantes são **termodinamicamente instáveis**. Levando em consideração que o condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$ é

termodinamicamente instável, como verificado na subseção 5.2.2, podemos enunciar o resultado abaixo.

Todos os condensados com momento modular q tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$, com M par ou ímpar, esteja contido nos 2º e 3º quadrantes são **termodinamicamente instáveis**, independentemente dos parâmetros de controle t , J , N e M do sistema.

Abaixo seguem dois quadros-resumo dos resultados obtidos nesse capítulo acerca das estabilidades dinâmica e termodinâmica dos condensados com momento modular $q = 0$, $q = \frac{M}{2}$ com M par e $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$.

ESTABILIDADE DINÂMICA			
$q = 0$	$q = \frac{M}{2}$	$q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$	
		1º e 4º quadrantes	2º e 3º quadrantes
<i>SIM</i>	$\frac{JN}{2Mt} \leq \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right)$	<i>SIM</i>	$\cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right) \leq -\frac{JN}{2Mt \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right)}$

Tabela 5.V – Quadro-resumo com os resultados obtidos para a estabilidade dinâmica dos condensados.

ESTABILIDADE TERMODINÂMICA			
$q = 0$	$q = \frac{M}{2}$	$q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$	
		1º e 4º quadrantes	2º e 3º quadrantes
<i>SIM</i>	<i>NÃO</i>	$\frac{2Mt}{JN} \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q-1)\right] \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q+1)\right] \leq \cos\left(\frac{2\pi q}{M}\right)$	<i>NÃO</i>

Tabela 5.VI – Quadro-resumo com os resultados obtidos para a estabilidade termodinâmica dos condensados.

Capítulo 6

Os condensados metaestáveis e a estabilidade nos regimes de Rabi e de Fock

Em geral, o hamiltoniano de um sistema físico depende de um ou mais parâmetros denominados **parâmetros de controle**. O comportamento dinâmico de um sistema pode ser bastante diferente se os parâmetros de controle forem alterados. No estudo da estabilidade dos condensados, realizado no capítulo anterior, verificamos que tanto a estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes quanto a estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular não-nulo nos 1º e 4º quadrantes dependem dos parâmetros de controle t (intensidade do termo de tunelamento), J (intensidade da repulsão local), N (número de átomos) e M (número de sítios da rede óptica). É fácil verificar que essa dependência das condições de estabilidade com os parâmetros de controle é caracterizada pela razão $\frac{nJ}{t}$, onde $n \equiv \frac{N}{M}$. Os condensados com momento modular não-nulo nos 1º e 4º quadrantes, que satisfazem a condição de estabilidade termodinâmica, correspondem aos mínimos locais da energia e são ditos **metaestáveis**. Determinaremos aqui o intervalo de valores para $\frac{nJ}{t}$ a partir do qual detectamos metaestabilidade no sistema. Estudaremos também como a variação dos parâmetros de controle afeta a estabilidade dos condensados. Nesse estudo destacaremos dois limites que surgem em decorrência da competição entre o

tunelamento e a repulsão local: os regimes de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$) e de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$) [23]. O regime de Rabi, limite no qual a coerência entre os estados localizados nos sítios da rede é mantida, é bem descrito pela teoria de Bogoliubov. Já no regime de Fock, onde não há mais coerência, a aplicabilidade da aproximação é questionável.

6.1. Os condensados metaestáveis do sistema.

Nessa seção determinaremos o intervalo de valores para $\frac{nJ}{t}$ a partir do qual detectamos condensados metaestáveis no sistema. No capítulo anterior vimos que todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes que satisfazem a condição

$$2 \frac{t}{nJ} \sin \left[\frac{\pi}{M} (2q - 1) \right] \sin \left[\frac{\pi}{M} (2q + 1) \right] \leq \cos \left(\frac{2\pi q}{M} \right) \quad (6.1)$$

são termodinamicamente estáveis e correspondem a mínimos locais da energia.

Esses condensados são ditos **metaestáveis**.

Note que para $M < 5$ não encontramos metaestabilidade no sistema. É fácil verificar que nessa situação encontramos, nos 1º e 4º quadrantes, apenas o condensado com momento modular $q = 0$. Vale salientar que esse estado de equilíbrio, sempre estável, corresponde ao mínimo global da energia. Já para $M \geq 5$ é possível encontrar metaestabilidade no sistema, entretanto a possibilidade de se detectar esses condensados metaestáveis depende dos parâmetros de controle.

Para se estudar como a variação dos parâmetros de controle, caracterizados pela razão $\frac{nJ}{t}$, afeta a existência de condensados metaestáveis no sistema traçamos, para um dado valor de $M \geq 5$, as curvas de metaestabilidade. Essas curvas são obtidas graficando-se os primeiro e segundo membros da desigualdade (6.1) como função do momento modular $q \neq 0$ dos 1º e 4º quadrantes e para diferentes valores da razão $\frac{nJ}{t}$. Abaixo seguem as curvas de metaestabilidade para o caso específico $M = 19$.

Figura 6.1 – Curvas de metaestabilidade para o caso de uma rede óptica com $M = 19$ sítios.

Observe no gráfico acima que para todos os valores da razão $\frac{nJ}{t}$ tal que $\frac{nJ}{t} \geq 7.44$, todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente estáveis. Já na situação onde $\frac{nJ}{t} < 0.17$ todos esses condensados serão termodinamicamente instáveis, restando apenas o condensado com momento modular $q = 0$ que é sempre estável, independentemente dos parâmetros de controle. Na situação intermediária, onde $0.17 \leq \frac{nJ}{t} < 7.44$, coexistem condensados termodinamicamente estáveis e instáveis. Essa análise pode ser estendida para o caso geral onde o número de sítios da rede é $M \geq 5$.

Vamos denotar por $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ a **razão crítica de total estabilidade termodinâmica**, a partir do qual todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes são metaestáveis. Observe que essa razão crítica pode ser calculada a partir da igualdade em (6.1) para $q = q_{m\acute{a}x}$, onde $q_{m\acute{a}x}$ é o momento modular associado ao maior ângulo $\frac{2\pi}{M}q_{m\acute{a}x}$ contido no 1º quadrante. Assim obtemos

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} = \frac{2 \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q_{m\acute{a}x} - 1)\right] \sin\left[\frac{\pi}{M}(2q_{m\acute{a}x} + 1)\right]}{\cos\left(\frac{2\pi q_{m\acute{a}x}}{M}\right)} \quad (6.2)$$

onde

$$q_{m\acute{a}x} = \begin{cases} \frac{M}{4} - 1 & \text{se } M \bmod 4 = 0 \\ \text{Floor}\left[\frac{M}{4}\right] & \text{se } M \bmod 4 \neq 0. \end{cases} \quad (6.3)$$

Para os valores da razão $\frac{nJ}{t}$, tal que $\frac{nJ}{t} \geq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$, todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente estáveis, e portanto, são todos metaestáveis.

Vamos investigar o comportamento assintótico da razão crítica (6.2) no limite $M \gg 1$ com $n \equiv \frac{N}{M}$ fixo. O estudo desse limite se torna trivial quando parametrizamos o número M de sítios da rede óptica da forma

$$M = 4\chi + \nu \quad (6.4)$$

onde $\chi \in \mathbb{N}$ e $\nu = 0, 1, 2, 3$. Note que através dessa parametrização o número M de sítios pode ser interpretado como uma função multivalente em ν cujos ramos são

rotulados pelo parâmetro natural χ . Essa parametrização mapeia todo o conjunto dos números naturais. Com auxílio da parametrização (6.4) é possível mostrar que a razão crítica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ cresce linearmente no limite $M \gg 1$ com n fixo (*veja* seção **D** do Apêndice). Observe que se $M \bmod 4 = 0$, que corresponde ao caso $v=0$ em (6.4), a razão crítica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ apresenta nesse limite um comportamento linear da forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} \Big|_{M \gg 1, M \bmod 4=0} \approx \frac{1}{\pi} M. \quad (6.5)$$

Na situação onde $M \bmod 4 \neq 0$, que corresponde aos casos $v = 1, 2, 3$ em (6.4), a razão crítica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ cresce linearmente da forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} \Big|_{M \gg 1, M \bmod 4 \neq 0} \approx \frac{4}{\pi v} M. \quad (6.6)$$

Consideremos agora a situação onde todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente instáveis. É fácil verificar que quando os condensados com momento modular $q = \pm 1$ tornam-se termodinamicamente instáveis, somente o condensado com $q = 0$ será estável. Denotando por $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ a **razão crítica de total instabilidade termodinâmica**, a partir da igualdade em (6.1) para $q = \pm 1$ obtemos

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} = \frac{2 \sin\left(\frac{3\pi}{M}\right) \sin\left(\frac{\pi}{M}\right)}{\cos\left(\frac{2\pi}{M}\right)}. \quad (6.7)$$

Para todos os valores da razão $\frac{nJ}{t}$, tal que $0 < \frac{nJ}{t} < \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes são todos termodinamicamente instáveis e nessa situação não encontramos metaestabilidade no sistema.

No limite $M \gg 1$ com n fixo, é fácil mostrar que a razão crítica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ tende assintoticamente a zero da forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} \Big|_{M \gg 1} \approx \frac{6 \pi^2}{M^2}. \quad (6.8)$$

Abaixo segue um quadro-resumo com os intervalos de valores para $\frac{nJ}{t}$ onde detectamos e onde não detectamos metaestabilidade no sistema. Nesse quadro podemos encontrar também as expressões que caracterizam o comportamento assintótico das razões críticas no limite $M \gg 1$ com n fixo.

INTERVALO	METAESTABILIDADE (1º E 4º QUAD.)	COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO ($M \gg 1, n$ fixo)
$0 < \frac{nJ}{t} < \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$	<i>Não encontramos metaestabilidade.</i>	$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} \Big _{M \gg 1} \approx \frac{6 \pi^2}{M^2}$
$\frac{nJ}{t} \geq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$	<i>Todos são metaestáveis.</i>	$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} \Big _{M \gg 1} \approx \begin{cases} \frac{1}{\pi} M & \text{se } M \bmod 4 \quad (\nu = 0) \\ \frac{4}{\pi \nu} M & \text{se } M \bmod 4 \neq 0 \quad (\nu = 1, 2, 3) \end{cases}$

Tabela 6.I – Quadro-resumo com as razões críticas de total estabilidade e instabilidade termodinâmica e os respectivos comportamentos assintóticos no limite $M \gg 1$ com n fixo.

Abaixo segue um gráfico que ilustra o comportamento das razões críticas de total estabilidade $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ e de total instabilidade $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ termodinâmica como função do número $M \geq 5$ de sítios da rede óptica.

Figura 6.2 – Comportamento das razões críticas de total estabilidade e instabilidade termodinâmica como função do número M de sítios da rede óptica.

É possível observar, a partir do gráfico acima, que

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} \geq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} \quad (6.9)$$

A igualdade se dá somente para $5 \leq M \leq 8$. Note que para tais valores de M os únicos momentos modulares não-nulos que encontramos nos 1º e 4º quadrantes são $q = \pm 1$, de modo que a existência de metaestabilidade no sistema depende apenas da condição de estabilidade termodinâmica desses condensados. A desigualdade em

(6.9) se dá para $M \geq 9$. Note que nessa situação encontramos um intervalo de valores intermediários para a razão $\frac{nJ}{t}$ da forma $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} \leq \frac{nJ}{t} < \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ onde podem coexistir condensados termodinamicamente estáveis e instáveis.

É possível verificar que, à medida que a razão $\frac{nJ}{t}$ vai aumentando continuamente a partir de zero, existe uma hierarquia no aparecimento de condensados metaestáveis no sistema. Quando $\frac{nJ}{t}$ assume o valor $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, dado em (6.7), os condensados com momento modular $q = \pm 1$ são os primeiros a se tornarem metaestáveis. Já os condensados com momento modular $q = \pm q_{máx}$, com $q_{máx}$ dado em (6.3), são os últimos a se tornarem metaestáveis e isso ocorre quando $\frac{nJ}{t}$ assume o valor $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$, dado em (6.2).

Com base nos resultados obtidos nessa seção podemos enunciar um importante resultado acerca do intervalo de valores para $\frac{nJ}{t}$ a partir do qual detectamos metaestabilidade no sistema.

Dado o número $M \geq 5$ de sítios da rede óptica, para todos os valores da razão $\frac{nJ}{t}$ tal que $\frac{nJ}{t} \geq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, com

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} = \frac{2 \sin\left(\frac{3\pi}{M}\right) \sin\left(\frac{\pi}{M}\right)}{\cos\left(\frac{2\pi}{M}\right)},$$

é possível detectar **metaestabilidade** no sistema.

À medida que o número M de sítios da rede vai aumentando a razão $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ vai adentrando cada vez mais o intervalo que define o regime de Fock enquanto

que a razão $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ vai adentrando o intervalo que define o regime de Rabi.

Dessa maneira torna-se interessante estudar como a metaestabilidade do sistema é afetada quando o sistema se encontra ou no regime de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$) ou no regime de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$).

Vamos considerar inicialmente um valor $\frac{nJ}{t}$ definido no regime de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$). Observe que é sempre possível determinar um valor para o número M de sítios da rede, que denotaremos por M_{met}^{Rabi} , tal que, para $M \geq M_{met}^{Rabi}$, é sempre possível detectar metaestabilidade no sistema. O valor de M_{met}^{Rabi} pode ser obtido diretamente da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ dado em (6.7). No regime de Rabi a quantidade de condensados metaestáveis que podemos encontrar no sistema é sempre uma fração do número máximo $2q_{máx}$, com $q_{máx}$ dado em (6.3).

Se $\frac{nJ}{t}$ está definido no regime de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$) sempre existirá um valor M_{met}^{Rabi} , obtido a partir da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ dado em (6.7), tal que para $M \geq M_{met}^{Rabi}$ sempre será possível encontrar condensados metaestáveis no sistema. Entretanto o número de condensados metaestáveis é sempre uma fração do número máximo, que é igual à $2q_{máx}$, com $q_{máx}$ dado em (6.3).

Agora vamos considerar um valor $\frac{nJ}{t}$ definido no regime de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$). Observe que nesse caso, qualquer que seja o valor do número M de sítios da rede óptica, sempre detectamos metaestabilidade no sistema. Nessa situação ainda é

sempre possível determinar valores para o número M onde encontramos todos os $2q_{m\acute{a}x}$ condensados metaestáveis no sistema.

No regime de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$) é sempre possível encontrar metaestabilidade no sistema. Além disso, dado um valor da razão $\frac{nJ}{t}$ definido nesse regime, sempre podemos encontrar valores para o número M de sítios onde é possível encontrar todos os $2q_{m\acute{a}x}$ condensados metaestáveis do sistema, com $q_{m\acute{a}x}$ dado em (6.3).

A possibilidade de se detectar condensados metaestáveis no regime de Rabi é um resultado muito positivo para o nosso trabalho, pois esse limite, como mencionado anteriormente, é bem descrito pela aproximação de Bogoliubov.

6.2. A estabilidade dinâmica dos condensados nos regimes de Rabi e de Fock.

No capítulo anterior vimos que os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes são todos dinamicamente estáveis independentemente dos parâmetros de controle do sistema. Por outro lado a estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes, depende diretamente desses parâmetros. Essa dependência com os parâmetros de controle nos leva a querer investigar, nessa seção, como os regimes de Rabi e de Fock afetam a condição de estabilidade dinâmica desses condensados.

O ângulo-crítico Ω_c , dado em (5.22), pode ser reescrito da forma

$$\Omega_c = \cos^{-1} \left[-\frac{\left(\frac{nJ}{t} \right)}{2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{M} \right)} \right] \quad (6.10)$$

de maneira que sua dependência com os parâmetros de controle é completamente caracterizada pela razão $\frac{nJ}{t}$. Note que o ângulo-crítico (6.10) é definido somente no intervalo $0 < \frac{nJ}{t} \leq 2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{M} \right)$. Abaixo segue um gráfico esquemático que ilustra o comportamento do ângulo-crítico Ω_c como função da razão $\frac{nJ}{t}$.

Figura 6.3 – Comportamento do ângulo-crítico Ω_c como função da razão $\frac{nJ}{t}$.

Seja $\frac{2\pi}{M} q_{\min}$ o menor ângulo contido no 2º quadrante, ou seja, o mais próximo pela esquerda de $\frac{\pi}{2}$. No capítulo anterior vimos que se o ângulo-crítico estiver limitado ao intervalo angular $\frac{\pi}{2} < \Omega_c \leq \frac{2\pi}{M} q_{\min}$, com M par ou ímpar, todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes serão dinamicamente estáveis. O intuito agora é determinar para quais valores de $\frac{nJ}{t}$ o ângulo-crítico Ω_c permanece restrito a esse intervalo angular. Note que a razão associada ao ângulo-crítico $\Omega_c = \frac{2\pi}{M} q_{\min}$ pode ser tomada como a razão crítica que define esse intervalo

de valores para $\frac{nJ}{t}$. Se denotarmos por $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ a **razão crítica de total estabilidade dinâmica**, segue de (6.10) que

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} = -2 \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{M} q_{mín}\right) \quad (6.11)$$

com

$$q_{mín} = 1 + Floor\left[\frac{M}{4}\right]. \quad (6.12)$$

Para todos os valores da razão $\frac{nJ}{t}$, tal que $0 < \frac{nJ}{t} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, a região formada pelos 2º e 3º quadrantes será uma zona de estabilidade dinâmica.

Com auxílio da parametrização (6.4) é possível analisar o comportamento assintótico da razão crítica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ (veja seção **D** do Apêndice) no limite $M \gg 1$ com n fixo. Essa razão crítica tende assintoticamente a zero da forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} \Big|_{M \gg 1} \approx \frac{(4 - \nu) \pi^3}{M^3}, \quad (6.13)$$

com $\nu = 0, 1, 2, 3$.

Agora vamos obter o intervalo de valores de $\frac{nJ}{t}$ no qual a região formada pelos 2º e 3º quadrantes é uma zona de instabilidade dinâmica. Observe que, à medida que o ângulo-crítico Ω_c aumenta continuamente, a zona de instabilidade dinâmica vai dominando a zona de estabilidade dinâmica. No caso M ímpar, quando esse ângulo assume o valor $\pi(1 - \frac{1}{M})$, os condensados com momento modular $q = \pm \frac{(M-1)}{2}$ serão os últimos a permanecerem dinamicamente estáveis. Note que quando Ω_c

ultrapassa o valor $\pi(1 - \frac{1}{M})$, ou seja, quando o ângulo-crítico passa a ficar restrito ao intervalo aberto $\pi(1 - \frac{1}{M}) < \Omega_c < \pi$, a região formada pelos 2º e 3º quadrantes automaticamente se torna uma zona de instabilidade dinâmica. Assim, se denotarmos por $(\frac{nJ}{t})_{c, M \text{ ímpar}}^{D-inst.}$ a **razão crítica de total instabilidade dinâmica**, para M ímpar, temos

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_{c, M \text{ ímpar}}^{D-inst.} = 2 \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right) \cos\left(\frac{\pi}{M}\right). \quad (6.14)$$

de modo que para todos os valores da razão $\frac{nJ}{t}$, tal que $\frac{nJ}{t} > \left(\frac{nJ}{t}\right)_{c, M \text{ ímpar}}^{D-inst.}$, a região formada pelos 2º e 3º quadrantes será uma zona de instabilidade dinâmica. No caso M par, a região formada pelos 2º e 3º quadrantes será uma zona de instabilidade dinâmica quando o condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$ se tornar dinamicamente instável. É fácil observar, a partir de (5.8), que esse condensado se torna dinamicamente instável quando $\frac{nJ}{t} > 2 \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right)$, ou seja, a razão $\frac{nJ}{t}$ assume valores para os quais o ângulo-crítico (6.10) não é mais definido. Denotando a razão crítica de total instabilidade dinâmica por $(\frac{nJ}{t})_{c, M \text{ par}}^{D-inst.}$, para M par, temos

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_{c, M \text{ par}}^{D-inst.} = 2 \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right) \quad (6.15)$$

de forma que para todos os valores da razão $\frac{nJ}{t}$, tal que $\frac{nJ}{t} > \left(\frac{nJ}{t}\right)_{c, M \text{ par}}^{D-inst.}$, a região formada pelos 2º e 3º quadrantes será uma zona de instabilidade dinâmica.

No limite onde o número de sítios da rede é pequeno, o fato de M ser par ou ímpar é relevante na determinação da razão crítica de total instabilidade dinâmica. Por outro lado, no limite contrário, quando $M \gg 1$ com n fixo, essa distinção se torna irrelevante pois as razões (6.14) e (6.15) tornam-se praticamente iguais. É fácil observar que nesse limite a razão crítica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$, para M par ou ímpar, tende assintoticamente a zero da forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.} \Big|_{M \gg 1} \approx \frac{2 \pi^2}{M^2}. \quad (6.16)$$

Abaixo segue um quadro-resumo com os intervalos de valores para $\frac{nJ}{t}$ onde todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são ou dinamicamente estáveis ou dinamicamente instáveis. Nesse quadro podemos encontrar também as expressões que caracterizam o comportamento assintótico das razões críticas no limite $M \gg 1$ com n fixo.

INTERVALO	ESTABILIDADE DINÂMICA (2º E 3º QUADRANTES)	COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO ($M \gg 1, n$ fixo)
$0 < \frac{nJ}{t} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$	<i>Todos são dinamicamente estáveis.</i>	$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} \Big _{M \gg 1} \approx \frac{(4 - v) \pi^3}{M^3}$ ($v = 0, 1, 2, 3$)
$\frac{nJ}{t} > \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$	<i>Todos são dinamicamente instáveis.</i>	$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.} \Big _{M \gg 1} \approx \frac{2 \pi^2}{M^2}$

Tabela 6.II – Quadro-resumo com as razões críticas de total estabilidade e instabilidade dinâmica e os respectivos comportamentos assintóticos no limite $M \gg 1$ com n fixo .

Abaixo segue um gráfico que ilustra o comportamento das razões críticas de total estabilidade $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ e de total instabilidade $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ dinâmica como função do número M de sítios da rede óptica. Vale salientar que no gráfico abaixo distinguimos as razões críticas de total instabilidade dinâmica para M par e ímpar.

Figura 6.4 – Comportamento das razões críticas de total estabilidade e instabilidade dinâmica como função do número M de sítios da rede óptica.

Observe, a partir do gráfico acima, que

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.} \quad (6.17)$$

A igualdade é obtida para todos os valores de M tal que $2 \leq M \leq 5$. A desigualdade em (6.17) se dá para $M > 5$. Note que nessa situação encontramos

um intervalo de valores intermediários para a razão $\frac{nJ}{t}$ da forma $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} < \frac{nJ}{t} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ onde podem coexistir condensados dinamicamente estáveis e instáveis.

Aqui também é possível verificar a existência de uma hierarquia no aparecimento de condensados dinamicamente instáveis no sistema. Quando a razão $\frac{nJ}{t}$ está variando dentro do intervalo $0 < \frac{nJ}{t} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ dado em (6.11), todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são dinamicamente estáveis. Quando a razão ultrapassa o valor $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ os condensados com momento modular $q = \pm q_{mín}$, com $q_{mín}$ dado em (6.12), são os primeiros a se tornarem dinamicamente instáveis. No caso M ímpar os condensados com momento modular $q = \pm \frac{(M-1)}{2}$ são os últimos a se tornarem dinamicamente instáveis e isso ocorre exatamente quando a razão $\frac{nJ}{t}$ ultrapassa o valor $\left(\frac{nJ}{t}\right)_{c,M \text{ ímpar}}^{D-inst.}$ dado em (6.14). No caso M par o condensado com momento modular $q = \frac{M}{2}$ é o último a se tornar dinamicamente instável e isso ocorre quando $\frac{nJ}{t}$ ultrapassa o valor $\left(\frac{nJ}{t}\right)_{c,M \text{ par}}^{D-inst.}$ dado em (6.15).

Vamos considerar um valor de $\frac{nJ}{t}$ definido no regime de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$). Observe que, qualquer que seja o valor do número M de sítios da rede óptica, todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes serão dinamicamente instáveis.

Se o sistema está no regime de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$) todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes serão dinamicamente instáveis.

Agora vamos investigar o que ocorre com a estabilidade dinâmica desses condensados quando o sistema se encontra no regime de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$). Se $\frac{nJ}{t}$ está definido no regime de Rabi, para valores pequenos de M , todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes serão dinamicamente estáveis. Entretanto, à medida que M vai se tornando maior, as razões críticas $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ vão adentrando cada vez mais o intervalo que define o regime de Rabi.

Assim, se $\frac{nJ}{t}$ está definido no regime de Rabi, sempre será possível determinar intervalos de valores para M onde podemos encontrar ou todos esses condensados dinamicamente estáveis, ou dinamicamente instáveis e até mesmo onde coexistam condensados dinamicamente estáveis e instáveis.

Note que, para $M \leq M_{D-est.}^{Rabi}$, com $M_{D-est.}^{Rabi}$ obtido da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes podem ser todos dinamicamente estáveis. Já para $M \geq M_{D-inst.}^{Rabi}$, com $M_{D-inst.}^{Rabi}$ obtido da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$, todos esses condensados podem ser dinamicamente instáveis. Na situação onde $M_{D-est.}^{Rabi} < M < M_{D-inst.}^{Rabi}$ coexistem condensados dinamicamente estáveis e instáveis.

Dado $\frac{nJ}{t}$ definido no regime de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$), sempre será possível determinar intervalos de valores para M onde

- se $M \leq M_{D-est.}^{Rabi}$, com $M_{D-est.}^{Rabi}$ obtido da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ dado em (6.11): todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes podem ser **dinamicamente estáveis**;
- se $M \geq M_{D-inst.}^{Rabi}$, com $M_{D-inst.}^{Rabi}$ obtido da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ dado em (6.14) ou (6.15) dependendo do fato de M ser ímpar ou par: todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes podem ser **dinamicamente instáveis**; e
- se $M_{D-est.}^{Rabi} < M < M_{D-inst.}^{Rabi}$: coexistem condensados dinamicamente estáveis e instáveis.

Finalizaremos nosso estudo verificando a existência de uma hierarquia na magnitude das razões $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$, $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$. De (6.9) e (6.17) sabemos, respectivamente, que

$$\begin{cases} \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} \\ \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.} \end{cases} \quad (6.18)$$

Vamos esboçar abaixo os gráficos das razões críticas de total instabilidade dinâmica e termodinâmica como função do número $M \geq 5$ de sítios da rede óptica.

Figura 6.5 – Gráfico comparativo entre as razões críticas de total instabilidade dinâmica para condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes e de total instabilidade termodinâmica para os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes.

Observe, a partir do gráfico acima, que $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.} < \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ qualquer que seja $M \geq 5$. Levando em consideração essa desigualdade e (6.18), obtemos uma hierarquia nas magnitudes das razões críticas da forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.} < \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}. \quad (6.19)$$

Podemos extrair de (6.19) duas conclusões:

- no limite onde todos os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente estáveis todos os condensados com

momento modular na região dos 2º e 3º quadrantes são dinamicamente instáveis;

- na situação onde todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são dinamicamente estáveis todos os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente instáveis.

Capítulo 7

Conclusão

Os objetivos dessa dissertação foram estudar as propriedades e as estabilidades dinâmica e termodinâmica dos condensados numa rede óptica periódica topologicamente restrita a uma configuração anelar de M sítios. Admitimos que a dinâmica de um gás de bósons interagentes num potencial de rede óptica periódica pode ser capturada pelo modelo de Bose-Hubbard no qual o hamiltoniano do sistema possui um termo que descreve o tunelamento atômico entre sítios vizinhos (aproximação de tight-binding) e um termo que descreve a interação repulsiva entre átomos localizados no mesmo sítio.

Primeiramente deduzimos e resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii para os condensados. Examinando as soluções vimos que o sistema se condensa em estados com momento modular q bem definido. Os possíveis valores do momento modular estão relacionados com as M -ésimas raízes da unidade e podem assumir qualquer valor inteiro dentro do intervalo (2.15). É interessante observar que estados com momento modular bem definido formam uma base para os estados do sistema e diagonalizam o termo de tunelamento do hamiltoniano de Bose-Hubbard.

A partir do hamiltoniano de Bose-Hubbard e do operador número total de átomos, ambos na representação do momento modular, foi obtido o hamiltoniano grande-canônico do sistema. Deslocando o operador de criação e aniquilação de

momento modular igual ao do condensado separamos, no hamiltoniano grande-canônico, o termo que descreve o condensado dos termos que descrevem as excitações. A hipótese central da teoria de Bogoliubov é que a fração de átomos fora do condensado, ou seja, a depleção é desprezível. Dessa maneira o hamiltoniano pode ser escrito como a soma de um termo constante e um termo quadrático no produto dos operadores deslocados. O termo quadrático do hamiltoniano é identificado como sendo o hamiltoniano efetivo do sistema, que depende do momento modular do condensado, e o espectro das excitações coletivas é determinado pela sua diagonalização.

Para determinar as excitações coletivas identificamos os momentos modulares que são acoplados no hamiltoniano efetivo. Esse acoplamento envolve somente pares de momentos modulares idênticos ou distintos. Identificados esses pares verificamos que o hamiltoniano efetivo é diagonal em blocos de dimensões 2×2 e 4×4 . Os blocos de dimensão 2×2 envolvem um único momento modular e os blocos de dimensão 4×4 envolvem pares de momentos modulares distintos. Vimos que a diagonalização de um bloco que envolve um único momento modular resulta num único ramo energético e a diagonalização de um bloco que envolve um par de momentos modulares distintos resulta em dois ramos energéticos que definem um dubleto. Esses dubletos são degenerados somente para os casos $q = 0$ e $q = \frac{M}{2}$, o último exclusivo para M par. Verificamos também que sempre existe um modo de energia zero com momento modular igual ao do condensado. É bem conhecido que

esse modo surge em decorrência da violação da conservação do número de átomos introduzida pela aproximação de Bogoliubov.

No contexto da teoria de Bogoliubov estudamos as estabilidades dinâmica e termodinâmica dos condensados. No estudo da estabilidade dinâmica vimos que todos os condensados com momento modular q tal que o ângulo $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 1º e 4º quadrantes são dinamicamente estáveis, ou seja, são caracterizados por um espectro de excitação real. Já a estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular q tal que $\frac{2\pi q}{M}$ esteja contido nos 2º e 3º quadrantes depende dos parâmetros de controle do sistema t , N , M e J . Dentro da teoria, dizemos que um condensado é termodinamicamente instável, se existe, no espectro das excitações coletivas, pelo menos um ramo energético com norma positiva e energia negativa. Nessa dissertação vimos que existem dois mecanismos de instabilidade termodinâmica. Um desses mecanismos, o cruzamento, ocorre quando a energia do ramo de norma positiva se anula e troca de sinal. Já a inversão ocorre quando a energia do ramo de norma positiva é estritamente negativa. No espectro das excitações coletivas a existência de um único ramo energético com um desses mecanismos de instabilidade é suficiente para atestar a instabilidade termodinâmica do condensado. Os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são todos termodinamicamente instáveis. O mecanismo de instabilidade desses condensados é a inversão. A estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes depende dos parâmetros de controle do sistema, exceto $q = 0$ que é termodinamicamente estável sempre. Quando esses

condensados são termodinamicamente instáveis o mecanismo de instabilidade é o cruzamento.

No estudo da estabilidade dos condensados verificamos que tanto a estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes quanto a estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular não-nulo nos 1º e 4º quadrantes dependem dos parâmetros de controle t , N , M e J . E ainda verificamos que essa dependência das condições de estabilidade com os parâmetros de controle é caracterizada pela razão $\frac{nJ}{t}$, com $n \equiv \frac{N}{M}$.

Os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes, quando termodinamicamente estáveis, correspondem aos mínimos locais da energia. Esses condensados, ditos metaestáveis, são candidatos a apresentarem o fenômeno da superfluidez. No nosso estudo concluimos que para $M < 5$ não é possível detectar condensados metaestáveis no sistema pois, nessa situação, encontramos, nos 1º e 4º quadrantes, apenas o condensado com momento modular $q = 0$, que corresponde ao mínimo global da energia. No caso $M \geq 5$, para todos os valores da razão $\frac{nJ}{t}$ tal que $\frac{nJ}{t} \geq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ dado em (6.7), vimos que é possível detectar metaestabilidade no sistema.

Determinamos, nessa análise, o intervalo de valores para a razão $\frac{nJ}{t}$ a partir do qual os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes são ou todos termodinamicamente estáveis ou todos termodinamicamente instáveis. Abaixo seguem esses intervalos.

- $0 < \frac{nJ}{t} < \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ dado em (6.7): todos os condensados com momento modular $q \neq 0$ nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente instáveis. Nessa situação não encontramos metaestabilidade e somente o condensado com $q = 0$ é termodinamicamente estável;
- $\frac{nJ}{t} \geq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ dado em (6.2): os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes são todos termodinamicamente estáveis, ou seja, são todos metaestáveis.

Analizamos como a metaestabilidade do sistema é afetada quando este se encontra ou no regime de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$) ou no regime de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$). Se $\frac{nJ}{t}$ está definido no regime de Rabi sempre existirá um valor M_{met}^{Rabi} , obtido a partir da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-inst.}$ dado em (6.7), tal que para $M \geq M_{met}^{Rabi}$ encontraremos condensados metaestáveis no sistema. Entretanto o número de condensados metaestáveis é sempre uma fração do número máximo, que é igual à $2q_{máx}$, com $q_{máx}$ dado em (6.3). A possibilidade de se detectar condensados metaestáveis nesse regime foi um resultado muito positivo para o nosso trabalho, pois esse limite é bem descrito pela aproximação de Bogoliubov.

Por outro lado, se $\frac{nJ}{t}$ está definido no regime de Fock, é sempre possível encontrar condensados metaestáveis no sistema. Além disso é possível obter valores para o número M de sítios da rede óptica onde encontramos todos os $2q_{máx}$ condensados metaestáveis do sistema, com $q_{máx}$ dado em (6.3). Entretanto, a

aplicabilidade da aproximação de Bogoliubov nesse regime é questionável, pois nesse limite não há coerência entre os estados localizados nos sítios da rede.

Para a estabilidade dinâmica dos condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes fizemos uma análise análoga à realizada no estudo da metaestabilidade. Determinamos o intervalo de valores para a razão $\frac{nJ}{t}$ a partir do qual os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são ou todos dinamicamente estáveis ou todos dinamicamente instáveis. Abaixo seguem esses intervalos.

- $0 < \frac{nJ}{t} \leq \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ dado em (6.11): os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são todos dinamicamente estáveis;
- $\frac{nJ}{t} > \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$, com $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ dado em (6.14) para M ímpar ou (6.15) para M par: os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são todos dinamicamente instáveis.

Foi trivial verificar que se o sistema se encontra no regime de Fock todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são dinamicamente instáveis. Por outro lado, no regime de Rabi, sempre será possível determinar intervalos de valores para M onde todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes podem ser ou dinamicamente estáveis, ou dinamicamente instáveis e até mesmo onde coexistam condensados dinamicamente estáveis e instáveis. Assim, se $\frac{nJ}{t}$ está definido no regime de Rabi, verificamos que para $M \leq M_{D-est.}^{Rabi}$, com $M_{D-est.}^{Rabi}$ obtido da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ dado em

(6.11), todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes podem ser dinamicamente estáveis. Já para $M \geq M_{D-inst.}^{Rabi}$, com $M_{D-inst.}^{Rabi}$ obtido da igualdade $\frac{nJ}{t} = \left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-inst.}$ dado em (6.14) ou (6.15) dependendo do fato de M ser ímpar ou par, todos esses condensados podem ser dinamicamente instáveis. Na situação $M_{D-est.}^{Rabi} < M < M_{D-inst.}^{Rabi}$ coexistem condensados dinamicamente estáveis e instáveis no sistema.

Finalmente, vimos que no limite onde todos os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente estáveis, todos os condensados com momento modular na região dos 2º e 3º quadrantes são dinamicamente instáveis. Já na situação onde todos os condensados com momento modular nos 2º e 3º quadrantes são dinamicamente estáveis, todos os condensados com momento modular nos 1º e 4º quadrantes são termodinamicamente instáveis.

Apêndice

A. Os condensados com momento modular $q = \pm \frac{M}{4}$.

No estudo da estabilidade dos condensados com momento modular $q \neq 0, \frac{M}{2}$ afirmamos que os estados de equilíbrio com momento modular $q = \pm \frac{M}{4}$, com M múltiplo de quatro, apresentavam um comportamento anômalo. Nesse apêndice destacaremos as peculiaridades desses condensados. O hamiltoniano efetivo (3.16), especificamente para $q = \pm \frac{M}{4}$, assume a forma

$$\hat{H}_{eff}^{(q=\pm\frac{M}{4})} = \sum_{k \in \Lambda} \left(\varepsilon_k^{(q=\pm\frac{M}{4})} + \frac{JN}{M} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{JN}{2M} \sum_{k, k' \in \Lambda} \delta_M(k + k' \mp \frac{M}{2}) (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{k'}) \quad (\text{A.1})$$

com

$$\varepsilon_k^{(q=\pm\frac{M}{4})} = -2t \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right). \quad (\text{A.2})$$

Com auxílio das parametrizações tabeladas em 3.VI e 3.IX identificamos os pares de momentos modulares que são acoplados no hamiltoniano efetivo (A.1). Segue na tabela abaixo as parametrizações para os casos $q = \pm \frac{M}{4}$.

	$q = +\frac{M}{4}$	$q = -\frac{M}{4}$
$\alpha = 0$	$\left(k(p) = \frac{M}{4} + p, k'(p) = \frac{M}{4} - p\right)$ $0 \leq p \leq \frac{M}{4}$	$\left(k(p) = -\frac{M}{4} + p, k'(p) = -\frac{M}{4} - p\right)$ $-\left(\frac{M}{4} - 1\right) \leq p \leq 0$
$\alpha = -\text{sgn}(q)$	$\left(k(p) = -\frac{M}{4} + p, k'(p) = -\frac{M}{4} - p\right)$ $-\left(\frac{M}{4} - 1\right) \leq p \leq 0$	$\left(k(p) = \frac{M}{4} + p, k'(p) = \frac{M}{4} - p\right)$ $0 \leq p \leq \frac{M}{4}$

Tabela A.I – Parametrização dos pares de momentos modulares que são acoplados no hamiltoniano efetivo para os casos $q = \pm \frac{M}{4}$.

Identificados os pares de momentos modulares que são acoplados, o hamiltoniano efetivo pode ser escrito como uma soma de termos da forma

$$\hat{H}_{eff}^{(\pm \frac{M}{4})} = \hat{H}_1\left(\frac{M}{4}\right) + \hat{H}_1\left(-\frac{M}{4}\right) + \sum_{|k| > |k'|} \hat{H}_2(k, k') \quad (\text{A.3})$$

onde

$$\hat{H}_1\left(\frac{M}{4}\right) = \frac{JN}{M} \hat{b}_{\frac{M}{4}}^\dagger \hat{b}_{\frac{M}{4}} + \frac{JN}{2M} \left(\hat{b}_{\frac{M}{4}}^\dagger \hat{b}_{\frac{M}{4}}^\dagger + \hat{b}_{\frac{M}{4}} \hat{b}_{\frac{M}{4}} \right), \quad (\text{A.4})$$

$$\hat{H}_1\left(-\frac{M}{4}\right) = \frac{JN}{M} \hat{b}_{-\frac{M}{4}}^\dagger \hat{b}_{-\frac{M}{4}} + \frac{JN}{2M} \left(\hat{b}_{-\frac{M}{4}}^\dagger \hat{b}_{-\frac{M}{4}}^\dagger + \hat{b}_{-\frac{M}{4}} \hat{b}_{-\frac{M}{4}} \right), \quad (\text{A.5})$$

$$\hat{H}_2(k, k') = \left(\varepsilon_k^{(q)} + \frac{JN}{M} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \left(\varepsilon_{k'}^{(q)} + \frac{JN}{M} \right) \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_{k'} + \frac{JN}{M} \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{k'} \right). \quad (\text{A.6})$$

(i) A diagonalização dos blocos de dimensão 2×2 associados, respectivamente, aos termos $\hat{H}_1\left(\frac{M}{4}\right)$ e $\hat{H}_1\left(-\frac{M}{4}\right)$, que envolvem um único momento modular, resulta em energias de excitação nulas.

O primeiro ponto que nos chama a atenção é a existência de **dois modos de energia zero** correspondentes aos momentos modulares $k = \pm \frac{M}{4}$. Podemos notar que os termos $\hat{H}_1\left(\frac{M}{4}\right)$ e $\hat{H}_1\left(-\frac{M}{4}\right)$ são idênticos aos termos (3.36), (3.40) e (3.44), relativos aos modos de energia zero dos casos $q = 0$, $q = \frac{M}{2}$ e $q \neq 0, \frac{M}{2}$. Concluimos assim que

$$E_{\frac{M}{4}}^{(\pm \frac{M}{4})} = E_{-\frac{M}{4}}^{(\pm \frac{M}{4})} = 0. \quad (\text{A.7})$$

(ii) Os ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos blocos de dimensão 4×4 associados aos termos $\hat{H}_2(k, k')$, que envolvem pares de momentos modulares distintos, possuem energia finita e norma zero.

O segundo ponto que nos chama a atenção é o fato dos ramos energéticos decorrentes da diagonalização dos termos $\hat{H}_2(k, k')$ possuírem energia de excitação finita e norma zero. Vamos retomar os resultados da seção 4.3 do capítulo 4 para o caso $q = \pm \frac{M}{4}$. Note que as energias de partícula independente (A.2) dos estados de um par de estados (k, k') com momentos modulares distintos se relacionam da forma

$$\varepsilon_{k'}^{(q=\pm\frac{M}{4})} = -\varepsilon_k^{(q=\pm\frac{M}{4})} = 2t \cos\left(\frac{2\pi k}{M}\right). \quad (\text{A.8})$$

Podemos verificar a relação (A.8) substituindo diretamente a expressão dos pares de estados tabelados em A.I na expressão (A.2). Como consequência de (A.8) segue, a partir de (4.40) e (4.41), que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{ramo 1 :} \quad E_{(k,k'),I}^{(\pm\frac{M}{4})+} = \bar{\varepsilon}_d(k, k'); E_{(k,k'),II}^{(\pm\frac{M}{4})-} = -\bar{\varepsilon}_d(k, k') \\ \text{ramo 2 :} \quad E_{(k,k'),II}^{(\pm\frac{M}{4})+} = -\bar{\varepsilon}_d(k, k'); E_{(k,k'),I}^{(\pm\frac{M}{4})-} = \bar{\varepsilon}_d(k, k'). \end{array} \right. \quad (\text{A.9})$$

Observe que as energias dos dubletos são não-nulas. Entretanto, a partir da relação (4.46), verificamos que

$$v_{k'}^{(+)} / u_k^{(+)} = v_k^{(+)} / u_{k'}^{(+)} = -1 \quad (\text{A.10})$$

o que permite concluir que os **ramos 1 e 2**, que definem os dubletos associados aos pares (k, k') , possuem norma zero, e portanto os modos de excitação são todos não-

normalizáveis. Tal fato indica que não é possível obter uma transformação de Bogoliubov que torne o hamiltoniano efetivo (A.1) diagonal.

Note que, para o caso onde o número M de sítios da rede óptica é múltiplo de quatro, os condensados com momento modular $q = \pm \frac{M}{4}$ estão nas fronteiras que separam os condensados termodinamicamente instáveis (2º e 3º quadrantes) dos condensados que **podem** ser termodinamicamente estáveis (1º e 4º quadrantes). Neste último caso devemos nos recordar que a estabilidade termodinâmica dos condensados com momento modular na região dos 1º e 4º quadrantes depende dos parâmetros de controle do sistema.

B. A transformação de Bogoliubov que diagonaliza o hamiltoniano efetivo.

Inicialmente vamos expor o procedimento geral para determinar a transformação de Bogoliubov que diagonaliza um hamiltoniano bosônico quadrático. O processo de diagonalização de um hamiltoniano bosônico quadrático da forma

$$\hat{H} = \sum_{i,j} A_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(B_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger + B_{ij}^* \hat{b}_j \hat{b}_i \right), \quad (\text{B.1})$$

com $A_{ij} = A_{ji}^*$ e $B_{ij} = B_{ji}$, consiste em determinar uma transformação canônica que define os **operadores de quase-partícula** da forma

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{B}}_n^\dagger = \sum_i \left(u_i^n \hat{b}_i^\dagger - v_i^n \hat{b}_i \right) \\ \hat{\mathbf{B}}_n = \sum_i \left(u_i^{n*} \hat{b}_i - v_i^{n*} \hat{b}_i^\dagger \right). \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Em virtude da canonicidade dessa transformação os coeficientes complexos u_i^n e v_i^n satisfazem a relação

$$\sum_i |u_i^n|^2 - |v_i^n|^2 = 1. \quad (\text{B.3})$$

Os coeficientes u_i^n e v_i^n são determinados impondo que a transformação (B.2) diagonaliza o hamiltoniano quadrático (B.1). Essa condição é satisfeita se tais coeficientes obedecem a equação [21]

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^n \\ v^n \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^n \\ v^n \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

onde $\begin{pmatrix} u^n & v^n \end{pmatrix}$ denota a solução de (B.4) com autovalor E_n . A equação (B.4) é uma equação de autovalores para a matriz hermiteana

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

com respeito à métrica bosônica $\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$, onde I é a matriz identidade.

Em termos das quase-partículas o hamiltoniano (B.1) assume a forma diagonal

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m_I} + \sum_n E_n \hat{\mathbf{B}}_n^\dagger \hat{\mathbf{B}}_n + \frac{1}{2} \sum_n E_n - \frac{1}{2} \text{Tr } A, \quad (\text{B.6})$$

onde o primeiro termo em (B.6) se refere ao modo de energia zero do sistema.

Na dissertação vimos que o hamiltoniano efetivo é diagonal em blocos de dimensões 2×2 e 4×4 . Os blocos de dimensão 2×2 envolvem um único momento modular enquanto que os blocos de dimensão 4×4 envolvem momentos modulares distintos.

Um dos termos que envolve um único momento modular é $\hat{H}_1(q)$, de momento modular igual ao do condensado. Esse termo corresponde ao modo de energia zero cuja norma é nula. Nesse caso a transformação de Bogoliubov não se aplica. O termo $\hat{H}_1(q)$ assume, a menos de uma constante, uma estrutura cinética da forma

$$\hat{H}_1(q) = \frac{\hat{\mathbf{P}}_q^2}{2m_I} \quad (\text{B.7})$$

onde $\hat{\mathbf{P}}_q = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{b}_q^\dagger + \hat{b}_q)$ e $m_I \equiv \frac{M}{2JN}$.

No caso M par encontramos ainda o termo $\hat{H}_1(k)$, que envolve o momento modular

$$k \equiv \begin{cases} \frac{M}{2} & se \quad q = 0 \\ 0 & se \quad q = \frac{M}{2} \\ q - \frac{M}{2} \text{sgn}(q) & se \quad q \neq 0, \frac{M}{2}. \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

Vimos que a diagonalização do bloco associado a esse termo determina um único ramo energético. As quase-partículas que diagonalizam esse termo são dadas explicitamente por

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{B}}_k \\ \hat{\mathbf{B}}_k^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k^* & -v_k^* \\ -v_k & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_k \\ \hat{b}_k^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{B.9})$$

$q = 0$	$q = \frac{M}{2}$	$q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$	
		1° e 4° quadrantes	2° e 3° quadrantes
$\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\frac{M}{2}}^{(+)} \\ v_{\frac{M}{2}}^{(+)} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_0^{(+)*} \\ u_0^{(+)*} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)} \\ v_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)*} \\ u_{q-\frac{M}{2}\text{sgn}(q)}^{(+)*} \end{pmatrix}$

Tabela B.I – Amplitudes que definem a transformação de Bogoliubov para o termo $\hat{H}_1(k)$, exclusivo para M par, com k dado em (B.8).

Na tabela acima identificamos as amplitudes u_k e v_k , que definem as transformações (B.9), com as amplitudes das **soluções de norma positiva** obtidas a partir da diagonalização do bloco associado ao termo $\hat{H}_1(k)$. As amplitudes dessas soluções são determinadas a partir das equações (4.10), (4.25) e (4.35), respectivamente, para $q = 0$, $q = \frac{M}{2}$ e $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$.

No estudo do espectro das excitações coletivas encontramos, a partir da diagonalização dos blocos de dimensão 4×4 associados aos termos $\hat{H}_2(k, k')$, dupletos de ramos energéticos. Cada um dos ramos energéticos do duplete foi rotulado pelos números **1** e **2**. A energia de um ramo energético corresponde ao elemento do par $(E, -E)$ associada a solução de norma positiva. As quase-partículas que diagonalizam um particular termo $\hat{H}_2(k, k')$ são dadas por

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{B}}_{(k,k'),1} \\ \hat{\mathbf{B}}_{(k,k'),2} \\ \hat{\mathbf{B}}_{(k,k'),1}^\dagger \\ \hat{\mathbf{B}}_{(k,k'),2}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{1,k}^* & u_{1,k'}^* & -v_{1,k}^* & -v_{1,k'}^* \\ u_{2,k}^* & u_{2,k'}^* & -v_{2,k}^* & -v_{2,k'}^* \\ -v_{1,k} & -v_{1,k'} & u_{1,k} & u_{1,k'} \\ -v_{2,k} & -v_{2,k'} & u_{2,k} & u_{2,k'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_k \\ \hat{b}_{k'} \\ \hat{b}_k^\dagger \\ \hat{b}_{k'}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

$q = 0$	$q = \frac{M}{2}$	$q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$	
		1° e 4° quadrantes	2° e 3° quadrantes
$\begin{pmatrix} u_{1,k} \\ u_{1,k'} \\ v_{1,k} \\ v_{1,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} \\ 0 \\ 0 \\ v_{-k}^{(+)} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_{1,k} \\ u_{1,k'} \\ v_{1,k} \\ v_{1,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ v_{-k}^{(+)*} \\ u_k^{(+)*} \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_{1,k} \\ u_{1,k'} \\ v_{1,k} \\ v_{1,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k^{(+)} \\ 0 \\ 0 \\ v_{k'}^{(+)} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_{1,k} \\ u_{1,k'} \\ v_{1,k} \\ v_{1,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ v_{k'}^{(+)*} \\ u_k^{(+)*} \\ 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} u_{2,k} \\ u_{2,k'} \\ v_{2,k} \\ v_{2,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ u_{-k}^{(+)} \\ v_k^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_{2,k} \\ u_{2,k'} \\ v_{2,k} \\ v_{2,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_k^{(+)*} \\ 0 \\ 0 \\ u_{-k}^{(+)*} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_{2,k} \\ u_{2,k'} \\ v_{2,k} \\ v_{2,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ u_{k'}^{(+)} \\ v_k^{(+)} \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} u_{2,k} \\ u_{2,k'} \\ v_{2,k} \\ v_{2,k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_k^{(+)*} \\ 0 \\ 0 \\ u_{k'}^{(+)*} \end{pmatrix}$

Tabela B.II – Amplitudes que definem a transformação de Bogoliubov para o termo $\hat{H}_2(k, k')$.

Na tabela acima identificamos as amplitudes $(u_{1,k}, u_{1,k'}, v_{1,k}, v_{1,k'})$ e $(u_{2,k}, u_{2,k'}, v_{2,k}, v_{2,k'})$, que definem as transformações (B.10), com as amplitudes das **soluções de norma positiva** obtidas a partir da diagonalização dos blocos associados aos termos $\hat{H}_2(k, k')$. As amplitudes dessas soluções são determinadas a partir de (4.19), (4.29) e (4.46), respectivamente, para $q = 0$, $q = \frac{M}{2}$ e $q \neq 0, \pm \frac{M}{4}, \frac{M}{2}$.

C. Cálculo da flutuação do número de átomos em cada sítio da rede óptica: caso $q = 0$.

Calcularemos a flutuação σ_n^2 do número de átomos em cada sítio da rede óptica para o caso específico onde o estado fundamental possui momento modular $q = 0$ e o número M de sítios é ímpar. O operador número de átomos do λ -ésimo sítio, que denotaremos por $\hat{n}_\lambda$, é dado por

$$\hat{n}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda, \quad (\text{C.1})$$

onde $\hat{a}_\lambda^\dagger$ é o operador que cria um átomo bosônico no λ -ésimo sítio da rede óptica. A flutuação σ_n^2 do número de átomos em cada sítio da rede óptica é definida pela expressão

$$\sigma_n^2 = \langle \hat{n}_\lambda^2 \rangle - \langle \hat{n}_\lambda \rangle^2 \quad (\text{C.2})$$

onde as médias $\langle \hat{n}_\lambda \rangle$ e $\langle \hat{n}_\lambda^2 \rangle$ são calculadas com respeito ao estado fundamental do sistema. O estado fundamental é identificado como sendo o vácuo das quase-partículas que diagonalizam o hamiltoniano efetivo.

Invertendo o operador (2.23) e substituindo o resultado em (C.1), obtemos o operador número $\hat{n}_\lambda$ na representação do momento modular

$$\hat{n}_\lambda = \frac{1}{M} \sum_{k_1, k_2 \in \Lambda} e^{i \frac{2\pi}{M} (k_2 - k_1) \lambda} \hat{A}_{k_1}^\dagger \hat{A}_{k_2}. \quad (\text{C.3})$$

com $\Lambda \equiv \left[-\frac{(M-1)}{2}, \frac{(M-1)}{2} \right]$. Introduzindo a transformação (3.4) em (C.3) e

removendo o modo de energia zero $k = 0$ obtemos

$$\hat{n}_\lambda = \frac{|z_0|^2}{M} + \frac{z_0^*}{M} \sum_{k \neq 0} e^{i\frac{2\pi k}{M}\lambda} \hat{b}_k + \frac{z_0}{M} \sum_{k \neq 0} e^{-i\frac{2\pi k}{M}\lambda} \hat{b}_k^\dagger + \frac{1}{M} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} e^{i\frac{2\pi}{M}(k_2 - k_1)\lambda} \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2}. \quad (\text{C.4})$$

Vamos denotar por $|0\rangle$ o vácuo normalizado das quase-partículas $\hat{B}_{(k,-k),1}$ e $\hat{B}_{(k,-k),2}$. Observe que, invertendo a transformação de Bogoliubov (B.10), obtida na seção anterior para o caso $q = 0$, os operadores deslocados $\hat{b}_k$ podem ser escritos em termos das quase-partículas da forma

$$\begin{aligned} \hat{b}_k^\dagger &= u_k^* \hat{B}_{(k,-k),1}^\dagger + v_k \hat{B}_{(k,-k),2} \\ \hat{b}_k &= u_k \hat{B}_{(k,-k),1} + v_k^* \hat{B}_{(k,-k),2}^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

O valor médio do número de átomos em cada sítio, com respeito ao vácuo normalizado $|0\rangle$ das quase-partículas, $\langle \hat{n}_\lambda \rangle \equiv \langle 0 | \hat{n}_\lambda | 0 \rangle$, é dado por

$$\langle \hat{n}_\lambda \rangle = \frac{|z_0|^2}{M} + \frac{1}{M} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} e^{i\frac{2\pi}{M}(k_2 - k_1)\lambda} \langle \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} \rangle. \quad (\text{C.6})$$

onde a média $\langle \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} \rangle$ é a contração dos operadores $\hat{b}_{k_1}^\dagger$ e $\hat{b}_{k_2}$, que denotaremos por $\underline{\hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2}}$, relativa ao vácuo normalizado das quase-partículas. Na tabela abaixo destacamos as contrações que utilizaremos nos cálculos de valores médios nessa seção.

$\underbrace{\hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2}} = v_{k_1} ^2 \delta_{k_1, k_2}$	$\underbrace{\hat{b}_{k_1} \hat{b}_{k_2}} = u_{k_1} v_{-k_1}^* \delta_{k_1, -k_2}$
$\underbrace{\hat{b}_{k_1} \hat{b}_{k_2}^\dagger} = u_{k_1} ^2 \delta_{k_1, k_2}$	$\underbrace{\hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2}^\dagger} = v_{k_1} u_{-k_1}^* \delta_{-k_1, k_2}$

Tabela C.I – Contrações utilizadas no cálculo das médias.

A partir da tabela C.I, onde identificamos a contração $\underbrace{\hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2}}$, obtemos para $\langle \hat{n}_\lambda \rangle$

uma expressão da forma

$$\langle \hat{n}_\lambda \rangle = \frac{|z_0|^2}{M} + \frac{1}{M} \sum_{k \neq 0} |v_k|^2. \quad (\text{C.7})$$

O operador $\hat{n}_\lambda^2$ é obtido quadrando-se o operador $\hat{n}_\lambda$ dado em (C.4). Assim a forma explícita de $\hat{n}_\lambda^2$, em termos dos operadores deslocados, é dada por

$$\begin{aligned} \hat{n}_\lambda^2 = & \frac{|z_0|^4}{M^2} + \frac{2|z_0|^2 z_0^*}{M^2} \sum_{k \neq 0} e^{i \frac{2\pi k}{M} \lambda} \hat{b}_k + \frac{2|z_0|^2 z_0}{M^2} \sum_{k \neq 0} e^{-i \frac{2\pi k}{M} \lambda} \hat{b}_k^\dagger + \frac{2|z_0|^2}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{M} (k_2 - k_1) \lambda} \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} + \\ & + \frac{z_0^{*2}}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{M} (k_2 + k_1) \lambda} \hat{b}_{k_1} \hat{b}_{k_2} + \frac{z_0^2}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} e^{-i \frac{2\pi}{M} (k_2 + k_1) \lambda} \hat{b}_{k_2}^\dagger \hat{b}_{k_1}^\dagger + \frac{|z_0|^2}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} e^{-i \frac{2\pi}{M} (k_2 - k_1) \lambda} \hat{b}_{k_1} \hat{b}_{k_2}^\dagger + \\ & + \frac{|z_0|^2}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{M} (k_2 - k_1) \lambda} \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} + \frac{z_0^*}{M^2} \sum_{k_1, k_2, k_3 \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{M} (k_3 + k_2 - k_1) \lambda} \hat{b}_{k_3} \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} + \\ & + \frac{z_0}{M^2} \sum_{k_1, k_2, k_3 \neq 0} e^{-i \frac{2\pi}{M} (k_3 + k_2 - k_1) \lambda} \hat{b}_{k_2}^\dagger \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_3} + \frac{z_0^*}{M^2} \sum_{k_1, k_2, k_3 \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{M} (k_3 + k_2 - k_1) \lambda} \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_3} + \\ & + \frac{z_0}{M^2} \sum_{k_1, k_2, k_3 \neq 0} e^{-i \frac{2\pi}{M} (k_3 + k_2 - k_1) \lambda} \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_2}^\dagger \hat{b}_{k_1} + \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4 \neq 0} e^{i \frac{2\pi}{M} (k_2 + k_4 - k_1 - k_3) \lambda} \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_4}. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Queremos calcular, a partir de (C.8), a média quadrática $\langle \hat{n}_\lambda^2 \rangle$ relativa ao vácuo normalizado das quase-partículas. Levando em conta que o valor médio de produtos de operadores com número de aniquiladores diferente do número de criadores é zero restam apenas os valores médios dos produtos de dois operadores, que são as contrações tabeladas em C.1, e o valor médio $\langle \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_4} \rangle$. Com auxílio do teorema de Wick obtemos para $\langle \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_4} \rangle$ a expressão

$$\langle \hat{b}_{k_1}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_4} \rangle = |v_{k_1}|^2 |v_{k_3}|^2 \delta_{k_1, k_2} \delta_{k_3, k_4} + v_{k_1} u_{-k_1}^* u_{k_2} v_{-k_2}^* \delta_{-k_1, k_3} \delta_{k_2, -k_4} + |v_{k_1}|^2 |u_{k_2}|^2 \delta_{k_1, k_4} \delta_{k_2, k_3}. \quad (\text{C.9})$$

Determinadas todas as contrações a média quadrática $\langle \hat{n}_\lambda^2 \rangle$ assume a forma

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_\lambda^2 \rangle &= \frac{|z_0|^4}{M^2} + \frac{2|z_0|^2}{M^2} \sum_{k \neq 0} |v_k|^2 + \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} |v_{k_1}|^2 |v_{k_2}|^2 + \frac{|z_0|^2}{M^2} \sum_{k \neq 0} (|u_k|^2 + |v_k|^2) + \\ &+ \frac{z_0^{*2}}{M^2} \sum_{k \neq 0} u_{-k} v_k^* + \frac{z_0^2}{M^2} \sum_{k \neq 0} u_{-k}^* v_k + \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} v_{k_1} u_{-k_1}^* u_{k_2} v_{-k_2}^* + \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} |v_{k_1}|^2 |u_{k_2}|^2. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Finalmente, utilizando as expressões (C.7) e (C.10), respectivamente para as médias $\langle \hat{n}_\lambda \rangle$ e $\langle \hat{n}_\lambda^2 \rangle$, obtemos a partir de (C.2) a flutuação σ_n^2 dada por

$$\begin{aligned} \sigma_n^2 &= \frac{1}{M^2} \sum_{k \neq 0} \left[|z_0|^2 (|u_k|^2 + |v_k|^2) + z_0^{*2} u_{-k} v_k^* + z_0^2 u_{-k}^* v_k \right] + \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} v_{k_1} u_{-k_1}^* u_{k_2} v_{-k_2}^* + \\ &+ \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} |v_{k_1}|^2 |u_{k_2}|^2. \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

O parâmetro z_0 , associado com o número de átomos no condensado, pode ser tomado como real. Se denotarmos por N_0 o número de átomos no condensado

obtemos, a partir de (C.7), uma expressão para o número total médio N de átomos no sistema da forma

$$N = N_0 + \sum_{k \neq 0} |v_k|^2. \quad (\text{C.12})$$

Levando em conta que $N_0 = |z_0|^2$, decorre de (C.11) e (C.12) que

$$\begin{aligned} \sigma_n^2 = & \frac{n}{M} \sum_{k \neq 0} \left(|u_k|^2 + |v_k|^2 + u_{-k} v_k^* + u_{-k}^* v_k \right) + \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} v_{k_1} u_{-k_1}^* u_{k_2} v_{-k_2}^* + \\ & - \frac{1}{M^2} \sum_{k_1, k_2 \neq 0} |v_{k_1}|^2 \left(|v_{k_2}|^2 + u_{-k_2} v_{k_2}^* + u_{-k_2}^* v_{k_2} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

onde $n \equiv \frac{N}{M}$ é o número de átomos por sítio.

No limite $M \gg 1$ com n fixo, podemos determinar uma expressão fechada para σ_n^2 . Note que nesse limite podemos desprezar os termos que decaem para zero da forma M^{-2} . Dessa maneira a flutuação (C.13), assume em primeira aproximação, a forma

$$\sigma_n^2 \approx \frac{n}{M} \sum_{k \neq 0} \left(|u_k|^2 + |v_k|^2 + u_{-k} v_k^* + u_{-k}^* v_k \right). \quad (\text{C.14})$$

As amplitudes u_{-k} e v_k também podem ser tomadas como reais. A partir de (4.19)

e da condição de normalização $u_{-k}^2 - v_k^2 = 1$ obtemos

$$u_k^2 = u_{-k}^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{\epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M}}{\sqrt{\epsilon_k^{(0)} \left(\epsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)}} + 1 \right] \quad v_k^2 = v_{-k}^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{\epsilon_k^{(0)} + \frac{JN}{M}}{\sqrt{\epsilon_k^{(0)} \left(\epsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)}} - 1 \right], \quad (\text{C.15})$$

$$2u_{-k} v_k = - \frac{\frac{JN}{M}}{\sqrt{\epsilon_k^{(0)} \left(\epsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)}}.$$

Vale ressaltar aqui que o sinal do produto $2u_{-k}v_k$ é negativo em completo acordo com a análise dos sinais das normas realizada no capítulo 5, onde vimos que $-1 < v_{-k}/u_k = v_k/u_{-k} < 0$. Substituindo as expressões (C.15) em (C.14) obtemos

$$\sigma_n^2 \approx \frac{n}{M} \sum_{k \neq 0} \frac{\varepsilon_k^{(0)}}{\sqrt{\varepsilon_k^{(0)} \left(\varepsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)}} = \frac{2n}{M} \sum_{k > 0} \frac{\varepsilon_k^{(0)}}{\sqrt{\varepsilon_k^{(0)} \left(\varepsilon_k^{(0)} + \frac{2JN}{M} \right)}} \quad (\text{C.16})$$

com $\varepsilon_k^{(0)} = 4t \sin^2 \left(\frac{\pi k}{M} \right)$. Introduzindo uma variável angular da forma $\theta \equiv \frac{2\pi k}{M}$

podemos reescrever, no limite $M \gg 1$ com n fixo, (C.16) na forma integral

$$\sigma_n^2 \cong \frac{n}{\pi} \int_{\frac{2\pi}{M} \rightarrow 0}^{\pi(1-\frac{1}{M}) \rightarrow \pi} d\theta \frac{4t \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)}{\sqrt{16t^2 \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \frac{2JN}{M} 4t \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)}}. \quad (\text{C.17})$$

O cálculo dessa integral é trivial de modo que obtemos, para a flutuação do número de átomos em cada sitio, a expressão

$$\sigma_n^2 \cong \frac{2n}{\pi} \tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{2t}{nJ}} \right). \quad (\text{C.18})$$

Vamos investigar o comportamento da flutuação do número de átomos em cada sitio nos regimes de Rabi e de Fock.

- Regime de Rabi ($\frac{nJ}{t} \ll 1$)

$$\frac{\sigma_n^2}{n} \approx 1 \quad (\text{C.19})$$

- Regime de Fock ($\frac{nJ}{t} \gg 1$)

$$\frac{\sigma_n^2}{n} \approx \sqrt{\frac{8}{\pi^2} \frac{t}{nJ}} \quad (\text{C.20})$$

Observe que a flutuação do número de átomos em cada sítio é muito maior no regime de Rabi (flutuação poissoniana), onde há coerência entre os estados localizados nos sítios da rede, do que no regime de Fock (flutuação sub-poissoniana), onde a coerência não é mantida e onde a aplicabilidade da aproximação de Bogoliubov é questionável.

D. Comportamento assintótico das razões críticas $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$ no limite $M \gg 1$ com $n \equiv \frac{N}{M}$ fixo.

Aqui determinaremos o comportamento assintótico das razões críticas de total estabilidade termodinâmica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ e total estabilidade dinâmica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, dadas respectivamente em (6.2) e (6.11), no limite $M \gg 1$ com n fixo.

O número M de sítios da rede óptica pode ser parametrizado da forma

$$M = 4\chi + \nu \quad (\text{D.1})$$

onde $\chi \in \mathbb{N}$ e $\nu = 0, 1, 2, 3$. Note que através dessa parametrização o número M de sítios da rede óptica pode ser interpretado como uma função multivalente em ν cujos ramos são rotulados pelo parâmetro inteiro χ . Essa parametrização mapeia todo o conjunto dos números naturais. Abaixo segue um esquema ilustrativo dessa parametrização.

Figura D.1 – O número M de sítios da rede óptica como uma função multivalente em v com ramos rotulados por χ .

Através dessa parametrização será trivial avaliar o comportamento assintótico das razões críticas $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ e $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, no limite $M \gg 1$ com n fixo. Note, a partir de (D.1), que podemos obter uma expressão para o termo $Floor\left[\frac{M}{4}\right]$ da forma

$$Floor\left[\frac{M}{4}\right] = \chi = \frac{M - v}{4}. \quad (D.2)$$

Observe, a partir de (6.2) e (6.3), que se $M \bmod 4 = 0$, que corresponde ao caso $v = 0$, a razão $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$ assume a forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} = \frac{2 \cos\left(\frac{3\pi}{M}\right) \cos\left(\frac{\pi}{M}\right)}{\sin\left(\frac{2\pi}{M}\right)} \quad (D.3)$$

de modo que, no limite $M \gg 1$ com n fixo, temos

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} \Big|_{M \gg 1, M \bmod 4 = 0} \approx \pi^{-1} M. \quad (D.4)$$

Se $M \bmod 4 \neq 0$ a razão $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.}$, com auxílio de (D.2), assume a forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} = \frac{2 \cos\left(\frac{\pi v}{2M} - \frac{\pi}{M}\right) \cos\left(\frac{\pi v}{2M} + \frac{\pi}{M}\right)}{\sin\left(\frac{\pi v}{2M}\right)} \quad (D.5)$$

com $1 \leq v \leq 3$. Note que, no limite $M \gg 1$ com n fixo, a razão (D.5) cresce linearmente da forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{T-est.} \Big|_{M \gg 1, M \bmod 4 \neq 0} \approx \frac{4}{\pi v} M. \quad (D.6)$$

Com auxílio de (D.2) a razão crítica $\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.}$, dada em (6.11), assume a forma

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} = 2 \sin^2\left(\frac{\pi}{M}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{M} - \frac{\pi v}{2M}\right). \quad (D.7)$$

Segue de (D.7) que, no limite $M \gg 1$ com n fixo, temos

$$\left(\frac{nJ}{t}\right)_c^{D-est.} \Big|_{M \gg 1} \approx \frac{(4-v)\pi^3}{M^3} \quad (D.8)$$

com $0 \leq v \leq 3$.

Referências

- [1] G. Raithel, G. Birkel, A. Kastberg, W. D. Phillips, and S. L. Rolston, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 630 (1997)
- [2] T. Müller-Seydlitz, M. Hartl, B. Brezger, H. Hänsel, C. Keller, A. Schnez, R. J. C. Spreeuw, T. Pfau, and J. Mlynek, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1038 (1997)
- [3] S. Friebe, C. D’Andrea, J. Walz, M. Weitz, and T. W. Hänsch, *Phys. Rev. A* **57**, R20 (1997)
- [4] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002)
- [5] M. Greiner, O. Mandel, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* **419**, 51 (2002)
- [6] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989)
- [7] K. Sheshandri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T. V. Ramakrishnan, *Europhys. Lett.* **22**, 257 (1993)
- [8] J. K. Freericks and H. Monien, *Europhys. Lett.* **26**, 545 (1994)
- [9] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963)
- [10] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. USSR* **11**, 23 (1947)

- [11] E. P. Gross, *Ann. Phys.* **9**, 292 (1960)
- [12] M. Edwards, R. J. Dodd, C. W. Clark, P. A. Ruprecht, and K. Burnett, *Phys. Rev. A* **53**, R1950 (1996)
- [13] P. A. Ruprecht, M. J. Holland, K. Burnett, and M. Edwards, *Phys. Rev. A* **51**, 4704 (1995)
- [14] M. Edwards, P. A. Ruprecht, K. Burnett, R. J. Dodd, and C. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1671 (1996)
- [15] Ph. W. Courteille, V. S. Bagnato, and V. I. Yukalov, *Laser Phys.* **11**, 659 (2001)
- [16] B. Wu and Q. Niu, *Phys. Rev. A* **64**, 061603 (2001)
- [17] K. Xu, Y. Liu, D. E. Miller, J. K. Chin, W. Setiawan, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 180405 (2006)
- [18] G. Orso, C. Menotti, and S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 190408 (2006)
- [19] Gh.-S. Paraoanu, *Phys. Rev. A* **67**, 023607 (2003)
- [20] A. F. R. T. Piza, *Brazilian J. Phys.* **35**, 122 (2005)
- [21] J. P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (Cambridge, MA: MIT Press, 1986)

[22] A. A. Svidzinsky and A. L. Fetter, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5919 (2000)

[23] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307 (2001)