UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

MISTURAS BINÁRIAS DE CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN EM REDES ÓPTICAS PERIÓDICAS

Eduardo Toshio Domingues Matsushita

Orientador: Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos

Tese de doutorado apresentada
ao Instituto de Física para a ob-
tenção do título de Doutor em
Ciências.

Banca Examinadora:

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

Prof. Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP)

Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas (IFUSP)

Prof. Dr. Marcelo Oliveira da Costa Pires (UFABC)

Prof. Dr. Frederico Firmo de Souza Cruz (UFSC)

São Paulo - SP

2012

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Matsushita, Eduardo Toshio Domingues

Misturas binárias de condensados de Bose-Einstein em
redes ópticas periódicas. - São Paulo, 2012.

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo.
Instituto de Física, Depto. Física Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Condensado de Bose-Einstein; 2. Mecânica
quântica; 3. Problemas de muitos corpos.

USP/IF/SBI-076/2012

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos pela paciência, pelas boas idéias e pelas soluções que contribuíram significativamente para a realização desta tese.

Agradeço a todos os excelentes professores do IFUSP que ampliaram minha visão sobre a Física: Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas, Prof. Dr. Antonio Fernando Ribeiro de Toledo Piza, Prof. Dr. Arnaldo Gammal, Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski entre outros.

Agradeço a toda minha família, em especial, a minha mãe Maria Domingues Araujo Matsushita e aos meus irmãos, Elenio Araujo Andrade e Nala Maria Matsushita, pelo apoio e incentivo que me deram para seguir nessa carreira. Toda a força e todo o suporte que vocês me deram foram essenciais nessa trajetória dentro da profissão que escolhi.

Tenho que agradecer aos meus grandes e melhores amigos, em especial, três deles que estiveram sempre perto e muito presentes acompanhando cada etapa da realização desta tese desde períodos construtivos até os mais árduos: João Santos, Elisa Ferreira e Ricardo Aluísio. Obrigado João por me auxiliar com os procedimentos computacionais e todo suporte naqueles momentos de sufoco, obrigado Elisa pelas revisões e discussões científicas com puxões de orelha e obrigado Ricardo pela força e incentivo que fizeram a diferença na finalização da redação da tese. Agradeço a todos os meus outros amigos: Wilson Façanha, Fernanda Pinheiro, Thiago Scataglia, Fernando Ferreira, Melissa Cipoloni, Rafael Zandoná, Pedro Tavares, Andrea Malafatti, Andrea Petter, Deds, André Alencar e todos que compreenderam o meu afastamento e indisponibilidade de horário. Um agradecimento mais que especial a todos os amigos do MCSU que sempre estiveram na torcida: D. Dora, Sr. Samuel, Karen, Kathia, Stella, Carolina, Bê, Roseli, Aninha, Tê, Marcão, Maria Alice, Ana Paula, Luizão, Ari, João, Roberta e todos os demais.

Finalmente agradeço ao apoio financeiro concedido pelo CNPq que possibilitou a realização deste trabalho.

Resumo

Nesta tese utilizamos o Modelo de Bose-Hubbard (MBH) generalizado para duas espécies bosônicas para investigar a estabilidade dinâmica da fase superfluida de uma mistura binária de átomos bosônicos ultra-frios confinados em uma rede óptica periódica anelar com M sítios.

Na primeira parte consideramos a Hamiltoniana do MBH sem a presença do tunelamento inter-espécies. Deduzimos e resolvemos as equações de Gross-Pitaevskii para os estados de equilíbrio do MBH e mostramos que são misturas binárias de condensados nos quais os átomos de cada espécie ocupam um estado de quase-momento q bem definido. As excitações elementares foram determinadas resolvendo as equações de Bogoliubov-de Gennes o que foi possível graças a estrutura de acoplamento dos quase-momentos que reduziu a Hamiltoniana Efetiva a uma soma direta de um dubleto e quadrupletos. Através da análise do comportamento das energias de excitação como função dos parâmetros de controle do sistema, investigamos a estabilidade dinâmica de dois casos de misturas de condensados onde, em um caso, os átomos de cada espécie ocupam o mesmo estado de quase-momento, $q_A = q_B$ e, no outro, quase-momentos opostos, $q_A = -q_B$. Em ambos os casos as condições de estabilidade dependem do quase-momento q estar nos quartos centrais ou laterais da primeira zona de Brillouin. No caso $q_A = q_B$ vemos que a forma do diagrama de estabilidade independe do quase-momento do condensado. Por outro lado, o mesmo não ocorre nos condensados contra-propagantes $q_A = -q_B$. Esta diferença fica mais acentuada no limite termodinâmico onde os diagramas de estabilidade no centro e nas extremidades da primeira zona de Brillouin ficam idênticos nos dois casos. Já nas bordas que separam os quartos centrais e laterais o comportamento é diferente pois a presença de uma interação inter-espécies por menor que seja desestabiliza completamente a mistura com $q_A = -q_B$. Em todos estes casos ficou evidente o papel desestabilizador da interação inter-espécies.

Na segunda parte consideramos o efeito de um termo de tunelamento inter-espécies. As soluções das equações de Gross-Pitaevskii revelam uma estrutura bi-estável de estados de equilíbrio essencial para a ocorrência de bifurcação no sistema e, portanto, a presença de catástrofe. Investigamos se a catástrofe é acessível a uma observação experimental. De acordo com nosso critério, esta observação é impossível se o plano de bifurcação for a fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica. Através da análise da estabilidade dinâmica dos estados de equilíbrio vimos que para um sistema invariante por inversão de cor essa resposta depende apenas da razão entre as intensidades de tunelamento intra e inter-espécies de modo que se $J_{AB}/J > 1$ a observação é impossível e se $J_{AB}/J < 1$ é possível, supondo existir uma rota adiabática até a bifurcação.

Abstract

In this thesis we used the two-component Bose-Hubbard Model (BHM) to investigate the dynamical stability of the superfluid phase of a binary mixture of ultra-cold bosonic atoms confined in a ring-shaped periodic optical lattice with M sites.

In the first part we considered the BHM Hamiltonian without the presence of inter-species tunnelling. We deduced and solved the Gross-Pitaevskii equations for the equilibrium states of the BHM and showed that they are binary mixtures of condensates where the atoms of each species occupy a state of well defined quasi-momentum q . The elementary excitations were determined solving the Bogoliubov-de-Gennes equations which was possible thanks to the coupling structure of the quasi-momenta that reduced the Effective Hamiltonian to a direct sum of a doublet and quadriplets. Through the analysis of the behavior of the excitation energies as a function of the control parameters of the system, we investigated the dynamical stability of two cases of mixtures of condensates where, in one case, the atoms of each specie occupy the same state of quasi-momentum, $q_A = q_B$, and, in the other, opposite quasi-momentum, $q_A = -q_B$. In both cases the stability conditions depend of the quasi-momentum q to be in the central or lateral quarters of the first Brillouin zone. In the case $q_A = q_B$, we see that the form of the stability diagram is not dependent of the quasi-momentum of the condensate. However, the same does not occur in the counter-propagating condensates $q_A = -q_B$. This difference is accentuated in the thermodynamic limit where the stability diagrams in the center and in the extremities of the first Brillouin zone are identical in both cases. In the borders that separate the central and lateral quarters the behavior is different because the presence of a slightly non vanishing inter-species interaction completely destabilize the mixture with $q_A = -q_B$. In all these cases it was evident the destabilizing role of the inter-species interaction.

In the second part we considered the effect of a inter-species tunnelling term. The solutions of the Gross-Pitaevskii equations reveal a bi-stable structure of equilibrium states that is essential for the occurrence of the bifurcation in the system and, therefore, the presence of catastrophe. We investigated if the catastrophe is accessible to a experimental observation. According to our criteria, this observation is impossible if the bifurcation plane is the frontier of a dynamical instability domain. Through the analysis of the dynamical stability of the equilibrium states we saw that for a system invariant by color inversion this answer depends only on the ratio between the intra and inter-species tunnelling intensities in a way that if $J_{AB}/J > 1$ the observation is impossible and if $J_{AB}/J < 1$ it is possible, supposing that it exists an adiabatic route until the bifurcation.

Sumário

1	Introdução	1
2	O Modelo de Bose-Hubbard	8
2.1	Átomos em potenciais periódicos	8
2.1.1	A representação de Wannier e o limite de <i>tight-binding</i>	9
2.2	O Modelo de Bose-Hubbard para duas espécies atômicas	10
2.2.1	A Hamiltoniana MBH	13
2.2.2	Uma topologia particular: a rede óptica anelar	14
3	As misturas binárias de condensados e suas excitações elementares	15
3.1	As equações de Gross-Pitaevskii do MBH	16
3.2	As excitações elementares	19
3.2.1	A Hamiltoniana Efetiva	23
3.2.2	Acoplamento de quase-momentos na Hamiltoniana Efetiva	24
3.2.3	As equações de Bogoliubov-de Gennes	30
4	Estabilidade dinâmica das misturas binárias de condensados	37
4.1	Condensados com quase-momento nulo	38
4.2	Condensados com quase-momento finito: $q_A = q_B$	41
4.2.1	Quase-momentos nos quartos centrais	43
4.2.2	Quase-momentos nos quartos laterais	45
4.3	Condensados contra-propagantes: $q_A = -q_B$	46
4.3.1	Quase-momentos nos quartos centrais	48
4.3.2	Quase-momentos nos quartos laterais	58
5	A conversão inter-espécies e a rota para a catástrofe	63
5.1	A Hamiltoniana MBH com conversão inter-espécies	63
5.2	Os estados de equilíbrio	65
5.2.1	A fase relativa e a polarização dos estados de equilíbrio	67

5.3	As excitações elementares	76
5.3.1	Dubleto	78
5.3.2	Quadrupletos	81
5.4	A estabilidade dinâmica e a rota para a catástrofe	83
5.4.1	Domínio de estabilidade única	86
5.4.2	Domínio de bi-estabilidade	90
6	Conclusões	100
A	Diagonalização de Hamiltonianas quadráticas bosônicas	105
B	Acoplamento intra-espécies de quase-momentos na Hamiltoniana Efetiva para M par	107
C	Quase-momento relativo	113
C.1	Parametrização pelo quase-momento relativo	113
C.2	Identificando um quadrupletos	115
D	Análise de desigualdades	117

Capítulo 1

Introdução

A condensação de Bose-Einstein é um dos fenômenos mais intrigantes e fascinantes da física e sua realização experimental [1, 2, 3], proporcionado pelo avanço nas técnicas de resfriamento e aprisionamento de gases atômicos, delineou novas tendências e fronteiras na investigação das propriedades de sistemas de muitos corpos assim como as aplicações multidisciplinares que vão desde a física da matéria condensada até a cosmologia. São por estas razões que o ano de 1995 é considerado o marco da ascensão da física dos gases atômicos ultra-frios. Para o leitor que se interessar em tomar conhecimento dos avanços experimentais e teóricos desde 1995 até o presente recomendo a consulta dos artigos de revisão [4, 5, 6, 7]. Nesta Introdução vamos fazer uma resumida apresentação destes desenvolvimentos enfatizando os aspectos relacionados com o tema da tese.

Após o advento da realização experimental de condensados atômicos de Bose-Einstein em armadilhas magnéticas [1, 2, 3], uma série de experimentos conseguiu aprisionar átomos bosônicos em armadilhas ópticas [8, 9, 10] e nas chamadas redes ópticas [11, 12]. Nas redes ópticas, feixes de laser contra-propagantes com frequência e amplitude devidamente ajustadas criam um padrão periódico de intensidades no espaço que aprisiona átomos neutros ultra-frios via efeito Stark [13]. Em linhas gerais o campo elétrico oscilante do feixe de laser induz um momento dipolar nos átomos e estes dipolos induzidos, por sua vez, sofrem uma força devido ao gradiente da intensidade do campo elétrico oscilante do laser. Dessa forma, há o adensamento dos átomos nos diversos mínimos locais do potencial de aprisionamento que correspondem aos sítios da rede óptica.

Átomos em redes ópticas são sistemas análogos a elétrons em sólidos cristalinos porém a vantagem destes cristais artificiais de luz reside no controle sem precedente de parâmetros. Nas redes ópticas podemos controlar a dimensão da rede, o número de átomos em cada sítio e a interação entre os átomos, tornando estes sistemas apropriados para o desenvolvimento da engenharia de estados quânticos, simulação experimental de sistemas típicos

da matéria condensada e um promissor candidato para o processamento da informação quântica [6].

Explorando a versatilidade destas redes ópticas, muitos progressos têm sido realizados no estudo de átomos ultra-frios fortemente interagentes. Na referência [14], Jaksch *et al.* mostraram que a dinâmica de átomos bosônicos ultra-frios confinados em uma rede óptica no limite de *tight-binding* do potencial periódico é a perfeita realização do Modelo de Bose-Hubbard [15]. De acordo com este modelo, os dois mecanismos físicos essenciais de tais sistemas são a deslocalização devido ao tunelamento atômico entre sítios primeiros vizinhos e a interação repulsiva entre átomos que se encontram no mesmo sítio. Esta verificação motivou a realização de um experimento que demonstrou a existência de uma transição de fase quântica entre uma fase superfluida (SF) e uma fase isolante de Mott (MI) nestes sistemas, [12]. Estas fases quânticas correspondem aos estados fundamentais do sistema nos diferentes regimes definidos pela competição entre as intensidades de tunelamento atômico e da interação repulsiva entre os átomos nos sítios.

Na fase SF, onde a intensidade de tunelamento é dominante, o estado fundamental do sistema é um condensado no qual os átomos ocupam o mesmo estado de quase-momento nulo. Estes átomos estão deslocalizados na rede e existe uma coerência de longo alcance entre as fases dos estados localizados em cada sítio. O número de átomos no sítio é variável e segue uma distribuição poissoniana. Por outro lado, na fase MI onde a interação é dominante existe um número fixo de átomos localizados em cada sítio da rede e o estado fundamental é o produto de estados localizados nos sítios. A coerência de fase é perdida e a flutuação do número de átomos em cada sítio é nula. Quando a intensidade da interação repulsiva cresce relativamente à intensidade de tunelamento, existe um valor crítico para o qual ocorre a transição SF-MI. A mudança qualitativa da configuração do estado fundamental na transição de fase é acompanhada por uma mudança no espectro de excitação. Na fase SF o espectro não tem lacuna enquanto que na fase MI aparece uma lacuna que corresponde às excitações partícula-buraco [16, 17, 18]. O aparecimento de uma lacuna de energia no espectro de excitação quando o sistema cruza o ponto crítico é uma propriedade característica de uma transição de fase quântica [12].

A identificação da transição SF-MI demonstrou definitivamente a eficácia das redes ópticas no estudo de sistemas onde os átomos estão em regime fortemente correlacionados e abriu novas direções neste campo de pesquisa. Por exemplo, vários trabalhos teóricos apontaram a possibilidade de encontrarmos na fase SF condensados com corrente finita e investigaram a estabilidade dinâmica destes estados de equilíbrio nos regimes de acoplamento forte [19, 20, 21] e fraco [22, 23, 24, 25]. Condensados com corrente finita podem ser dinamicamente instáveis e isto ocorre devido ao surgimento de energias comple-

Figura 1.1: As fases quânticas de um sistema de átomos bosônicos ultra-frios em uma rede óptica. Na fase SF (a), onde as interações são fracas, o estado fundamental é um condensado. Os átomos são deslocalizados devido ao tunelamento entre os sítios primeiros vizinhos existindo assim uma coerência de longo alcance entre as fases dos estados localizados em cada sítio. Além disso, a ocupação de cada sítio segue uma distribuição poissoniana. Na fase MI (b), onde as interações são dominantes, existe um número fixo de partículas em cada sítio e o estado fundamental é um estado de Fock, sem nenhuma coerência entre as fases dos estados localizados.

xas no espectro de excitação de modo que pequenos desvios do estado de equilíbrio são exponencialmente amplificados. A observação experimental destas predições foi realizada em [26, 27, 28]. No experimento de Fallani *et al.* descrito em [26] foi utilizada uma rede óptica móvel criada a partir da interferência de dois feixes de laser contra-propagantes cujas frequências diferiam por um pequena dissonância $\delta\nu$. O padrão resultante desta interferência é uma onda estacionária que se move com velocidade igual a $v = \lambda_L \delta\nu / 2$ com λ_L sendo o comprimento de onda do laser. Uma vez produzido o condensado, que se encontra confinado em uma armadilha magnética, a rede óptica móvel é ligada adiabaticamente e cada átomo do sistema passa a ocupar um estado de quase-momento $q = mv/\hbar$ e índice de banda n . Fallani *et al.* mostraram que o tempo de vida destes estados de corrente finita possui uma dependência com o quase-momento q de modo que para $q > 0.55q_B$, com $q_B = 2\pi/\lambda_L$ sendo a extremidade da primeira zona de Brillouin, este tempo decresce rapidamente e aparecem estruturas complexas no perfil da densidade da nuvem atômica expandida sugerindo a fragmentação do condensado que é a assinatura da instabilidade dinâmica, veja Figura 1.2.

A realização de condensados de Bose-Einstein armadilhados abriu a possibilidade de investigar sistemas mais complexos como misturas de átomos ultra-frios em diferentes estados internos ou misturas heteronucleares. Um dos primeiros experimentos foi realizado pelo grupo do JILA, [29], onde foi produzida uma mistura de átomos de ^{87}Rb em dois estados hiperfinos diferentes, $|F = 1, m_F = -1\rangle$ e $|F = 2, m_F = 2\rangle$, em uma armadilha magnética onde os graus de liberdade de spin estão inativos. Neste tipo de sistema foi investigado o efeito na distribuição espacial dos átomos da competição entre as intensidades de interação entre átomos no mesmo estado e em estados diferentes [30]. Se a interação intra-espécies é mais repulsiva que a inter-espécies a coexistência espacial é favorecida enquanto que o limite oposto favorece a separação. Já nos experimentos do grupo do MIT,

Figura 1.2: Taxa de perda (inverso do tempo de vida) como função do quase-momento de um condensado com corrente finita em uma rede óptica com profundidade $0.2E_R$. Observe que o tempo de vida do condensado descrece rapidamente para $q > 0.55q_B$. A perda de coerência do condensado é indicada pelo aparecimento de estruturas complexas no perfil da densidade da nuvem que é a assinatura da instabilidade dinâmica. Figura extraída da referência [26].

[31], foi produzido um condensado espinorial de sódio no estado hiperfino $F = 1$ com diferentes projeções $m_F = 1, 0, -1$ em armadilhas ópticas onde os graus de liberdade de spin estão ativos. Em tais sistemas existe a possibilidade de ocorrer transições entre duas componentes dando origem a uma variedade de fenômenos físicos tais como miscibilidade das componentes $m_F = 0$ e $m_F = \pm 1$ [32, 33], ondas de spin [34] entre outros.

Em redes ópticas, misturas bosônicas têm sido investigadas tanto do ponto de vista teórico [35, 36, 37, 38] quanto experimental [39, 40, 41, 42]. Estudos teóricos revelam que o diagrama de fases destes sistemas apresenta uma estrutura bem mais rica onde encontramos coexistência das fases SF e MI [35] assim como fases quânticas mais complexas [36, 37, 38]. Através de simulações de Monte Carlo, Kuklov *et al.* mostraram que em uma rede óptica com fator de preenchimento comensurável a mistura pode formar cinco fases estáveis: (i) fase MI, (ii) coexistência das fases MI e SF, (iii) 2SF, (iv) PSF (*paired superfluid*) e (v) SCF (*super-counter-fluid*), [36]. De acordo com este trabalho existem no mínimo três tipos diferentes de fase superfluida, 2SF, PSF e SCF, e na referência [37] Kuklov *et al.* discutem as propriedades das transições 2SF-PSF(SCF). A fase MI possui propriedades que permitem simular sistemas de spin $1/2$ interagentes em átomos ultra-frios o que torna possível um estudo controlado do magnetismo quântico [38]. Trabalhos experimentais em redes ópticas têm sido realizados utilizando misturas de condensados em dois estados hiperfinos diferentes [39, 40], condensados espinoriais [41] e condensados heteronucleares [42].

Inspirados por esses desenvolvimentos apresentamos nesta tese um estudo das pro-

priedades da fase superfluida de uma mistura binária de átomos bosônicos ultra-frios confinados em uma rede óptica com topologia anelar e M sítios. Na referência [44] é discutida uma proposta para realizar experimentalmente uma rede óptica anelar. Por outro lado, armadilhas anelares já são utilizadas em experiências com átomos ultra-frios e um exemplo é a armadilha óptica anelar da referência [43]. No limite de *tight-binding* do potencial periódico a dinâmica da mistura binária é bem descrita por um MBH generalizado para duas espécies bosônicas [14]. Nosso objetivo foi determinar os estados de equilíbrio, as excitações elementares e as condições de estabilidade dinâmica para o sistema em duas situações distintas definidas pela existência ou não de um tunelamento inter-espécies de intensidade J_{AB} . Se $J_{AB} = 0$ temos a Hamiltoniana MBH padrão onde o número de átomos de cada espécie é conservado. Por outro lado, para $J_{AB} \neq 0$ o sistema apresenta uma dinâmica populacional na qual o número de átomos de cada espécie é variável permanecendo conservado apenas o número total, [6]. Neste último caso, dependendo dos parâmetros de controle do sistema, mostramos que os estados de equilíbrio apresentam uma estrutura bi-estável essencial para a existência de bifurcação e, portanto, a presença de catástrofe.

Catástrofes são mudanças abruptas que ocorrem na estrutura dos estados de equilíbrio de um sistema por uma variação suave e contínua dos parâmetros de controle que fixam a sua dinâmica, [45]. Estas mudanças estruturais podem ocorrer com o aparecimento e desaparecimento de estados de equilíbrio ou perda de estabilidade. Fenômenos físicos que costumam acompanhar a ocorrência de catástrofes são, por exemplo, saltos súbitos, histerese, atraso, entre outros. Exemplos de sistemas para os quais estudos teóricos predizem a ocorrência de bifurcação são misturas binárias de condensados fracamente acoplados em uma armadilha na forma de poço duplo [46] e misturas binárias homogêneas de condensados com acoplamento Josephson [47]. Em redes ópticas no limite de acoplamento fraco, Machholm *et al.* [24] mostraram que quando a energia de interação atômica em um sítio é maior do que a intensidade do potencial óptico aparecem *loops* na estrutura de bandas da energia tanto nas extremidades quanto no centro da primeira zona de Brillouin. Segundo Mueller, estes *loops* são um sinal genérico da histerese que ocorre quando o sistema apresenta bi-estabilidade [48].

A tese está organizada do seguinte modo: no Capítulo 2 apresentamos uma breve discussão sobre as propriedades de átomos em potenciais periódicos e deduzimos a Hamiltoniana MBH generalizada para duas espécies atômicas.

Os Capítulos 3 e 4 apresentam o estudo das propriedades da fase superfluida do sistema sem considerar o tunelamento inter-espécies, $J_{AB} = 0$. No Capítulo 3 deduzimos e resolvemos as equações de Gross-Pitaevskii para os estados de equilíbrio do MBH para

mostrar que são misturas binárias de condensados nos quais os átomos ocupam estados de quase-momento bem definido como ocorre em sistemas de uma única componente [19, 49]. As excitações elementares foram obtidas no contexto da Teoria de Bogoliubov [50]. Analisamos a estrutura de acoplamento dos quase-momentos e verificamos que a Hamiltoniana Efetiva é diagonal em blocos de dimensão 4×4 e 8×8 . Nestas condições foi possível resolver as equações de Bogoliubov-de Gennes do MBH e mostrar que o espectro é composto por um dubleto de modos de energia zero e quadrupletos.

No Capítulo 4 estudamos a estabilidade dinâmica de dois casos de misturas de condensados para um sistema invariante por inversão de cor [51] onde, em um caso, os átomos de cada espécie, A e B , ocupam o mesmo estado de quase-momento, $q_A = q_B$ e, no outro, quase-momentos opostos $q_A = -q_B$. Em cada caso determinamos a região do espaço dos parâmetros de controle onde as energias de excitação de um particular quadrupletos são reais e a interseção das regiões de todos os quadrupletos define o domínio onde o espectro é real e, portanto, onde a mistura é dinamicamente estável. Analisamos o comportamento da estabilidade dinâmica destas misturas no limite termodinâmico. Entretanto, queremos enfatizar a relevância dos nossos cálculos para um número de sítios M pequeno. Exemplos de cálculos neste limite são dados nas referências [52, 53]. Em todos estes casos o aspecto mais interessante dos nossos resultados foi a constatação do papel desestabilizador que a interação inter-espécies exerce na mistura.

No Capítulo 5 investigamos as propriedades da mistura binária considerando na Hamiltoniana MBH um termo de tunelamento inter-espécies, $J_{AB} \neq 0$. Admitindo que os átomos de cada espécie ocupam um estado de quase-momento nulo determinamos, no contexto da Teoria de Bogoliubov, os estados de equilíbrio do sistema que são identificados pela fase relativa e polarização. Mostramos que os estados de equilíbrio apresentam uma estrutura bi-estável. O objetivo aqui foi estabelecer em quais condições a catástrofe é acessível a observações experimentais e, de acordo com nosso critério, isto não é possível se o plano de bifurcação for a fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica. Resolvemos as equações de Bogoliubov-de Gennes para encontrar as energias das excitações elementares cujo comportamento como função dos parâmetros de controle permitiu investigar a estabilidade dinâmica dos estados de equilíbrio tanto no domínio de estabilidade única quanto no domínio de bi-estabilidade. Para um sistema invariante por inversão de cor verificamos que se $J_{AB}/J > 1$ o plano de bifurcação é fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica e, de acordo com nosso critério, a observação experimental da catástrofe é impossível. Por outro lado, se $J_{AB}/J < 1$ o plano de bifurcação é fronteira de um domínio de estabilidade dinâmica o que torna possível o acesso experimental da catástrofe, supondo a existência de uma rota adiabática até a bifurcação. No Capítulo 6

encerramos a tese com as conclusões acerca dos nossos estudos. Cálculos relevantes foram anexados nos Apêndices.

Capítulo 2

O Modelo de Bose-Hubbard

Átomos bosônicos ultra-frios submetidos ao potencial periódico de uma rede óptica no regime de *tight-binding* são a perfeita realização do Modelo de Bose-Hubbard que captura os principais ingredientes da física de tais sistemas como a deslocalização devido ao tunelamento atômico entre sítios primeiros vizinhos e a interação entre átomos localizados no mesmo sítio. Começaremos este capítulo discutindo brevemente as propriedades de átomos em potenciais periódicos e deduziremos a Hamiltoniana do Modelo de Bose-Hubbard generalizado para duas componentes bosônicas.

2.1 Átomos em potenciais periódicos

A dinâmica de átomos ultra-frios em uma rede óptica é descrita da mesma forma que a dinâmica de elétrons em uma rede cristalina pois, em ambos os casos, é a periodicidade do potencial de confinamento que determina as propriedades físicas do sistema. Os estados de uma partícula submetido a um potencial periódico são descritos em termos dos estados de Bloch cujas funções de onda são da forma [55, 56]

$$\phi_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (2.1a)$$

onde $u_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ é uma função periódica de período igual ao da rede e que satisfaz a equação de Schrödinger

$$\frac{(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{q})^2}{2m}u_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = E_{n,\mathbf{q}}u_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \quad (2.1b)$$

com $V(\mathbf{r})$ denotando o potencial periódico, $\mathbf{q}$ o quase-momento e n o índice associado a uma banda energética. Como consequência da sua simetria por uma translação finita, os valores de $\mathbf{q}$ formam um conjunto contínuo e limitado na primeira zona de Brillouin. Isto significa que todos os estados de quase-momento que diferem por um múltiplo inteiro do

Figura 2.1: Estrutura de bandas de uma rede óptica unidimensional da forma $V(x) = sE_r \sin^2 kx$ com intensidades $s = 0, 4, 12$ medidas em unidades de energia de recuo do fóton, E_r . Para $s = 0$, que corresponde a um potencial periódico nulo, não existem *gaps* de energia e as bandas são obtidas a partir da redução da curva de dispersão livre $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ na primeira zona de Brillouin. À medida que a intensidade da barreira de potencial aumenta, os *gaps* tornam-se cada vez maiores e a largura das bandas de energia diminuem exponencialmente (figura extraída da referência [54]).

vetor de translação da rede recíproca são fisicamente equivalentes.

A característica mais notável do movimento de uma partícula em um potencial periódico é a distribuição das energias em uma estrutura de bandas. Em geral, estas bandas energéticas são estreitas e separadas por lacunas (bandas de *gap*). Assim, para cada valor de quase-momento $\mathbf{q}$ na primeira zona de Brillouin, temos um conjunto de valores de energia $E_{n,\mathbf{q}}$ com n especificando as bandas energéticas. Na Figura 2.1, [54], é ilustrada a estrutura de bandas para uma rede unidimensional senoidal com diferentes intensidades da barreira de potencial.

2.1.1 A representação de Wannier e o limite de *tight-binding*

Uma representação alternativa pode ser obtida quando expressamos os estados de Bloch em termos de funções de onda centradas nos sítios da rede óptica conhecidas como funções de Wannier.

Os estados de Bloch, quando vistos como funções do quase-momento, são funções periódicas na rede recíproca. Como consequência, estes estados admitem uma repre-

sentação de Fourier discreta da forma

$$\phi_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{\text{BZ}}}} \sum_{\lambda} w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\lambda}/\hbar}, \quad (2.2)$$

onde $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda})$ é a função de Wannier da n -ésima banda centrada no sítio localizado pelo vetor $\mathbf{R}_{\lambda}$ e Ω_{BZ} é o volume da primeira zona de Brillouin. A forma explícita de $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda})$ em termos das funções de Bloch pode ser obtida invertendo a transformação de Fourier (2.2) da qual segue

$$w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{\text{BZ}}}} \int_{\Omega_{\text{BZ}}} d^3q \phi_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\lambda}/\hbar}, \quad (2.3)$$

com a integração sendo realizada em toda a primeira zona de Brillouin. As funções de Wannier formam uma base completa cuja relação de ortonormalidade é

$$\int d^3r w_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda}) w_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\gamma}) = \delta_{nm} \delta_{\lambda\gamma}, \quad (2.4)$$

ou seja, funções correspondentes a diferentes bandas ou localizadas em sítios distintos são ortogonais. Na Figura 2.2, [54], é apresentado um esquema do perfil da função de Wannier e da respectiva densidade de probabilidade para uma rede unidimensional senoidal com diferentes intensidades da barreira.

À medida que a intensidade das barreiras de potencial aumenta os efeitos de deslocalização atômica começam a ser suprimidos pois os átomos tendem a se manterem localizados nos sítios. De fato o aumento das barreiras torna as funções de Wannier ainda mais localizadas nos sítios com a superposição ocorrendo essencialmente entre funções localizadas em sítios vizinhos. Quando a deslocalização atômica ocorre apenas devido ao tunelamento entre sítios primeiros vizinhos o sistema se encontra no regime de *tight-binding* do potencial periódico que é a perfeita realização do Modelo de Bose-Hubbard.

2.2 O Modelo de Bose-Hubbard para duas espécies atômicas

Considere um sistema ultra-frio e diluído constituído por duas espécies de átomos bosônicos, A e B , submetidas a um potencial periódico externo. Levando em conta que a interação atômica é bem descrita em termos de um pseudo-potencial de contato¹ a Hamiltoniana

¹No regime ultra-frio a interação entre os átomos que compõem o sistema é dominada por colisões elásticas binárias de baixas energias. Como o alcance efetivo do potencial de interação é muito menor

Figura 2.2: Função de Wannier e a respectiva densidade de probabilidade para a rede unidimensional com intensidades (a) $3E_r$ e (b) $10E_r$. Note que quanto maior a intensidade da barreira mais concentrado é o perfil da função de Wannier no sítio acarretando uma diminuição na probabilidade de tunelamento atômico. Quando a altura das barreiras é tal que a deslocalização ocorre devido apenas ao tunelamento entre sítios primeiros vizinhos estamos no chamado regime de *tight-binding* do potencial periódico (figura extraída e adaptada da referência [54]).

do sistema, em linguagem de segunda quantização, é da forma

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{j,l=A}^B \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla \hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla \hat{\Psi}_j(\mathbf{r}) \delta_{jl} + \hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{r}) V_{jl}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_l(\mathbf{r}) \right] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B g_{jl} \int d^3r \hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_l^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_l(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_j(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde $\hat{\Psi}_j(\mathbf{r})$ ($\hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{r})$) é o operador de campo bosônico que aniquila (cria) um átomo da espécie j de massa m_j no ponto $\mathbf{r}$ e satisfaz as relações de comutação

$$\left[\hat{\Psi}_j(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_l(\mathbf{r}') \right] = \left[\hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_l^\dagger(\mathbf{r}') \right] = 0, \quad \left[\hat{\Psi}_j(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_l^\dagger(\mathbf{r}') \right] = \delta_{jl} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.6)$$

No termo de um corpo da Hamiltoniana (2.5) temos a energia cinética do sistema e o potencial periódico externo onde admitimos a existência de uma componente não-diagonal

que o comprimento de onda de de Broglie, o único processo relevante na interação de dois átomos é o espalhamento da onda- s ($l = 0$). Nessas condições podemos simplificar o tratamento de tais sistemas utilizando, ao invés do potencial de interação real, um pseudo-potencial de contato da forma $U_{\text{eff}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta^{(3)}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ onde a é o comprimento de espalhamento e m a massa dos átomos interagentes.

na base das espécies e , portanto, a existência de um mecanismo que possibilita o tunelamento atômico com a troca das espécies. De acordo com a referência [6] este tipo de tunelamento inter-espécies pode ocorrer uma vez que o laser pode promover transições entre diferentes estados internos de um átomo. Já no termo de dois corpos as quantidades simétricas g_{jl} estão relacionadas com os comprimentos de espalhamento a_{jl} por

$$g_{jl} = \frac{2\pi\hbar^2 a_{jl}}{m_{jl}} \quad (2.7)$$

com $m_{jl} = \frac{m_j m_l}{m_j + m_l}$ sendo a massa reduzida do sistema formado pelos átomos j e l .

Para a expressar a Hamiltoniana (2.5) em termos das funções de Wannier expandimos os operadores de campo bosônicos da forma,

$$\hat{\Psi}_j(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} \sum_n w_{jn}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda}) \hat{a}_{jn\lambda} \quad (2.8a)$$

$$\hat{\Psi}_j^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} \sum_n w_{jn}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda}) \hat{a}_{jn\lambda}^{\dagger}, \quad (2.8b)$$

onde $\hat{a}_{jn\lambda}$ ($\hat{a}_{jn\lambda}^{\dagger}$) é o operador que aniquila (cria) um átomo bosônico da espécie j na n -ésima banda energética do λ -ésimo sítio da rede óptica e satisfaz as relações de comutação

$$[\hat{a}_{jn\lambda}, \hat{a}_{lm\gamma}] = [\hat{a}_{jn\lambda}^{\dagger}, \hat{a}_{lm\gamma}^{\dagger}] = 0, \quad [\hat{a}_{jn\lambda}, \hat{a}_{lm\gamma}^{\dagger}] = \delta_{jl} \delta_{nm} \delta_{\lambda\gamma}. \quad (2.9)$$

Nestas condições, a Hamiltoniana do sistema assume, na representação de Wannier, a forma explícita

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda,\gamma} \sum_{n,m} J_{n\lambda,m\gamma}^{jl} \hat{a}_{jn\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{lm\gamma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda,\gamma} \sum_{\substack{n,m \\ \alpha,\beta}} U_{n\lambda,m\gamma,r\alpha,s\beta}^{jl} \hat{a}_{jn\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{lm\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{lr\alpha} \hat{a}_{js\beta}, \end{aligned} \quad (2.10a)$$

na qual $J_{n\lambda,m\gamma}^{jl}$ é a intensidade do tunelamento atômico,

$$\begin{aligned} J_{n\lambda,m\gamma}^{jl} \equiv & - \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla w_{jn}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda}) \cdot \nabla w_{jm}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\gamma}) \delta_{jl} \right. \\ & \left. + w_{jn}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\lambda}) V_{jl}(\mathbf{r}) w_{lm}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\gamma}) \right], \end{aligned} \quad (2.10b)$$

e $U_{n\lambda, m\gamma, r\alpha, s\beta}^{jl}$ é a intensidade da interação atômica,

$$U_{n\lambda, m\gamma, r\alpha, s\beta}^{jl} \equiv g_{jl} \int d^3r w_{jn}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\lambda) w_{lm}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\gamma) \times w_{lr}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha) w_{js}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\beta). \quad (2.10c)$$

2.2.1 A Hamiltoniana MBH

Um sistema descrito pelo Modelo de Bose-Hubbard deve satisfazer dois requisitos fundamentais [7]:

1. as energias envolvidas na dinâmica dos átomos são muito menores do que a separação $\hbar\omega$ entre a banda energética mais baixa e a primeira banda excitada;
2. as funções de Wannier estão essencialmente concentradas em cada sítio da rede.

De acordo com o primeiro requisito a intensidade da interação interatômica em um sítio deve ter magnitude que não promova a transição atômica para as bandas excitadas, ou seja, a dinâmica fica restrita à banda de energia mais baixa, $n = 1$. Esta aproximação de M -modos trunca a expansão dos operadores de campo bosônicos na base de Wannier (2.8a) e (2.8b) retendo apenas a função de Wannier da banda $n = 1$ centrada nos M sítios da rede. Já o segundo requisito exige que as funções de Wannier da banda de energia mais baixa devam decair essencialmente no limite espacial que define os sítios da rede de modo a garantir que os efeitos de deslocalização ocorram devido apenas ao tunelamento entre os sítios primeiros vizinhos. Nestas condições, os átomos interagem apenas quando estão no mesmo sítio da rede.

Tais considerações nos conduzem à Hamiltoniana MBH generalizada para duas espécies bosônicas,

$$\hat{H}_{\text{MBH}} = - \sum_{j,l=A}^B \sum_{\langle \lambda, \gamma \rangle} J_{jl} \hat{a}_{j\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda} U_{jl} \hat{a}_{j\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\lambda} \hat{a}_{j\lambda}, \quad (2.11)$$

onde o símbolo $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota que o somatório deve ser realizado sobre todos os sítios primeiros vizinhos. O Modelo de Bose-Hubbard abrange os mecanismos essenciais da física destes sistemas como o tunelamento atômico entre sítios primeiros vizinhos e a interação entre átomos localizados no mesmo sítio. Na Figura 2.3 apresentamos um esquema simplificado da realização do modelo generalizado para duas espécies bosônicas em uma rede óptica.

Figura 2.3: Realização do Modelo de Bose-Hubbard generalizado para duas espécies bosônicas, A e B , em uma rede óptica. A Hamiltoniana MBH descreve a física de sistemas ultra-frios em uma rede óptica no regime de *tight-binding* do potencial periódico. Neste regime, as funções de Wannier (representadas em azul) decaem essencialmente no limite espacial que define os sítios da rede de modo que os átomos possam tunelar somente entre sítios primeiros vizinhos. A interação atômica só ocorre quando os átomos se encontram no mesmo sítio da rede. Além disso, as energias envolvidas na dinâmica do sistema ($\ll \hbar\omega$) não promovem a transição dos átomos da banda energética mais baixa para a primeira banda excitada.

2.2.2 Uma topologia particular: a rede óptica anelar

Durante todo o decorrer da tese estaremos supondo que as duas espécies atômicas estão confinadas em uma rede óptica anelar com M sítios igualmente espaçados e condições de contorno periódicas. A liberdade na escolha da dimensão e topologia da rede óptica é justificada pelo fato de que todas propriedades aqui estudadas independem destas características específicas da rede. Como mencionado na Introdução, a referência [44] discute uma proposta de realização experimental de redes ópticas com topologia anelar.

Em uma rede óptica anelar os sítios podem ser rotulados pelo índice λ que percorre o intervalo $[0, M - 1]$ e nestas condições dois sítios (λ, γ) serão primeiros vizinhos se $\lambda = \gamma \pm 1$. Desta forma, a Hamiltoniana MBH (2.11) fica

$$\hat{H}_{\text{MBH}} = - \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} J_{jl} (\hat{a}_{j\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\lambda+1} + \hat{a}_{l\lambda+1}^\dagger \hat{a}_{j\lambda}) + \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} U_{jl} \hat{a}_{j\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\lambda} \hat{a}_{j\lambda}, \quad (2.12a)$$

com condições de contorno

$$\hat{a}_{j\lambda+M} = \hat{a}_{j\lambda}. \quad (2.12b)$$

A Hamiltoniana MBH não é analiticamente solúvel nem mesmo para redes unidimensionais [7] o que torna necessária a escolha de algum método sistemático para tratar esta Hamiltoniana. Neste projeto optamos por utilizar uma teoria de campo médio conhecida como Teoria de Bogoliubov [50] que fornece resultados satisfatórios na descrição de sistemas condensados.

Capítulo 3

As misturas binárias de condensados e suas excitações elementares

Neste e no próximo capítulo estudaremos as propriedades da fase superfluida de uma mistura binária de átomos bosônicos em uma rede óptica periódica anelar no limite de *tight-binding* do potencial periódico sem considerar os efeitos de um tunelamento inter-espécies, $J_{AB} = 0$. Nestas condições, a dinâmica conserva o número de átomos de cada espécie e a Hamiltoniana MBH é dada explicitamente por

$$\hat{H}_{\text{MBH}} = - \sum_{j=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} J_{jj} (\hat{a}_{j\lambda}^\dagger \hat{a}_{j\lambda+1} + \hat{a}_{j\lambda+1}^\dagger \hat{a}_{j\lambda}) + \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} U_{jl} \hat{a}_{j\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\lambda}^\dagger \hat{a}_{l\lambda} \hat{a}_{j\lambda}. \quad (3.1)$$

Aqui deduziremos e resolveremos as equações de Gross-Pitaevskii do MBH para duas espécies bosônicas para mostrar que os estados de equilíbrio na fase superfluida são misturas de dois condensados onde os átomos de cada espécie ocupam estados de quase-momento bem definido da mesma forma como ocorre em sistemas com uma única espécie bosônica [19, 49]. Neste cenário é possível encontrar misturas de condensados nos quais os átomos ocupam estados de quase-momento finito.

As energias e a composição das excitações elementares são determinadas através das equações de Bogoliubov-de Gennes do MBH para duas espécies bosônicas. Resolveremos tais equações a partir da diagonalização exata de uma Hamiltoniana Efetiva resultante da imposição da Aproximação de Bogoliubov na Hamiltoniana Grande-Canônica do sistema. Mostraremos que o espectro das excitações elementares tem uma estrutura formada por dubletos e quadrupletos de modos de excitação e obteremos as equações características cujas soluções são as energias de excitação do sistema. O comportamento das energias de excitação como função dos parâmetros de controle do sistema determina a estabilidade

dinâmica das misturas de condensados que será o assunto do próximo capítulo.

3.1 As equações de Gross-Pitaevskii do MBH

A equação de Gross-Pitaevskii (GP) é uma equação de campo médio que identifica o estado de partícula independente ocupado pelos átomos em um condensado. No contexto do MBH para duas espécies bosônicas as equações de GP são obtidas minimizando o valor médio da Hamiltoniana MBH com relação a um estado variacional que descreve uma mistura binária de condensados. Denotando por N_j o número de átomos da espécie j presentes no sistema, este estado variacional é da forma

$$|N_A, N_B\rangle = \prod_{j=A}^B \frac{(\hat{\mathcal{A}}_j^\dagger)^{N_j}}{\sqrt{N_j!}} |0\rangle, \quad (3.2a)$$

onde cada operador $\hat{\mathcal{A}}_j^\dagger$ é uma combinação linear de operadores que criam átomos da espécie j nos sítios da rede,

$$\hat{\mathcal{A}}_j^\dagger = \sum_{\lambda=0}^{M-1} \chi_{j\lambda} \hat{a}_{j\lambda}^\dagger. \quad (3.2b)$$

Como consequência do caráter bosônico destes operadores, os coeficientes variacionais $\chi_{j\lambda}$ devem satisfazer os vínculos de normalização

$$\sum_{\lambda=0}^{M-1} |\chi_{j\lambda}|^2 = 1. \quad (3.2c)$$

Nestas condições, o valor médio da Hamiltoniana MBH (3.1) relativo ao estado (3.2a) é dado por

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_{\text{MBH}} \rangle &\equiv \langle N_A, N_B | \hat{H}_{\text{MBH}} | N_A, N_B \rangle = - \sum_{j=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} J_{jj} N_j (\chi_{j\lambda}^* \chi_{j\lambda+1} + \chi_{j\lambda+1}^* \chi_{j\lambda}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} U_{jl} N_j (N_l - \delta_{jl}) |\chi_{j\lambda}|^2 |\chi_{l\lambda}|^2. \end{aligned} \quad (3.3)$$

É conveniente introduzirmos a mudança de variável

$$z_{j\lambda} \equiv \sqrt{N_j} \chi_{j\lambda} \quad (3.4)$$

que definem para cada espécie a **função de onda do condensado**. Em termos destes

parâmetros, (3.3) pode ser reescrita como

$$\langle \hat{H}_{\text{MBH}} \rangle = - \sum_{j=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} J_{jj} (z_{j\lambda}^* z_{j\lambda+1} + z_{j\lambda+1}^* z_{j\lambda}) + \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B \sum_{\lambda=0}^{M-1} U_{jl} \left(1 - \frac{\delta_{jl}}{N_j} \right) |z_{j\lambda}|^2 |z_{l\lambda}|^2 \quad (3.5a)$$

com

$$\sum_{\lambda=0}^{M-1} |z_{j\lambda}|^2 = N_j. \quad (3.5b)$$

A minimização de $\langle \hat{H}_{\text{MBH}} \rangle$ deve levar em conta os vínculos de normalização (3.5b) tornando necessária a introdução dos multiplicadores de Lagrange μ_A e μ_B que correspondem, respectivamente, aos potenciais químicos das espécies A e B . Desta forma, da condição de extremo

$$\delta \left[\langle \hat{H}_{\text{MBH}} \rangle - \sum_{j=A}^B \mu_j \left(\sum_{\lambda=0}^{M-1} |z_{j\lambda}|^2 - N_j \right) \right] = 0 \quad (3.6)$$

seguem as equações de GP do MBH para duas componentes bosônicas,

$$\begin{cases} -J_{AA}(z_{A\lambda+1} + z_{A\lambda-1}) + \left[U_{AA} \left(1 - \frac{1}{N_A} \right) |z_{A\lambda}|^2 + U_{AB} |z_{B\lambda}|^2 - \mu_A \right] z_{A\lambda} = 0 \\ -J_{BB}(z_{B\lambda+1} + z_{B\lambda-1}) + \left[U_{BB} \left(1 - \frac{1}{N_B} \right) |z_{B\lambda}|^2 + U_{AB} |z_{A\lambda}|^2 - \mu_B \right] z_{B\lambda} = 0 \end{cases} \quad (3.7a)$$

Para resolver (3.7a) introduzimos o *ansatz*

$$z_{j\lambda} = z_{j0} e^{i\theta_j \lambda} \quad (3.7b)$$

que torna as equações de GP independentes de λ . Por um lado, os vínculos de normalização (3.5b) determinam o módulo quadrado de z_{j0} ,

$$|z_{j0}|^2 = \frac{N_j}{M} \quad (3.7c)$$

e por outro, a quantidade θ_j é fixada pelas condições de contorno periódicas do sistema, $z_{j\lambda} = z_{j\lambda+M}$, que requerem

$$e^{i\theta_j M} = 1. \quad (3.7d)$$

Assim, os possíveis valores de θ_j são as raízes M -ésimas da unidade

$$\theta_j = \frac{2\pi q_j}{M} \quad (3.7e)$$

onde q_j assume valores inteiros no intervalo $[-M/2 + 1, \dots, M/2]$ para M par ou $[-(M -$

$1)/2, \dots, (M-1)/2]$ para M ímpar. As funções de onda dos condensados ficam iguais a

$$z_{j\lambda}^{(q_j)} = \sqrt{\frac{N_j}{M}} e^{i \frac{2\pi q_j}{M} \lambda} \quad (3.7f)$$

com os potenciais químicos sendo dados por

$$\mu_A = -2J_{AA} \cos \frac{2\pi q_A}{M} + \frac{U_{AA}N_A}{M} \left(1 - \frac{1}{N_A}\right) + \frac{U_{AB}N_B}{M} \quad (3.8a)$$

$$\mu_B = -2J_{BB} \cos \frac{2\pi q_B}{M} + \frac{U_{BB}N_B}{M} \left(1 - \frac{1}{N_B}\right) + \frac{U_{AB}N_A}{M}. \quad (3.8b)$$

Com auxílio de (3.7f) obtemos, então, a forma explícita de (3.2b) dada por

$$\hat{\mathcal{A}}_{jq_j}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\lambda=0}^{M-1} e^{i \frac{2\pi q_j}{M} \lambda} \hat{a}_{j\lambda}^\dagger \quad (3.9a)$$

que corresponde ao operador de criação de um átomo da espécie j em um estado de **quase-momento**¹ bem definido. De fato, é possível verificar que o estado de partícula independente gerado da ação de (3.9a) no vácuo corresponde a um autoestado do operador de translação cíclica $\hat{\tau}_d$ definido pela relação

$$\hat{\tau}_d^\dagger \hat{a}_{j\lambda}^\dagger \hat{\tau}_d = \hat{a}_{j\lambda+1}^\dagger. \quad (3.9b)$$

Para isto basta notar que

$$\hat{\tau}_d^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{jq_j}^\dagger \hat{\tau}_d = e^{-i \frac{2\pi q_j}{M}} \hat{\mathcal{A}}_{jq_j}^\dagger. \quad (3.9c)$$

O conjunto de todos os operadores (3.9a) define a **representação do quase-momento**. O vetor de estado da mistura binária de condensados assume a forma

$$|N_A, N_B\rangle = \prod_{j=A}^B \frac{\left(\hat{\mathcal{A}}_{jq_j}^\dagger\right)^{N_j}}{\sqrt{N_j!}} |0\rangle,$$

nos levando a concluir que o estado de equilíbrio do sistema é uma mistura binária de condensados onde cada espécie atômica ocupa um estado de quase-momento bem definido da mesma maneira como ocorre em sistemas com uma única espécie [19, 49]. Na literatura [7, 19], os condensados nos quais os átomos ocupam um estado de quase-momento finito

¹No decorrer da tese tomaremos a liberdade de especificar o quase-momento de um estado utilizando apenas o número inteiro q . Assim, deve ficar subentendido que o valor do quase-momento é de fato $2\pi q/Ma$ com a sendo a distância entre dois sítios consecutivos da rede óptica.

são chamados de condensados com corrente finita. Além disso, como já era sabido, fica evidente que nos condensados os átomos são não-localizados existindo uma correlação entre as fases dos sítios com a diferença de fase entre sítios primeiros vizinhos sendo fixa e igual a $e^{i\frac{2\pi q_j}{M}}$. No decorrer da tese utilizaremos a representação do quase-momento onde a Hamiltoniana MBH assume a forma

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{MBH}} &= \sum_{j=A}^B \sum_k e_{jk} \hat{\mathcal{A}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{jk} + \sum_{j,l=A}^B \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} \frac{U_{jl}}{2M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - k_{3j} - k_{4l}) \\ &\times \hat{\mathcal{A}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{lk_2}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{jk_3} \hat{\mathcal{A}}_{lk_4}\end{aligned}\quad (3.10a)$$

com

$$e_{jk} \equiv -2J_{jj} \cos \frac{2\pi k}{M} \quad (3.10b)$$

e $\delta_M(k)$ sendo o **delta de Kröneckers modular** definido pela expressão

$$\delta_M(k) \equiv \frac{1}{M} \sum_{\lambda=0}^{M-1} e^{i\frac{2\pi k}{M}\lambda} \quad (3.10c)$$

que é igual a 1 se k for um múltiplo inteiro de M e zero caso contrário.

3.2 As excitações elementares

O comportamento das excitações elementares como função dos parâmetros de controle do sistema é essencial para investigar a estabilidade dinâmica de condensados atômicos em redes ópticas. O esquema teórico padrão utilizado para determinar as energias e a composição das excitações elementares de um sistema ultra-frio de átomos bosônicos é a Teoria de Bogoliubov [50]. Nesta teoria de campo médio, as excitações elementares são obtidas como soluções das equações de Bogoliubov-de Gennes (BdG) deduzidas da diagonalização de uma Hamiltoniana Efetiva resultante da imposição da Aproximação de Bogoliubov que, como ficará evidente a seguir, viola a conservação do número de átomos de cada espécie atômica.

O ponto de partida deste esquema teórico é a Hamiltoniana Grande-Canônica²,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MBH}} \equiv \hat{H}_{\text{MBH}} - \sum_{j=A}^B \mu_j \hat{N}_j, \quad (3.11a)$$

²A Hamiltoniana Grande-Canônica é definida a partir do Grande Potencial Termodinâmico, $\mathcal{H} = E - TS - \mu N$, para $T = 0$.

que para a mistura binária fica

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\text{MBH}} = & \sum_{j=A}^B \sum_k (e_{jk} - \mu_j) \hat{\mathcal{A}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{jk} + \sum_{j,l=A}^B \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} \frac{U_{jl}}{2M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - k_{3j} - k_{4l}) \\ & \times \hat{\mathcal{A}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{lk_2}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{jk_3} \hat{\mathcal{A}}_{lk_4},\end{aligned}\quad (3.11b)$$

com μ_j e $\hat{N}_j$ sendo, respectivamente, o potencial químico e o operador número de átomos da espécie j ,

$$\hat{N}_j = \sum_k \hat{\mathcal{A}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{jk}. \quad (3.12)$$

Na Seção anterior mostramos que na fase superfluida os átomos de cada espécie ocupam um estado de quase-momento bem definido no condensado. Desta forma, se denotarmos por q_j o quase-momento do estado ocupado pelos átomos da espécie j podemos definir os **operadores deslocados**³ $\hat{\mathcal{C}}_{jk}$ através da relação

$$\hat{\mathcal{A}}_{jk} = \hat{\mathcal{C}}_{jk} + z_{jq_j} \delta_{k,q_j}, \quad (3.13)$$

com z_{jq_j} sendo uma constante complexa que aparece como um deslocamento para $k = q_j$ e, como veremos posteriormente, está associada com o número de átomos da espécie j . Ao realizarmos este deslocamento na Hamiltoniana Grande-Canônica obtemos uma expansão em ordem normal com relação aos operadores deslocados da forma

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=0}^4 \hat{\mathcal{H}}^{(i)} \quad (3.14a)$$

onde os operadores ordenados $\hat{\mathcal{H}}^{(i)}$, que envolvem i operadores deslocados, são

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} = \sum_{j=A}^B (e_{jq_j} - \mu_j) |z_{jq_j}|^2 + \sum_{j,l=A}^B \frac{U_{jl}}{2M} |z_{jq_j}|^2 |z_{lq_l}|^2, \quad (3.14b)$$

$$\hat{\mathcal{H}}^{(1)} = \sum_{j=A}^B \left(e_{jq_j} + \sum_{s=A}^B \frac{U_{js}}{M} |z_{sq_s}|^2 - \mu_j \right) (z_{jq_j}^* \hat{\mathcal{C}}_{jq_j} + z_{jq_j} \hat{\mathcal{C}}_{jq_j}^\dagger), \quad (3.14c)$$

³Esta definição de operadores deslocados é uma generalização da definição utilizada no caso usual com $q = 0$.

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}^{(2)} &= \sum_{j=A}^B \sum_k \left(e_{jk} + \frac{U_{jj}}{M} |z_{jq_j}|^2 + \sum_{s=A}^B \frac{U_{js}}{M} |z_{sq_s}|^2 - \mu_j \right) \hat{\mathcal{C}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{jk} \\
&+ \frac{U_{AB}}{M} \sum_{k_1, k_2} \delta_M(k_{1A} - k_{2B} - q_A + q_B) \left(z_{Aq_A} z_{Bq_B}^* \hat{\mathcal{C}}_{Ak_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{Bk_2} + z_{Aq_A}^* z_{Bq_B} \hat{\mathcal{C}}_{Bk_2}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{Ak_1} \right) \\
&+ \sum_{j,l=A}^B \sum_{k_1, k_2} \frac{U_{jl}}{2M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - q_j - q_l) (z_{jq_j} z_{lq_l} \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2}^\dagger + z_{jq_j}^* z_{lq_l}^* \hat{\mathcal{C}}_{lk_2} \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}), \quad (3.14d)
\end{aligned}$$

$$\hat{\mathcal{H}}^{(3)} = \sum_{j,l=A}^B \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3}} \frac{U_{jl}}{M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - q_j - k_{3l}) (z_{jq_j} \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_3} + z_{jq_j}^* \hat{\mathcal{C}}_{lk_3}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2} \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}), \quad (3.14e)$$

$$\hat{\mathcal{H}}^{(4)} = \sum_{j,l=A}^B \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} \frac{U_{jl}}{2M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - k_{3j} - k_{4l}) \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{jk_3} \hat{\mathcal{C}}_{lk_4}. \quad (3.14f)$$

Na Teoria de Bogoliubov, o estado fundamental do sistema corresponde ao estado de vácuo dos operadores deslocados,

$$\hat{\mathcal{C}}_{jk} |z_{Aq_A}, z_{Bq_B}\rangle = 0. \quad (3.15a)$$

Como consequência da definição (3.13) é possível verificar que o estado $|z_{Aq_A}, z_{Bq_B}\rangle$ satisfaz as relações

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{A}}_{Aq_A} |z_{Aq_A}, z_{Bq_B}\rangle &= z_{Aq_A} |z_{Aq_A}, z_{Bq_B}\rangle \\
\hat{\mathcal{A}}_{Bq_B} |z_{Aq_A}, z_{Bq_B}\rangle &= z_{Bq_B} |z_{Aq_A}, z_{Bq_B}\rangle
\end{aligned} \quad (3.15b)$$

mostrando assim que se trata de um **estado coerente** do operador $\hat{\mathcal{A}}_{jq_j}$,

$$|z_{Aq_A}, z_{Bq_B}\rangle = \prod_{j=A}^B e^{\frac{|z_{jq_j}|^2}{2}} e^{z_{jq_j} \hat{\mathcal{A}}_{jq_j}^\dagger} |0\rangle. \quad (3.15c)$$

Calculando o valor médio da Hamiltoniana Grande-Canônica com relação a este estado de vácuo, verificamos que a única contribuição é o termo $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ que independe dos operadores

deslocados,

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{MBH}} \rangle = \sum_{j=A}^B (e_{jq_j} - \mu_j) |z_{jq_j}|^2 + \sum_{j,l=A}^B \frac{U_{jl}}{2M} |z_{jq_j}|^2 |z_{lq_l}|^2. \quad (3.16)$$

A minimização de (3.16) nos conduz às equações de equilíbrio

$$\begin{cases} \left(e_{Aq_A} + \frac{U_{AA}}{M} |z_{Aq_A}|^2 + \frac{U_{AB}}{M} |z_{Bq_B}|^2 - \mu_A \right) z_{Aq_A} = 0 \\ \left(e_{Bq_B} + \frac{U_{BB}}{M} |z_{Bq_B}|^2 + \frac{U_{AB}}{M} |z_{Aq_A}|^2 - \mu_B \right) z_{Bq_B} = 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

que têm a propriedade de anular o termo linear, $\hat{\mathcal{H}}^{(1)} \equiv 0$. Por outro lado, fixando o valor médio do operador número $\hat{N}_j$,

$$\hat{N}_j = |z_{jq_j}|^2 + z_{jq_j}^* \hat{\mathcal{C}}_{jq_j} + z_{jq_j} \hat{\mathcal{C}}_{jq_j}^\dagger + \sum_k \hat{\mathcal{C}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{jk}, \quad (3.18)$$

como sendo o próprio número de átomos da correspondente espécie na mistura, $\langle \hat{N}_j \rangle = N_j$, segue que $N_A = |z_{Aq_A}|^2$ e $N_B = |z_{Bq_B}|^2$. Uma vez que as equações de equilíbrio são invariantes por uma transformação de calibre global, $z_{jq_j} \rightarrow e^{i\phi} z_{jq_j}$, podemos tomar as quantidades z_{jq_j} como sendo reais e da forma

$$z_{Aq_A} = \sqrt{N_A} \quad \text{e} \quad z_{Bq_B} = \sqrt{N_B}, \quad (3.19)$$

com os potenciais químicos sendo dados por

$$\mu_A = -2J_{AA} \cos \frac{2\pi q_A}{M} + U_{AA} n_A + U_{AB} n_B \quad (3.20a)$$

$$\mu_B = -2J_{BB} \cos \frac{2\pi q_B}{M} + U_{BB} n_B + U_{AB} n_A \quad (3.20b)$$

onde $n_j \equiv N_j/M$ é a densidade de átomos da espécie j .

Observe que as expressões obtidas para os potenciais químicos via equação de GP, (3.8a) e (3.8b), e Teoria de Bogoliubov, (3.20a) e (3.20b), estão relacionadas como

$$\mu_j^{(\text{GP})} \xrightarrow{N_j \rightarrow \infty} \mu_j^{(\text{BOG})}. \quad (3.21)$$

Não há inconsistência nos resultados obtidos, pois no limite termodinâmico ($N, M \rightarrow \infty$ com N/M fixa) um condensado de bósons se torna indistinguível, na prática, de um estado coerente [7].

3.2.1 A Hamiltoniana Efetiva

A Teoria de Bogoliubov parte do pressuposto de que uma fração majoritária dos átomos do sistema está no estado condensado de modo que a depleção atômica é desprezível. Nestas condições, a dinâmica da mistura na vizinhança dos estados de equilíbrio pode ser descrita por uma Hamiltoniana Efetiva obtida desprezando os termos de ordem superior a dois na Hamiltoniana Grande-Canônica. Levando em conta que $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ é apenas uma constante e que $\hat{\mathcal{H}}^{(1)}$ é identicamente nulo devido às equações de equilíbrio, vemos que a Hamiltoniana Efetiva da mistura é o próprio termo quadrático $\hat{\mathcal{H}}^{(2)}$ da expansão em ordem normal (3.14a) que reescrevemos da forma

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}^{(2)} = & \sum_{j=A}^B \sum_k h_{jk,jk} \hat{\mathcal{C}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{jk} + \sum_{k_1, k_2} \delta_M(k_{1A} - k_{2B} - q_A + q_B) h_{Ak_1, Bk_2} \left(\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{Bk_2} + \hat{\mathcal{C}}_{Bk_2}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{Ak_1} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j,l=A}^B \sum_{k_1, k_2} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - q_j - q_l) \Delta_{jk_1, lk_2} \left(\hat{\mathcal{C}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{lk_2} \hat{\mathcal{C}}_{jk_1} \right) \end{aligned} \quad (3.22a)$$

onde definimos as quantidades

$$h_{jk,jk} \equiv \epsilon_{jk}^{(q_j)} + U_{jj} n_j \quad (3.22b)$$

$$h_{Ak_1, Bk_2} \equiv U_{AB} \sqrt{n_A n_B} \quad (3.22c)$$

$$\Delta_{jk_1, lk_2} \equiv U_{jl} \sqrt{n_j n_l}. \quad (3.22d)$$

com $\epsilon_{jk}^{(q)} \equiv e_{jk} - e_{jq}$ sendo dada explicitamente por

$$\epsilon_{jk}^{(q)} = 2J_{jj} \left(\cos \frac{2\pi q}{M} - \cos \frac{2\pi k}{M} \right). \quad (3.23)$$

Vamos nos referir aos dois primeiros termos de (3.22a) como o **termo que conserva o número de átomos** e o último como o **termo de emparelhamento** que viola esta conservação. Uma inspeção da Hamiltoniana Efetiva mostra que, de fato, a Aproximação de Bogoliubov introduz duas quebras contínuas de simetria associadas com a violação da conservação do número de átomos de cada espécie. Mostraremos, a posteriori, que como consequência destas violações aparecem dois modos espúrios de energia zero no espectro das excitações elementares que correspondem aos estados de equilíbrio indiferente do sistema.

3.2.2 Acoplamento de quase-momentos na Hamiltoniana Efetiva

A Hamiltoniana Efetiva (3.22a) pode ser decomposta como a soma de dois termos dos quais um envolve a interação entre átomos da mesma espécie e o outro a interação entre átomos de espécies diferentes. O primeiro termo desta decomposição pode ser interpretado como a Hamiltoniana de um sistema composto de dois subsistemas independentes de uma única componente. Deste modo, a análise da estrutura de acoplamento se reduz à determinação dos pares de quase-momentos acoplados em subsistemas de uma única componente. Mais adiante mostraremos que o termo que envolve a interação entre átomos de espécies diferentes acopla os pares de quase-momentos acoplados em cada uma das espécies e deste modo torna-se importante destacar as propriedades do acoplamento intra-espécies. Todos os cálculos, a partir daqui, serão realizados para M ímpar⁴.

Acoplamento intra-espécies

Este acoplamento ocorre apenas no termo de emparelhamento que viola a conservação do número de átomos. Os pares de quase-momentos acoplados devem satisfazer o vínculo imposto pelo delta modular

$$[k_1 + k_2 - 2q]_{\text{mod } M} = 0 \quad (3.24a)$$

com k_1 e k_2 definidos na primeira zona de Brillouin. As soluções de (3.24a) no plano $k_1 \times k_2$ são uma família de retas que diferem entre si por uma translação igual a um múltiplo de M ,

$$k_1 + k_2 - 2q = \alpha M \quad (3.24b)$$

com α inteiro, e cabe salientar que estamos nos restringindo apenas aos pontos destas retas tais que k_1 e k_2 são inteiros. Esta família de retas têm as seguintes propriedades:

- Se $q = 0$ apenas uma única reta da família contém pontos localizados na primeira zona de Brillouin⁵,

$$k_1 + k_2 = 0. \quad (3.25)$$

- Se $q \neq 0$ apenas duas retas da família contêm pontos localizados na primeira zona de Brillouin,

$$k_1 + k_2 - 2q = 0 \quad (3.26a)$$

$$k_1 + k_2 - 2q = \nu(q)M \quad (3.26b)$$

⁴No Apêndice B apresentamos a mesma discussão da estrutura de acoplamento para o caso M par.

⁵Quando dizemos que um ponto (k_1, k_2) está localizado na primeira zona de Brillouin significa que ambos os quase-momentos do par estão definidos dentro da primeira zona.

com

$$\nu(q) \equiv \begin{cases} -1, & \text{se } q > 0 \\ 1, & \text{se } q < 0 \end{cases}. \quad (3.26c)$$

Os pares acoplados são os pontos das retas (3.26a) e (3.26b) que estão dentro da primeira zona de Brillouin. Se levarmos em conta que os pontos destas duas retas estão relacionados por uma translação de $\nu(q)M$ observamos que existem pontos em (3.26a) cuja translação leva aos pontos de (3.26b) que estão localizados na primeira zona de Brillouin.

Abaixo vamos mostrar nosso procedimento para determinar os pares acoplados, onde discutiremos separadamente os casos $q = 0$, $q > 0$ e $q < 0$.

- (i) Para $q = 0$ vemos de (3.25) que os pares acoplados envolvem quase-momentos opostos,

$$(k, -k) \quad \text{com} \quad -\frac{M-1}{2} \leq k \leq \frac{M-1}{2}. \quad (3.27)$$

Dos M pares, $M-1$ têm quase-momentos distintos ($k \neq 0$) e um tem quase-momentos idênticos ($k = 0$).

- (ii) Para $q > 0$ vamos definir na reta (3.26a) um segmento com extremidades dadas pelos pontos

$$\left(\frac{M-1}{2} + 2q, -\frac{M-1}{2}\right) \quad \text{e} \quad \left(-\frac{M-1}{2}, \frac{M-1}{2} + 2q\right). \quad (3.28)$$

Neste segmento de reta existem $M + 2q$ pontos dos quais $M - 2q$ estão dentro da primeira zona de Brillouin e $4q$ estão fora. Em cada um dos $4q$ pares fora apenas um dos quase-momentos não está definido na primeira zona de Brillouin e tal fato nos permite distinguir dois grupos formados por $2q$ pares nos quais em um k_1 está fora e no outro está k_2 . Assim, podemos classificar os pontos deste segmento de reta em três grupos (pontos apresentados em ordem **decrecente** de k_1):

- Grupo **I** formado por $2q$ pontos onde k_1 está fora da primeira zona de Brillouin,

$$\left(\frac{M-1}{2} + 2q, -\frac{M-1}{2}\right), \dots, \left(\frac{M-1}{2} + 1, -\frac{M-1}{2} + 2q - 1\right).$$

- Grupo **II** com $M - 2q$ pontos onde ambos os quase-momentos, k_1 e k_2 , estão localizados na primeira zona de Brillouin,

$$\left(\frac{M-1}{2}, -\frac{M-1}{2} + 2q\right), \dots, (q, q), \dots, \left(-\frac{M-1}{2} + 2q, \frac{M-1}{2}\right).$$

Este grupo inclui o único par de quase-momentos idênticos, (q, q) , que envolve o quase-momento do estado ocupado pelos átomos no condensado.

- Grupo **III** formado por $2q$ pontos onde k_2 está fora da primeira zona de Brillouin,

$$\left(-\frac{M-1}{2} + 2q - 1, \frac{M-1}{2} + 1\right), \dots, \left(-\frac{M-1}{2}, \frac{M-1}{2} + 2q\right).$$

Note que os $2q$ pontos da reta (3.26b) localizados na primeira zona de Brillouin estão relacionados por uma translação de $-M$ com os $4q$ pontos dos grupos **I** e **III** do segmento em (3.26a) pois esta correspondência é de dois para um. Os pontos equivalentes dos grupos **I** e **III** são aqueles relacionados por

$$k_1^{\text{III}} = k_1^{\text{I}} - M \quad \text{e} \quad k_2^{\text{III}} = k_2^{\text{I}} + M. \quad (3.29)$$

Desta maneira, é suficiente realizar apenas a translação dos pontos de um destes dois grupos e esta escolha fixa os valores de k_1 ou de k_2 na primeira zona de Brillouin. Assim, concluímos que o conjunto dos pares de quase-momentos da mesma espécie acoplados na Hamiltoniana Efetiva é formado por dois subconjuntos nos quais em um temos os **pares não-reduzidos** que satisfazem (3.26a) e no outro os **pares reduzidos** que satisfazem (3.26b).

- (iii) Para $q < 0$ definimos na reta (3.26a) um segmento com extremidades dadas pelos pontos

$$\left(-\frac{M-1}{2} - 2|q|, \frac{M-1}{2}\right) \quad \text{e} \quad \left(\frac{M-1}{2}, -\frac{M-1}{2} - 2|q|\right), \quad (3.30)$$

que também podem ser classificados de acordo com os grupos (pontos apresentados em ordem **crescente** de k_1):

- Grupo **I** formado por $2|q|$ pontos onde k_1 está fora da primeira zona de Brillouin,

$$\left(-\frac{M-1}{2} - 2|q|, \frac{M-1}{2}\right), \dots, \left(-\frac{M-1}{2} - 1, \frac{M-1}{2} - 2|q| + 1\right).$$

- Grupo **II** com $M - 2|q|$ pontos onde ambos os quase-momentos, k_1 e k_2 , estão localizados na primeira zona de Brillouin,

$$\left(-\frac{M-1}{2}, \frac{M-1}{2} - 2|q|\right), \dots, (-|q|, -|q|), \dots, \left(\frac{M-1}{2} - 2|q|, -\frac{M-1}{2}\right),$$

que inclui o único par de quase-momentos idênticos $(-|q|, -|q|)$.

- Grupo **III** formado por $2|q|$ pontos onde k_2 está fora da primeira zona de Brillouin,

$$\left(\frac{M-1}{2} - 2|q| + 1, -\frac{M-1}{2} - 1\right), \dots, \left(\frac{M-1}{2}, -\frac{M-1}{2} - 2|q|\right).$$

Dado o segmento acima, o procedimento para a determinação dos pares acoplados é exatamente o mesmo realizado para o caso $q > 0$. Observe que existe uma correspondência entre os pares acoplados para $q < 0$ e $q > 0$. No plano $k_1 \times k_2$ esses pares estão relacionados por uma reflexão com respeito a reta $k_1 + k_2 = 0$ de modo que se (k_1, k_2) é um par de quase-momentos acoplados para $q > 0$ então o par refletido $(-k_2, -k_1)$ é o correspondente par acoplado para $q < 0$.

Na Tabela 3.1 apresentamos os pares de quase-momentos acoplados da mesma espécie nos casos $q > 0$ e $q < 0$.

M ímpar	
$q > 0$	
Não-reduzidos	$\left(\frac{M-1}{2}, -\frac{M-1}{2} + 2q\right) \cdots (q, q) \cdots \left(-\frac{M-1}{2} + 2q, \frac{M-1}{2}\right)$
Reduzidos	$\left(-\frac{M-1}{2} + 2q - 1, -\frac{M-1}{2}\right) \cdots \left(-\frac{M-1}{2}, -\frac{M-1}{2} + 2q - 1\right)$
$q < 0$	
Não-reduzidos	$\left(-\frac{M-1}{2}, \frac{M-1}{2} - 2 q \right) \cdots (- q , - q) \cdots \left(\frac{M-1}{2} - 2 q , -\frac{M-1}{2}\right)$
Reduzidos	$\left(\frac{M-1}{2} - 2 q + 1, \frac{M-1}{2}\right) \cdots \left(\frac{M-1}{2}, \frac{M-1}{2} - 2 q + 1\right)$

Tabela 3.1: Tabela com os pares de quase-momentos da mesma espécie acoplados para M ímpar nos casos $q > 0$ e $q < 0$. Os pares não-reduzidos satisfazem $k_1 + k_2 - 2q = 0$ e os reduzidos $k_1 + k_2 - 2q = \nu(q)M$. Os pares estão apresentados em ordem decrescente (crescente) de k_1 para $q > 0$ ($q < 0$).

As propriedades do acoplamento intra-espécies discutidas aqui podem ser visualizadas geometricamente se considerarmos diagramas no plano $k_1 \times k_2$, veja Figura 3.1. O quadrante de linhas sólidas de centro na origem e lado igual a $M - 1$ define a primeira zona de Brillouin no sentido que todos os pontos no seu interior e fronteira envolvem quase-momentos que estão na primeira zona. A equação (3.26a) com k_1 restrito na primeira zona define um segmento de reta neste plano no qual identificamos dois subconjuntos de pontos sendo que um está definido dentro da primeira zona e o outro fora. O processo de redução é a translação de k_2 de modo a trazer os pontos que estão fora para dentro da primeira zona resultando nos pares reduzidos. Assim, vemos que este procedimento reproduz a propriedade dos pares não-reduzidos e reduzidos estarem definidos em grupos distintos. Outra propriedade ilustrada nos diagramas é a correspondência entre pares acoplados para $q > 0$ e $q < 0$. Pelos diagramas fica evidente que estes pares estão relaci-

onados através de uma reflexão com respeito a reta $k_1 + k_2 = 0$ que associa o par (k_1, k_2) no par refletido $(-k_2, -k_1)$.

Figura 3.1: Diagrama de acoplamento de quase-momentos da mesma espécie para $M = 9$ e (a) $q = 1$ e (b) $q = -1$. O quadrante de linhas sólidas delimita no plano $k_1 \times k_2$ a primeira zona de Brillouin. Para cada valor de $-4 \leq k_1 \leq 4$ determinamos o correspondente par k_2 através da relação $k_2 = -k_1 + 2q$. Os dois pontos identificados pelo símbolo “ $\times$ ” estão fora e a redução destes pontos para a primeira zona resulta nos pares reduzidos (a) $(-4, 6) \rightarrow (-4, -3)$ e $(-3, 5) \rightarrow (-3, -4)$ e (b) $(3, -5) \rightarrow (3, 4)$ e $(4, -6) \rightarrow (4, 3)$. Note que os pares de quase-momentos acoplados em (a) e (b) estão relacionados por uma reflexão com respeito à reta $k_1 + k_2 = 0$ representada pela linha ponto-tracejada.

Acoplamento inter-espécies

Este acoplamento ocorre no termo da Hamiltoniana Efetiva que envolve a interação entre átomos de espécies diferentes tanto nos termos que conservam o número de átomos quanto no de emparelhamento. Em nosso procedimento, para cada par de quase-momentos definido no segmento de reta da espécie A , determinamos com quais pares do segmento de reta da espécie B que são acoplados pelas equações de vínculo provenientes dos deltas modulares.

No termo que conserva o número de átomos os pares acoplados satisfazem o vínculo

$$[k_A - k_B - q_A + q_B]_{\text{mod } M} = 0. \quad (3.31)$$

Desta maneira, se não restringirmos os valores de k_A e k_B à primeira zona de Brillouin, o par de quase-momentos da espécie B que é acoplado a um dado par de quase-momentos

da espécie A é determinado a partir das equações

$$\begin{cases} k_{1A} - k_{3B} - q_A + q_B = 0, \\ k_{2A} - k_{4B} - q_A + q_B = 0, \end{cases} \quad (3.32a)$$

que podem ser reescritas na forma

$$\begin{cases} k_{3B} - q_B = k_{1A} - q_A \\ k_{4B} - q_B = k_{2A} - q_A \end{cases} . \quad (3.32b)$$

Somando estas equações obtemos a relação

$$k_{3B} + k_{4B} - 2q_B = k_{1A} + k_{2A} - 2q_A. \quad (3.32c)$$

Se levarmos em conta que (k_{1A}, k_{2A}) é um par acoplado em A , ou seja, que satisfaz $k_{1A} + k_{2A} - 2q_A = 0$ segue que $k_{3B} + k_{4B} - 2q_B = 0$ e, portanto, (k_{3B}, k_{4B}) é um par acoplado em B .

Já no termo de emparelhamento os pares acoplados devem satisfazer

$$[k_A + k_B - q_A - q_B]_{\text{mod } M} = 0. \quad (3.33)$$

Nestas condições, os pares de quase-momentos da espécie B que são acoplados ao par (k_{1A}, k_{2A}) são obtidos através das equações

$$\begin{cases} k_{1A} + k_{5B} - q_A - q_B = 0 \\ k_{2A} + k_{6B} - q_A - q_B = 0 \end{cases} \quad (3.34a)$$

que podem ser colocadas da forma

$$\begin{cases} k_{5B} - q_B = -(k_{1A} - q_A) = k_{2A} - q_A \\ k_{6B} - q_B = -(k_{2A} - q_A) = k_{1A} - q_A \end{cases} . \quad (3.34b)$$

Comparando as relações (3.34b) com (3.32b) segue que

$$k_{5B} = k_{4B} \quad \text{e} \quad k_{6B} = k_{3B}. \quad (3.34c)$$

Logo, os pares de quase-momentos acoplados de espécies diferentes e sem a restrição de

estarem definidos na primeira zona de Brillouin são

$$\left\{ \begin{array}{c} (k_{1A}, k_{2A}) \\ (k_{2A}, k_{1A}) \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{c} (k_{3B}, k_{4B}) \\ (k_{4B}, k_{3B}) \end{array} \right\}. \quad (3.35)$$

com $k_{1A} \leftrightarrow k_{3B}$ e $k_{2A} \leftrightarrow k_{4B}$ no termo que conserva o número de átomos e $k_{1A} \leftrightarrow k_{4B}$ e $k_{2A} \leftrightarrow k_{3B}$ no termo de emparelhamento. Identificados todos estes pares acoplados, o passo final é realizar a redução dos quase-momentos que estão fora da primeira zona de Brillouin.

3.2.3 As equações de Bogoliubov-de Gennes

Uma vez determinada toda a estrutura de acoplamento de quase-momentos, a Hamiltoniana Efetiva pode ser reescrita como uma soma de termos cada um deles envolvendo os pares de quase-momentos de A e B que são acoplados,

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \sum_I \hat{\mathcal{H}}_I^{(2)} + \sum_D \hat{\mathcal{H}}_D^{(2)} \quad (3.36)$$

onde $\hat{\mathcal{H}}_I^{(2)}$ e $\hat{\mathcal{H}}_D^{(2)}$ são, respectivamente, os termos que envolvem o acoplamento dos pares de quase-momentos idênticos e distintos de cada espécie,

$$(i) \quad (q_A, q_A) \leftrightarrow (q_B, q_B)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_I^{(2)} = & U_{AA}n_A\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A} + U_{BB}n_B\hat{\mathcal{C}}_{Bq_B}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bq_B} + \frac{U_{AA}n_A}{2}(\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}^{\dagger 2} + \hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}^2) \\ & + \frac{U_{BB}n_B}{2}(\hat{\mathcal{C}}_{Bq_B}^{\dagger 2} + \hat{\mathcal{C}}_{Bq_B}^2) + U_{AB}\sqrt{n_An_B}(\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bq_B} + \hat{\mathcal{C}}_{Bq_B}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}) \\ & + U_{AB}\sqrt{n_An_B}(\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bq_B}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{Bq_B}\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}) \end{aligned} \quad (3.37a)$$

$$(ii) \quad \left\{ \begin{array}{c} (k_{1A}, k_{2A}) \\ (k_{2A}, k_{1A}) \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{c} (k_{3B}, k_{4B}) \\ (k_{4B}, k_{3B}) \end{array} \right\}$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_D^{(2)} = & (\epsilon_{Ak_1}^{(q_A)} + U_{AA}n_A)\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1} + (\epsilon_{Ak_2}^{(q_A)} + U_{AA}n_A)\hat{\mathcal{C}}_{Ak_2}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Ak_2} \\ & + (\epsilon_{Bk_3}^{(q_B)} + U_{BB}n_B)\hat{\mathcal{C}}_{Bk_3}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bk_3} + (\epsilon_{Bk_4}^{(q_B)} + U_{BB}n_B)\hat{\mathcal{C}}_{Bk_4}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bk_4} \\ & + U_{AA}n_A(\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Ak_2}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{Ak_2}\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1}) + U_{BB}n_B(\hat{\mathcal{C}}_{Bk_3}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bk_4}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{Bk_4}\hat{\mathcal{C}}_{Bk_3}) \\ & + U_{AB}\sqrt{n_An_B}(\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bk_3} + \hat{\mathcal{C}}_{Ak_2}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bk_4} + \hat{\mathcal{C}}_{Bk_3}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1} + \hat{\mathcal{C}}_{Bk_4}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Ak_2}) \\ & + U_{AB}\sqrt{n_An_B}(\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bk_4}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{Ak_2}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{Bk_3}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{Bk_4}\hat{\mathcal{C}}_{Ak_1} + \hat{\mathcal{C}}_{Bk_3}\hat{\mathcal{C}}_{Ak_2}), \end{aligned} \quad (3.37b)$$

com $\epsilon_{jk}^{(q)}$ dada em (3.23) e os índices I e D significam que as somas são realizadas nos subconjuntos dos pares acoplados de quase-momentos idênticos e distintos.

A decomposição (3.36) mostra que a Hamiltoniana Efetiva possui uma forma **bloco diagonal** e esta propriedade aparece como consequência direta da estrutura de acoplamento de quase-momentos. A Hamiltoniana Efetiva pode ser colocada na forma matricial como

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathcal{C}_A^\dagger & \mathcal{C}_B^\dagger & \mathcal{C}_A & \mathcal{C}_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h & \Delta \\ \Delta^\star & h^\star \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{C}_A \\ \mathcal{C}_B \\ \mathcal{C}_A^\dagger \\ \mathcal{C}_B^\dagger \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \text{Tr } h \quad (3.38a)$$

onde h e Δ são as matrizes de dimensão $2M \times 2M$ cujos elementos são dados em (3.22b), (3.22c) e (3.22d) e $\mathcal{C}_j$ é a matriz coluna cujas entradas são os operadores deslocados de aniquilação da espécie j , $\hat{\mathcal{C}}_{jk}$, ordenados em uma sequência crescente de valores do quase-momento no intervalo $[-(M-1)/2, (M-1)/2]$,

$$\mathcal{C}_j = \left[\hat{\mathcal{C}}_{j-\frac{(M-1)}{2}} \quad \cdots \quad \hat{\mathcal{C}}_{j+\frac{(M-1)}{2}} \right]^T. \quad (3.38b)$$

Note que os termos $\hat{\mathcal{H}}_I^{(2)}$ e $\hat{\mathcal{H}}_D^{(2)}$ correspondem, respectivamente, aos blocos de dimensão 4×4 e 8×8 da matriz (3.38a). Do ponto de vista computacional, o problema da diagonalização total de uma matriz de dimensão $4M \times 4M$ é reduzido a diagonalização destes blocos. Para M ímpar, a Hamiltoniana Efetiva possui um único bloco de dimensão 4×4 e $(M-1)/2$ blocos de dimensão 8×8 .

A diagonalização de uma forma bilinear de operadores bosônicos é um procedimento padrão em problemas de muitos corpos e todo o seu detalhamento teórico⁶ pode ser encontrado na referência [57]. As energias e a composição das excitações elementares são determinadas resolvendo as equações de BdG,

$$\begin{bmatrix} h & \Delta \\ \Delta^\star & h^\star \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_A \\ u_B \\ v_A \\ v_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_A \\ u_B \\ v_A \\ v_B \end{bmatrix}, \quad (3.39a)$$

onde $\begin{bmatrix} u_A & u_B & v_A & v_B \end{bmatrix}^T$ denota o autovetor associado à energia de excitação E , com u_j e v_j sendo as matrizes coluna das amplitudes u_{jk} e v_{jk} com a mesma ordenação de quase-momentos dada em (3.38b). As equações de BdG podem ser visualizadas como um

⁶No Apêndice A apresentamos uma breve discussão das principais propriedades do problema de autovalores que são relevantes para o projeto da tese.

problema de autovalores de uma matriz não-hermiteana de dimensão $4M \times 4M$ onde as energias de excitação seguem como soluções da equação característica

$$\det \begin{bmatrix} h - E & \Delta \\ \Delta^* & h^* + E \end{bmatrix} = 0. \quad (3.39b)$$

Quando as energias de excitação são reais os autovetores aparecem em pares associados a autovalores opostos $(E, -E)$ e isto ocorre como consequência da não-hermiticidade da matriz de BdG. Cada um destes pares corresponde a um modo de excitação e assim o espectro apresenta $2M$ modos.

Levando em conta a estrutura bloco-diagonal da Hamiltoniana Efetiva, a determinação das energias das excitações elementares é realizada resolvendo as equações de BdG (3.39a) para cada bloco, o que vai nos permitir identificar um dubleto de modos de energia zero e $(M - 1)/2$ quadrupletos no espectro das excitações.

Dubleto

Para o bloco associado ao termo (3.37a) que acopla os singletos (q_A, q_A) e (q_B, q_B) , as equações de BdG têm a forma

$$\begin{bmatrix} U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_A n_B} & U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_A n_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_A n_B} & U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_A n_B} & U_{BB}n_B \\ U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_A n_B} & U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_A n_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_A n_B} & U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_A n_B} & U_{BB}n_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Aq_A} \\ u_{Bq_B} \\ v_{Aq_A} \\ v_{Bq_B} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Aq_A} \\ u_{Bq_B} \\ v_{Aq_A} \\ v_{Bq_B} \end{bmatrix}. \quad (3.40a)$$

A equação característica associada fica

$$E^4 = 0 \quad (3.40b)$$

que possui quatro soluções identicamente nulas. Como as soluções surgem em pares, identificamos um dubleto constituído por dois modos de energia zero. Os autovetores associados a estes modos são não-normalizáveis uma vez que as amplitudes dos autovetores

satisfazem as relações

$$v_{Aq_A} = -u_{Aq_A} \quad \text{e} \quad v_{Bq_B} = -u_{Bq_B} \quad (3.41)$$

que seguem de (3.40a). Os modos de energia zero aparecem no espectro das excitações elementares como consequência de duas quebras contínuas de simetria devido à violação da conservação do número de átomos das espécies A e B introduzida pela Aproximação de Bogoliubov [57].

Podemos mostrar que (3.37a) pode ser escrito como a soma de dois termos cinéticos e este fato nos permite interpretar os modos de energia zero como sendo estados de equilíbrio indiferente da mistura. Para isto vamos definir os operadores hermiteanos e compatíveis

$$\hat{P}_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{C}}_{Aq_A} + \hat{\mathcal{C}}_{Aq_A}^\dagger) \quad \text{e} \quad \hat{P}_B = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{C}}_{Bq_B} + \hat{\mathcal{C}}_{Bq_B}^\dagger), \quad (3.42)$$

que, em analogia à descrição de um oscilador harmônico quântico, correspondem aos operadores momento das espécies A e B . Nestas condições, (3.37a) pode ser expresso da forma

$$\hat{\mathcal{H}}_I^{(2)} = \begin{bmatrix} \hat{P}_A & \hat{P}_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{BB}n_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{P}_A \\ \hat{P}_B \end{bmatrix} - \frac{U_{AA}n_A}{2} - \frac{U_{BB}n_B}{2}. \quad (3.43)$$

A diagonalização de (3.43) resulta em

$$\hat{\mathcal{H}}_I^{(2)} = \frac{\hat{\mathcal{P}}_1^2}{2\gamma_+} + \frac{\hat{\mathcal{P}}_2^2}{2\gamma_-} - \frac{U_{AA}n_A}{2} - \frac{U_{BB}n_B}{2} \quad (3.44)$$

onde

$$\frac{1}{\gamma_\pm} \equiv U_{AA}n_A + U_{BB}n_B \pm \sqrt{(U_{AA}n_A - U_{BB}n_B)^2 + 4U_{AB}^2n_An_B} \quad (3.45)$$

são os autovalores da matriz e

$$\hat{\mathcal{P}}_1 \equiv \cos \frac{\theta}{2} \hat{P}_A + \sin \frac{\theta}{2} \hat{P}_B \quad (3.46a)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_2 \equiv -\sin \frac{\theta}{2} \hat{P}_A + \cos \frac{\theta}{2} \hat{P}_B, \quad (3.46b)$$

com

$$\tan \theta = \frac{2U_{AB}\sqrt{n_An_B}}{U_{AA}n_A - U_{BB}n_B}. \quad (3.46c)$$

são definidos a partir dos correspondentes autovetores dados por

$$\frac{1}{\gamma_+} \rightarrow \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}^T \quad \text{e} \quad \frac{1}{\gamma_-} \rightarrow \begin{bmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}^T. \quad (3.47)$$

Observe que, a menos de constantes aditivas, $\hat{\mathcal{H}}_I^{(2)}$ corresponde a uma soma de termos cinéticos nos quais as constantes $\gamma_{\pm}$ podem ser interpretadas como parâmetros inerciais. Assim, os modos de energia zero no espectro das excitações elementares correspondem a estados de equilíbrio indiferente do sistema.

Quadrupletos

Para o bloco associado ao termo (3.37b) que acopla os dubletos $\{(k_{1A}, k_{2A}), (k_{2A}, k_{1A})\}$ e $\{(k_{3B}, k_{4B}), (k_{4B}, k_{3B})\}$, as equações de BdG são tais que

$$h = \begin{bmatrix} \epsilon_{Ak_1}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & 0 & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & 0 \\ 0 & \epsilon_{Ak_2}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & 0 & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & 0 & \epsilon_{Bk_3}^{(q_B)} + U_{BB}n_B & 0 \\ 0 & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & 0 & \epsilon_{Bk_4}^{(q_B)} + U_{BB}n_B \end{bmatrix} \quad (3.48a)$$

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 & U_{AA}n_A & 0 & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AA}n_A & 0 & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & 0 \\ 0 & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & 0 & U_{BB}n_B \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & 0 & U_{BB}n_B & 0 \end{bmatrix} \quad (3.48b)$$

com o autovetor associado à energia de excitação E tendo a forma

$$\mathcal{V} = \begin{bmatrix} u_{Ak_1} & u_{Ak_2} & u_{Bk_3} & u_{Bk_4} & v_{Ak_1} & v_{Ak_2} & v_{Bk_3} & v_{Bk_4} \end{bmatrix}^T. \quad (3.49)$$

Entretanto, é possível notar que a equação de autovalores pode ser decomposta em dois grupos de equações de dimensão 4×4 , a saber,

- **Grupo I** para autovetores da forma

$$\mathcal{V}_I = \begin{bmatrix} u_{Ak_1}^I & 0 & u_{Bk_3}^I & 0 & 0 & v_{Ak_2}^I & 0 & v_{Bk_4}^I \end{bmatrix}^T, \quad (3.50a)$$

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \epsilon_{Ak_1}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{Bk_3}^{(q_B)} + U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{BB}n_B \\ U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{Ak_2}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{Bk_4}^{(q_B)} + U_{BB}n_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Ak_1}^I \\ u_{Bk_3}^I \\ v_{Ak_2}^I \\ v_{Bk_4}^I \end{bmatrix} \\
&= E_I \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Ak_1}^I \\ u_{Bk_3}^I \\ v_{Ak_2}^I \\ v_{Bk_4}^I \end{bmatrix}. \quad (3.50b)
\end{aligned}$$

• **Grupo II** para autovetores da forma

$$\mathcal{V}_{II} = \begin{bmatrix} 0 & u_{Ak_2}^{II} & 0 & u_{Bk_4}^{II} & v_{Ak_1}^{II} & 0 & v_{Bk_3}^{II} & 0 \end{bmatrix}^T, \quad (3.51a)$$

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \epsilon_{Ak_2}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{Bk_4}^{(q_B)} + U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{BB}n_B \\ U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{Ak_1}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{Bk_3}^{(q_B)} + U_{BB}n_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Ak_2}^{II} \\ u_{Bk_4}^{II} \\ v_{Ak_1}^{II} \\ v_{Bk_3}^{II} \end{bmatrix} \\
&= E_{II} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Ak_2}^{II} \\ u_{Bk_4}^{II} \\ v_{Ak_1}^{II} \\ v_{Bk_3}^{II} \end{bmatrix}. \quad (3.51b)
\end{aligned}$$

As equações características para cada um dos sistemas (3.50b) e (3.51b) são, respectivamente,

$$\begin{aligned}
& \left[E_I^2 - 2\varepsilon_{k_{1A},k_{2A}}^{(-)} E_I - \varepsilon_{k_{1A},k_{2A}}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_{1A},k_{2A}}^{(+)} + 2U_{AA}n_A \right) + \varepsilon_{k_{1A},k_{2A}}^{(-)2} \right] \\
& \times \left[E_I^2 - 2\varepsilon_{k_{3B},k_{4B}}^{(-)} E_I - \varepsilon_{k_{3B},k_{4B}}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_{3B},k_{4B}}^{(+)} + 2U_{BB}n_B \right) + \varepsilon_{k_{3B},k_{4B}}^{(-)2} \right] - 4\varepsilon_{k_{1A},k_{2A}}^{(+)} \varepsilon_{k_{3B},k_{4B}}^{(+)} U_{AB}^2 n_A n_B = 0
\end{aligned} \quad (3.52a)$$

e

$$\begin{aligned}
& \left[E_{II}^2 - 2\varepsilon_{k_{2A},k_{1A}}^{(-)} E_{II} - \varepsilon_{k_{2A},k_{1A}}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_{2A},k_{1A}}^{(+)} + 2U_{AA}n_A \right) + \varepsilon_{k_{2A},k_{1A}}^{(-)2} \right] \\
& \times \left[E_{II}^2 - 2\varepsilon_{k_{4B},k_{3B}}^{(-)} E_{II} - \varepsilon_{k_{4B},k_{3B}}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_{4B},k_{3B}}^{(+)} + 2U_{BB}n_B \right) + \varepsilon_{k_{4B},k_{3B}}^{(-)2} \right] - 4\varepsilon_{k_{2A},k_{1A}}^{(+)} \varepsilon_{k_{4B},k_{3B}}^{(+)} U_{AB}^2 n_A n_B = 0
\end{aligned} \quad (3.52b)$$

com $\varepsilon_{k_{1j},k_{2j}}^{(+)}$ e $\varepsilon_{k_{1j},k_{2j}}^{(-)}$ sendo, respectivamente, as combinações simétricas e anti-simétricas das energias $\epsilon_{jk}^{(qj)}$, dada em (3.23), associadas aos quase-momentos de um par (k_{1j}, k_{2j}) ,

$$\varepsilon_{k_{1j},k_{2j}}^{(+)} \equiv \frac{\epsilon_{jk_1}^{(qj)} + \epsilon_{jk_2}^{(qj)}}{2} = 2J_{jj} \left[\cos \frac{2\pi q_j}{M} - \cos \frac{\pi(k_1 + k_2)}{M} \cos \frac{\pi(k_1 - k_2)}{M} \right] \quad (3.52c)$$

$$\varepsilon_{k_{1j},k_{2j}}^{(-)} \equiv \frac{\epsilon_{jk_1}^{(qj)} - \epsilon_{jk_2}^{(qj)}}{2} = 2J_{jj} \sin \frac{\pi(k_1 + k_2)}{M} \sin \frac{\pi(k_1 - k_2)}{M}, \quad (3.52d)$$

onde a dependência com o quase-momento do condensado fica especificada pela espécie $j = A, B$. Note que estas combinações são funções pares de k_1 , k_2 e q_j . Quando a interação entre as diferentes espécies atômicas é desprezada, $U_{AB} = 0$, as equações (3.52a) e (3.52a) se reduzem ao produto de duas equações quadráticas que são, para cada espécie, as equações que determinam as energias das excitações elementares para um sistema com uma única componente [49].

Como consequência da relação de anti-simetria $\epsilon_{k_{1j},k_{2j}}^{(-)} = -\epsilon_{k_{2j},k_{1j}}^{(-)}$, segue que se $E_I^{(i)}$ é uma solução de (3.52a) então $E_{II}^{(i)} = -E_I^{(i)}$ é de (3.52b). Deste modo, o par de autovalores associado ao i -ésimo modo de excitação é $(E_I^{(i)}, E_{II}^{(i)})$ com os correspondentes autovetores $(\mathcal{V}_I^{(i)}, \mathcal{V}_{II}^{(i)})$ relacionados por

$$\mathcal{V}_{II}^{(i)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathcal{V}_I^{(i)} \quad (3.53a)$$

da qual extraímos as relações entre amplitudes

$$(u_{Ak_2}^{II}, u_{Bk_4}^{II}, v_{Ak_1}^{II}, v_{Bk_3}^{II}) = (v_{Ak_2}^I, v_{Bk_4}^I, u_{Ak_1}^I, u_{Bk_3}^I). \quad (3.53b)$$

Para demonstrar a validade das relações (3.53b), note que por um processo de rearranjo transformamos o problema de autovalores (3.50b) no (3.51b) com (3.53b) seguindo da comparação entre os autovetores. Como mencionado anteriormente, quando as energias de excitação são reais os autovetores aparecem em pares associados aos autovalores opostos $(E_I^{(i)}, E_{II}^{(i)} = -E_I^{(i)})$. Cada um destes pares corresponde a um modo de excitação e a energia de excitação é o autovalor associado ao autovetor de norma positiva.

Capítulo 4

Estabilidade dinâmica das misturas binárias de condensados

De acordo com a Teoria de Bogoliubov, um estado de equilíbrio é dinamicamente estável se todas as energias de excitação que compõem o espectro são reais. A existência de uma única energia de excitação complexa é suficiente para garantir a instabilidade dinâmica do estado de equilíbrio. Nesta análise os modos de energia zero não são levados em consideração, pois correspondem aos estados de equilíbrio indiferente do sistema.

O procedimento para investigar a estabilidade dinâmica da mistura de condensados começa identificando sob quais condições as energias de um particular quadrupletto são reais. Estas condições apresentam-se na forma de desigualdades que devem ser obedecidas pelos coeficientes das equações características que, por sua vez, são funções dos parâmetros de controle do sistema. Tais desigualdades definem domínios de validade no espaço dos parâmetros de controle cuja interseção é a região onde as energias de excitação de um quadrupletto são reais. Estendendo a análise para os demais quadrupletos do espectro, determinaremos o domínio de estabilidade dinâmica da mistura que corresponde a região na qual o espectro das energias de excitação é real.

Explorando a versatilidade das redes ópticas podemos simplificar a discussão da estabilidade dinâmica dos estados de equilíbrio considerando um sistema invariante por **inversão de cor**. A inversão de cor é uma operação de conjugação de espécies, $A \leftrightarrow B$, que, em termos dos operadores que criam e aniquilam átomos nos sítios da rede, é definida pela transformação unitária [51],

$$\hat{C}^\dagger \hat{a}_{A\lambda}^\dagger \hat{C} = \hat{a}_{B\lambda}^\dagger, \quad \hat{C}^2 = 1. \quad (4.1)$$

A Hamiltoniana MBH será invariante por inversão de cor se impusermos as condições

$$J_{AA} = J_{BB} \equiv J \quad \text{e} \quad U_{AA} = U_{BB} \equiv U. \quad (4.2)$$

A intensidade de tunelamento J é uma grandeza estritamente positiva e aqui não será imposta qualquer restrição de sinal para as intensidades de interação U e U_{AB} , o que nos permitirá estabelecer as condições de estabilidade dinâmica tanto em regimes de interação atômica atrativa quanto repulsiva.

Aqui investigaremos a estabilidade dinâmica de dois casos de misturas de condensados onde, em um caso, os átomos de cada espécie ocupam o mesmo estado de quase-momento, $q_A = q_B$ e, no outro, quase-momentos opostos, $q_A = -q_B$. Começaremos analisando uma mistura de condensados com quase-momento nulo e em seguida misturas de condensados com quase-momento finito. Neste estudo consideraremos apenas estados de equilíbrio que não violam a invariância por inversão de cor, o que exige $n_A = n_B \equiv n/2$ com n sendo a densidade total de átomos.

4.1 Condensados com quase-momento nulo

Considere um estado de equilíbrio formado pela mistura de dois condensados nos quais os átomos de cada espécie ocupam um estado de quase-momento nulo,

$$q_A = 0 \quad \text{e} \quad q_B = 0. \quad (4.3)$$

As regras de acoplamento discutidas na Subseção 3.2.2 revelam que a Hamiltoniana Efetiva acopla os pares de quase-momentos $(k_A, -k_A)$ e $(k_B, -k_B)$ e Deste modo, cada quadrupletto pode ser especificado univocamente pelo quase-momento k com valores restritos no intervalo

$$1 \leq k \leq \frac{M-1}{2}. \quad (4.4)$$

Como consequência, os coeficientes associados às potências ímpares de E nas equações características (3.52a) e (3.52b) se anulam já que as combinações anti-simétricas (3.52d) são identicamente iguais a zero, $\varepsilon_{k,-k}^{(-)} = 0$. Assim, as equações características são reduzidas a

$$\left[E_I^2 - \varepsilon_{k,-k}^{(+)} \left(\varepsilon_{k,-k}^{(+)} + (U + U_{AB})n \right) \right] \left[E_I^2 - \varepsilon_{k,-k}^{(+)} \left(\varepsilon_{k,-k}^{(+)} + (U - U_{AB})n \right) \right] = 0 \quad (4.5a)$$

e

$$\left[E_{II}^2 - \varepsilon_{k,-k}^{(+)} \left(\varepsilon_{k,-k}^{(+)} + (U + U_{AB})n \right) \right] \left[E_{II}^2 - \varepsilon_{k,-k}^{(+)} \left(\varepsilon_{k,-k}^{(+)} + (U - U_{AB})n \right) \right] = 0 \quad (4.5b)$$

com $\varepsilon_{k,-k}^{(+)}$ sendo dada, a partir de (3.52c), por

$$\varepsilon_{k,-k}^{(+)} = 4J\epsilon_k, \quad \epsilon_k \equiv \sin^2 \frac{\pi k}{M}. \quad (4.5c)$$

De acordo com (4.5a) e (4.5b), as energias de excitação de um quadrupeto são reais se

$$\varepsilon_{k,-k}^{(+)} \left[\varepsilon_{k,-k}^{(+)} + (U + U_{AB})n \right] > 0 \quad \text{e} \quad \varepsilon_{k,-k}^{(+)} \left[\varepsilon_{k,-k}^{(+)} + (U - U_{AB})n \right] > 0 \quad (4.6a)$$

são satisfeitas simultaneamente. Nestas condições, as raízes,

$$E_I^{(\pm\pm)} = E_{II}^{(\pm\pm)} = \pm \sqrt{\varepsilon_{k,-k}^{(+)} \left[\varepsilon_{k,-k}^{(+)} + (U \pm U_{AB})n \right]} \quad (4.6b)$$

podem ser agrupadas em pares que identificam quatro modos de excitação,

$$\begin{aligned} (E_I^{(++)}, E_{II}^{(-+)} &= -E_I^{(++)}), \\ (E_I^{(+-)}, E_{II}^{(--)} &= -E_I^{(+-)}), \\ (E_I^{(-+)}, E_{II}^{(++)} &= -E_I^{(-+)}), \\ (E_I^{(--)}, E_{II}^{(+-)} &= -E_I^{(--)}). \end{aligned} \quad (4.6c)$$

Para analisar (4.6a) tomaremos a intensidade de tunelamento atômico J como uma escala de energia e, deste modo, a dependência destas desigualdades com os parâmetros de controle se reduz às quantidades

$$\tilde{U} \equiv \frac{Un}{4J} \quad \text{e} \quad \tilde{U}_{AB} \equiv \frac{U_{AB}n}{4J}. \quad (4.6d)$$

No plano $\tilde{U} \times \tilde{U}_{AB}$ as desigualdades ficam

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \epsilon_k > 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \epsilon_k > 0 \quad (4.6e)$$

com a fronteira sendo duas retas de inclinações ± 1 que se cruzam no eixo das abscissas em $\tilde{U} = -\epsilon_k$. A interseção dos domínios de validade de cada desigualdade em (4.6e) determina a região onde energias de excitação de um quadrupeto são reais.

Para estabelecer as condições em que o espectro das energias de excitação seja real,

precisamos achar a interseção dos domínios de (4.6e) para cada quadrupletto k . Note que a variação de k afeta apenas a abscissa do ponto de cruzamento das retas, $\tilde{U} = -\epsilon_k$, com as inclinações permanecendo fixas já que são independentes do quase-momento. Levando em conta que ϵ_k é uma função crescente e discreta de k e com valores no intervalo

$$\sin^2 \frac{\pi}{M} \leq \epsilon_k \leq \cos^2 \frac{\pi}{2M}, \quad (4.7)$$

a abscissa do ponto de cruzamento decresce com k e, desta forma, fica evidente que na região onde as energias de excitação do quadrupletto com $k = 1$ são reais o espectro é real. Portanto, as desigualdades

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \sin^2 \frac{\pi}{M} > 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \sin^2 \frac{\pi}{M} > 0 \quad (4.8)$$

definem a região do espaço dos parâmetros de controle onde a mistura de condensados com $q = 0$ é dinamicamente estável, veja Figura 4.1.

Figura 4.1: Diagrama de estabilidade dinâmica de uma mistura de condensados com $q = 0$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios. O domínio de estabilidade dinâmica da mistura, representado em cinza-claro, corresponde à região onde as energias de excitação do quadrupletto $k = 1$ são reais pois neste domínio o espectro é real. Fora, região cinza-escuro, a mistura é dinamicamente instável. As duas retas de inclinações ± 1 cruzam o eixo das abscissas em $\tilde{U} \approx -0.12$.

Em sistemas com uma única espécie bosônica [19, 49] um condensado com $q = 0$ é dinamicamente estável se

$$\tilde{U} + \sin^2 \frac{\pi}{M} > 0. \quad (4.9)$$

Este resultado segue de (4.8) se tomamos $\tilde{U}_{AB} = 0$ e revela que para $\tilde{U}$ repulsivo este condensado é sempre dinamicamente estável. Por outro lado, a mistura de dois condensados com $q = 0$ pode ser dinamicamente instável neste regime de interação intra-

espécie repulsiva. De (4.8) vemos que para valores de $\tilde{U}_{AB}$, repulsivo ou atrativo, tais que $|\tilde{U}_{AB}| > \tilde{U} + \sin^2 \frac{\pi}{M}$ a mistura é dinamicamente instável e tal fato evidencia o papel desestabilizador da interação inter-espécies. Observe que no limite termodinâmico basta que a magnitude de $\tilde{U}_{AB}$ seja ligeiramente maior que $\tilde{U}$ para que a mistura desestabilize.

4.2 Condensados com quase-momento finito: $q_A = q_B$

Considere agora uma mistura de condensados nos quais os átomos de cada espécie ocupam o mesmo estado de quase-momento finito,

$$q_A = q_B = q \quad \text{com} \quad q \neq 0. \quad (4.10)$$

Tomaremos aqui $q > 0$ pois as condições de estabilidade dinâmica para $q < 0$ são exatamente as mesmas.

Neste caso, os pares de quase-momentos de cada espécie que são acoplados na Hamiltoniana Efetiva têm os mesmos valores, (k_{1A}, k_{2A}) e (k_{1B}, k_{2B}) , de modo que cada quadrupletto do espectro pode ser simplesmente identificado pelo par (k_1, k_2) . Como consequência de $k_{3B} = k_{1B}$ e $k_{4B} = k_{2B}$, as equações características (3.52a) e (3.52b) podem ser reescritas da forma

$$\begin{aligned} & \left[E_I^2 - 2\varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)} E_I - \varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U + U_{AB})n \right) + \varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)2} \right] \\ & \times \left[E_I^2 - 2\varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)} E_I - \varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U - U_{AB})n \right) + \varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)2} \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.11a)$$

e

$$\begin{aligned} & \left[E_{II}^2 + 2\varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)} E_{II} - \varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U + U_{AB})n \right) + \varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)2} \right] \\ & \times \left[E_{II}^2 + 2\varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)} E_{II} - \varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left(\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U - U_{AB})n \right) + \varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (4.11b)$$

As raízes decorrentes de (4.11a) e (4.11b) serão reais se os correspondentes discriminantes forem positivos,

$$\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left[\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U + U_{AB})n \right] > 0 \quad \text{e} \quad \varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left[\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U - U_{AB})n \right] > 0. \quad (4.12)$$

Se estas desigualdades são simultaneamente satisfeitas então as raízes

$$E_I^{(\pm\pm)} = \varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)} \pm \sqrt{\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left[\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U \pm U_{AB}) n \right]} \quad (4.13a)$$

$$E_{II}^{(\pm\pm)} = -\varepsilon_{k_1, k_2}^{(-)} \pm \sqrt{\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} \left[\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} + (U \pm U_{AB}) n \right]} \quad (4.13b)$$

podem ser agrupadas em quatro pares como em (4.6c) cada um associado a um modo de excitação.

Com auxílio da definição (3.52c) e levando em conta que (k_1, k_2) satisfaz o vínculo de acoplamento intra-espécies, podemos mostrar que a combinação simétrica $\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)}$ pode ser reescrita como

$$\varepsilon_{k_1, k_2}^{(+)} = 4J \cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi r_1}{M} \quad (4.14a)$$

onde a dependência com os quase-momentos k_1 e k_2 se reduz simplesmente a uma dependência com o **quase-momento relativo** $r_1 \equiv k_1 - q$ que assume valores discretos no intervalo

$$1 \leq r_1 \leq \frac{M-1}{2}. \quad (4.14b)$$

Nesta parametrização um quadrupletto r_1 é especificado pelo par $(-r_1, r_1)$ se for não-reduzido ou pelo par $(-r_1, r_1 - M)$ se for reduzido (veja detalhes no Apêndice C). Com isto podemos expressar as desigualdades (4.12), em termos das quantidades $\tilde{U}$ e $\tilde{U}_{AB}$, da forma

$$\cos \frac{2\pi q}{M} \left[(\tilde{U} + \tilde{U}_{AB}) + \cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1} \right] > 0 \quad \text{e} \quad \cos \frac{2\pi q}{M} \left[(\tilde{U} - \tilde{U}_{AB}) + \cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1} \right] > 0 \quad (4.15)$$

com

$$\epsilon_{r_1} \equiv \sin^2 \frac{\pi r_1}{M} \quad \text{e} \quad \sin^2 \frac{\pi}{M} \leq \epsilon_{r_1} \leq \cos^2 \frac{\pi}{2M}. \quad (4.16)$$

A análise das desigualdades depende do sinal de $\cos \frac{2\pi q}{M}$ que, por sua vez, depende da localização do quase-momento q na primeira zona de Brillouin, a saber:

1. **Quartos centrais** definidos pela condição $\cos \frac{2\pi q}{M} > 0$ que é satisfeita se

$$0 < \frac{2\pi q}{M} < \frac{\pi}{2}.$$

2. **Quartos laterais** definidos pela condição $\cos \frac{2\pi q}{M} < 0$ que é satisfeita se

$$\frac{\pi}{2} < \frac{2\pi q}{M} < \pi.$$

4.2.1 Quase-momentos nos quartos centrais

Aqui as desigualdades (4.12) ficam

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1} > 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1} > 0. \quad (4.17a)$$

Vemos então que este caso é análogo ao caso $q = 0$, a fronteira sendo duas retas de inclinação ± 1 que se cruzam no eixo das abscissas em

$$\tilde{U} = -\cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1}. \quad (4.17b)$$

Levando em conta que a abscissa do ponto de cruzamento (4.17b) é uma função decrescente de ϵ_{r_1} e que as inclinações das retas independem do quase-momento relativo, como no caso $q = 0$, concluímos que a mistura é dinamicamente estável na região onde as energias de excitação do quadrupletto $r_1 = r_{1\text{mín}} = 1$ são reais,

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M} > 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M} > 0. \quad (4.18)$$

Na Figura 4.2 apresentamos o diagrama de estabilidade dinâmica de uma mistura de condensados com $q = 1$ em uma rede com $M = 9$ sítios.

Figura 4.2: Diagrama de estabilidade dinâmica de uma mistura de condensados com $q = 1$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios. A mistura é dinamicamente estável na região em que as energias do quadrupletto com $r_1 = 1$ são reais, representada na figura em cinza-claro. As duas retas de inclinações ± 1 interceptam o eixo das abscissas em $\tilde{U} \approx -0.09$.

Comparando os resultados (4.8) e (4.18), é imediato notar que o caso q finito com valores nos quartos centrais da primeira zona corresponde a uma generalização do caso $q = 0$ e Deste modo, somos conduzidos a conclusões equivalentes. Note que se tomamos

$\tilde{U}_{AB} = 0$ em (4.8), obtemos a condição de estabilidade dinâmica de um condensado com quase-momento q nos quartos centrais da primeira zona,

$$\tilde{U} > -\cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M}. \quad (4.19)$$

Fica evidente que, para $\tilde{U}$ repulsivo, estes condensados são sempre dinamicamente estáveis [19, 49]. Entretanto, isto não acontece com a mistura que fica dinamicamente instável se

$$|\tilde{U}_{AB}| > \tilde{U} + \cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M}. \quad (4.20)$$

Analisando como função do quase-momento do condensado, vemos que a abscissa $\tilde{U} = -\cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M}$ do ponto de cruzamento de (4.18) é uma função crescente de q . Deste modo, observamos que, quando $|\tilde{U}_{AB}|$ cresce com $\tilde{U} > 0$ fixo, misturas com diferentes quase-momentos ficam dinamicamente instáveis seguindo um ordenamento tal que a primeira é a mistura com $q = q_{\text{máx}}$ e a última é a com $q = 0$ onde

$$q_{\text{máx}} = \text{Floor} \left(\frac{M}{4} \right) = \begin{cases} \frac{M-1}{4}, & \text{para } \frac{M-1}{2} \text{ par} \\ \frac{M-3}{4}, & \text{para } \frac{M-1}{2} \text{ ímpar} \end{cases} \quad (4.21)$$

é o maior quase-momento definido nos quartos centrais com $\text{Floor}(x)$ sendo a função que retorna o maior inteiro que seja menor ou igual a x . Nestas condições, vemos que os domínios onde todas as misturas são dinamicamente estáveis ou instáveis são separados por um intervalo de energia $|\Delta \tilde{U}_{AB}|$ de magnitude igual a

$$|\Delta \tilde{U}_{AB}| = 2 \sin^2 \frac{\pi q_{\text{máx}}}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M}. \quad (4.22)$$

No limite termodinâmico as desigualdades (4.18) se reduzem simplesmente a

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} > 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} > 0. \quad (4.23)$$

Isto revela que, para $\tilde{U}$ repulsivo, todas as misturas de condensados com $q_A = q_B$ nos quartos centrais da primeira zona de Brillouin, incluindo $q = 0$, são dinamicamente estáveis desde que $|\tilde{U}_{AB}| < \tilde{U}$. Já quando a magnitude de $\tilde{U}_{AB}$ se torna ligeiramente maior do que $\tilde{U}$, todas as misturas se tornam dinamicamente instáveis, evidenciando o papel desestabilizador de $\tilde{U}_{AB}$. Para $\tilde{U}$ atrativo estas misturas são sempre dinamicamente instáveis.

4.2.2 Quase-momentos nos quartos laterais

Neste caso o sinal das desigualdades (4.15) inverte,

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1} < 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1} < 0. \quad (4.24)$$

A fronteira continua sendo retas de inclinação ± 1 que se cruzam no eixo das abscissas em $\tilde{U} = -\cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1}$. Como nos casos anteriores a variação do quase-momento relativo r_1 afeta apenas o ponto de cruzamento, que agora é uma função crescente de ϵ_{r_1} , com as inclinações das retas permanecendo fixas. Assim, vemos imediatamente que a mistura de condensados com quase-momento nos quartos laterais é dinamicamente estável na região onde as energias de excitação do quadrupletto com $r_1 = r_{1\text{mín}}$ são reais,

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M} < 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M} < 0. \quad (4.25)$$

Na Figura 4.3 apresentamos o diagrama de estabilidade dinâmica de uma mistura de condensados com $q = 4$ em uma rede com $M = 9$ sítios.

Figura 4.3: Diagrama de estabilidade dinâmica de uma mistura de condensados com $q = 4$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios. O domínio de estabilidade dinâmica da mistura (região cinza-claro) é a região onde as energias de excitação do quadrupletto com $r_1 = 1$ são reais. As duas retas interceptam o eixo das abscissas em $\tilde{U} \approx 0.11$.

Tomando $\tilde{U}_{AB} = 0$ em (4.25), vemos que um condensado com q nos quartos laterais da primeira zona é dinamicamente estável se

$$\tilde{U} < -\cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M}. \quad (4.26)$$

Note que estes condensados são sempre dinamicamente estáveis para $\tilde{U}$ atrativo. No

caso de uma mistura, novamente verificamos o efeito desestabilizador de $\tilde{U}_{AB}$ que torna a mistura dinamicamente instável se

$$|\tilde{U}_{AB}| > - \left(\tilde{U} + \cos \frac{2\pi q}{M} \sin^2 \frac{\pi}{M} \right). \quad (4.27)$$

Uma vez que a abscissa $\tilde{U} = -\cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1}$ é uma função crescente de q verificamos que, quando $|\tilde{U}_{AB}|$ cresce para $\tilde{U} < 0$ fixo, a primeira mistura que se torna dinamicamente instável é a com $q = q_{\min}$ e a última é a com $q = (M-1)/2$ onde

$$q_{\min} = \text{Floor} \left(\frac{M}{4} \right) + 1 = \begin{cases} \frac{M+3}{4}, & \text{para } \frac{M-1}{2} \text{ par} \\ \frac{M+1}{4}, & \text{para } \frac{M-1}{2} \text{ ímpar} \end{cases} \quad (4.28)$$

é o menor quase-momento definido nos quartos laterais da primeira zona. O intervalo de energia $|\Delta\tilde{U}_{AB}|$ que separa os domínios onde as misturas são todas ou dinamicamente estáveis ou instáveis é dado por

$$|\Delta\tilde{U}_{AB}| = \left(\cos \frac{2\pi q_{\min}}{M} + \cos \frac{\pi}{M} \right) \sin^2 \frac{\pi}{M}. \quad (4.29)$$

No limite termodinâmico as desigualdades (4.25) se reduzem a

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} < 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} < 0 \quad (4.30)$$

mostrando que, para $\tilde{U}$ atrativo, todas as misturas de condensados com $q_A = q_B$ nos quartos laterais da primeira zona de Brillouin são dinamicamente estáveis se $|\tilde{U}_{AB}| < |\tilde{U}|$. Para $\tilde{U}$ repulsivo estas misturas são sempre dinamicamente instáveis.

4.3 Condensados contra-propagantes: $q_A = -q_B$

Considere uma mistura de dois condensados contra-propagantes nos quais os átomos de cada espécie ocupam estados de quase-momentos finitos e opostos,

$$q_A = -q_B = q, \quad q > 0. \quad (4.31)$$

Neste caso, a Hamiltoniana Efetiva acopla os pares (k_{1A}, k_{2A}) e $(k_{3B} = -k_{2B}, k_{4B} = -k_{1B})$. De acordo com as definições (3.52c) e (3.52d), seguem respectivamente que

$$\varepsilon_{k_{3B}, k_{4B}}^{(+)} = \varepsilon_{k_{1B}, k_{2B}}^{(+)} \quad \text{e} \quad \varepsilon_{k_{3B}, k_{4B}}^{(-)} = -\varepsilon_{k_{1B}, k_{2B}}^{(-)}. \quad (4.32)$$

Como consequência, as equações características (3.52a) e (3.52b) ficam idênticas a uma equação quadrática em E^2 e assumem a forma

$$E_I^4 + a_2 E_I^2 + a_0 = 0 \quad \text{e} \quad E_{II}^4 + a_2 E_{II}^2 + a_0 = 0 \quad (4.33a)$$

onde

$$a_2 \equiv -32J^2 \cos \frac{4\pi q}{M} \epsilon_{r_1}^2 - \left(32J^2 \sin^2 \frac{2\pi q}{M} + 8JU n \cos \frac{2\pi q}{M} \right) \epsilon_{r_1} \quad (4.33b)$$

$$a_0 \equiv \left[16J^2 \epsilon_{r_1}^2 + \left(4J(U + U_{AB}) n \cos \frac{2\pi q}{M} - 16J^2 \sin^2 \frac{2\pi q}{M} \right) \epsilon_{r_1} \right] \\ \times \left[16J^2 \epsilon_{r_1}^2 + \left(4J(U - U_{AB}) n \cos \frac{2\pi q}{M} - 16J^2 \sin^2 \frac{2\pi q}{M} \right) \epsilon_{r_1} \right] \quad (4.33c)$$

com

$$\epsilon_{r_1} \equiv \sin^2 \frac{\pi r_1}{M} \quad \text{e} \quad \sin^2 \frac{\pi}{M} \leq \epsilon_{r_1} \leq \cos^2 \frac{\pi}{2M}. \quad (4.33d)$$

De acordo com (4.33a), as energias de excitação de um quadrupeto são reais se as desigualdades

$$a_2 < 0, \quad a_0 > 0 \quad \text{e} \quad a_2^2 - 4a_0 > 0 \quad (4.34)$$

forem satisfeitas simultaneamente. Nestas condições, as raízes

$$E_I^{(\pm\pm)} = E_{II}^{(\pm\pm)} \equiv \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{-a_2 \pm \sqrt{a_2^2 - 4a_0}} \quad (4.35)$$

podem ser agrupadas em quatro pares como em (4.6c), cada um associado a um modo de excitação. As desigualdades em (4.34) podem ser expressas em termos dos parâmetros $\tilde{U}$ e $\tilde{U}_{AB}$ como

$$a_2 < 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \cos \frac{2\pi q}{M} (\tilde{U} + \tilde{U}_I) > 0 \quad (4.36a)$$

$$a_0 > 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \tilde{U}_{II}) (\tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \tilde{U}_{II}) > 0 \quad (4.36b)$$

$$a_2^2 - 4a_0 > 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (\tilde{U} + \tilde{U}_{III}) \tilde{U}_{IV} + \tilde{U}_{AB}^2 > 0, \quad (4.36c)$$

onde introduzimos as quantidades

$$\tilde{U}_I(q, r_1) \equiv \cos \frac{2\pi q}{M} \left[\left(1 - \tan^2 \frac{2\pi q}{M} \right) \epsilon_{r_1} + \tan^2 \frac{2\pi q}{M} \right], \quad (4.37a)$$

$$\tilde{U}_{II}(q, r_1) \equiv \cos \frac{2\pi q}{M} \left[\left(1 + \tan^2 \frac{2\pi q}{M} \right) \epsilon_{r_1} - \tan^2 \frac{2\pi q}{M} \right], \quad (4.37b)$$

$$\tilde{U}_{III}(q, r_1) \equiv \cos \frac{2\pi q}{M} \epsilon_{r_1}, \quad (4.37c)$$

$$\tilde{U}_{IV}(q, r_1) \equiv 4 \cos \frac{2\pi q}{M} \tan^2 \frac{2\pi q}{M} (1 - \epsilon_{r_1}), \quad (4.37d)$$

que carregam a dependência com o quase-momento do quadrupletto através de r_1 e com o quase-momento dos condensados e também satisfazem as relações

$$\tilde{U}_{III} = \frac{\tilde{U}_I + \tilde{U}_{II}}{2} \quad \text{e} \quad \tilde{U}_{IV} = 2 \left(\tilde{U}_I - \tilde{U}_{II} \right). \quad (4.38)$$

A dependência das desigualdades com o sinal de $\cos \frac{2\pi q}{M}$ torna necessário realizar a análise separadamente nos quartos centrais ($\cos \frac{2\pi q}{M} > 0$) e laterais ($\cos \frac{2\pi q}{M} < 0$) da primeira zona de Brillouin. Em cada caso, determinaremos inicialmente a região onde as energias de excitação de um particular quadrupletto são reais e em seguida estabeleceremos a região onde o espectro é real que corresponde ao domínio de estabilidade dinâmica da mistura. Por fim, analisaremos a estabilidade dinâmica no limite termodinâmico.

4.3.1 Quase-momentos nos quartos centrais

Este caso engloba todos os valores de quase-momento tais que $0 < \frac{2\pi q}{M} < \frac{\pi}{2}$.

Análise para um particular quadrupletto

Vamos começar descrevendo a fronteira e o domínio de cada desigualdade no plano $\tilde{U} \times \tilde{U}_{AB}$ do espaço dos parâmetros de controle mantendo fixo o valor de r_1 .

(A) $a_0 > 0$: A fronteira de (4.36b) é um par de retas concorrentes de inclinações ± 1 que se cruzam no eixo das abscissas no ponto $(-\tilde{U}_{II}(r_1), 0)$. Esta desigualdade é válida em dois domínios distintos,

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \tilde{U}_{II}(r_1) > 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \tilde{U}_{II}(r_1) > 0 \quad (4.39)$$

ou

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} + \tilde{U}_{II}(r_1) < 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} + \tilde{U}_{II}(r_1) < 0. \quad (4.40)$$

- (B) $a_2^2 - 4a_0 > 0$: A fronteira de (4.36c) é uma parábola com eixo de simetria no eixo das abscissas, vértice localizado em $(-\tilde{U}_{III}(r_1), 0)$ e convexa de curvatura $\kappa(r_1) = -2\tilde{U}_{IV}^{-1}(r_1)$ estritamente negativa. O domínio de validade desta desigualdade é o conjunto de todos os pontos exteriores à parábola.
- (C) $a_2 < 0$: A fronteira de (4.36a) é uma reta que cruza perpendicularmente o eixo das abscissas no ponto $(-\tilde{U}_I(r_1), 0)$. O domínio de validade desta desigualdade são todos os pontos do semi-plano $\tilde{U} > -\tilde{U}_I(r_1)$.

A região onde as energias de excitação de um particular quadrupletos são reais é determinada pela interseção dos domínios de validade identificados acima. As fronteiras estão dispostas no espaço dos parâmetros de controle seguindo o ordenamento das abscissas

$$-\tilde{U}_I(r_1) < -\tilde{U}_{III}(r_1) < -\tilde{U}_{II}(r_1), \quad (4.41)$$

com o vértice da parábola ocupando o ponto médio do segmento que une os pontos $(-\tilde{U}_I(r_1), 0)$ e $(-\tilde{U}_{II}(r_1), 0)$. Nesta disposição, a parábola tangencia o par de retas concorrentes nos pontos simétricos $(-\tilde{U}_I(r_1), \pm \frac{\tilde{U}_{IV}}{2}(r_1))$ com a reta perpendicular passando por estes pontos, veja a Figura 4.4. Deste modo, a região onde as energias de excitação de um quadrupletos são reais é formado por duas partes, uma limitada com o formato de um *rabo de peixe* em $\tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_1)$ e outra ilimitada que se estende para $+\infty$ em $\tilde{U} > -\tilde{U}_{II}(r_1)$.

Análise para o espectro

A interseção de todas as regiões onde as energias de excitação dos quadrupletos são reais define o domínio onde o espectro é real. O nosso procedimento para achar este domínio é estabelecer para cada uma das desigualdades a região onde sua validade é assegurada para todo quadrupletos e a interseção destes domínios será a região onde o espectro é real.

- (A) $a_0 > 0$: Note que a variação de r_1 afeta apenas a abscissa do ponto de cruzamento $(-\tilde{U}_{II}(r_1), 0)$ do par de retas concorrentes, com $\tilde{U}_{II}$ dado em (4.37b), que é uma função decrescente de ϵ_{r_1} . As inclinações permanecem contantes pois independem de r_1 . A interseção dos domínios definidos por todas as retas concorrentes identifica regiões distintas onde $a_0 > 0$ é válida para todo quadrupletos, veja Figura 4.5(a). Este domínio tem as seguintes características:

- Para $\tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}})$ e $\tilde{U} > -\tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}})$ temos regiões ilimitadas que se estendem no plano, respectivamente, para $-\infty$ e $+\infty$;

Figura 4.4: Região (cinza-claro) onde as energias de excitação do quadrupeto $r_1 = 1$ são reais para uma mistura de condensados contra-propagantes com $q = 1$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios. Esta região é formada por duas partes, uma limitada com o formato de um *rabo de peixe* em $\tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_1 = 1)$ e uma ilimitada que se estende para $+\infty$ em $\tilde{U} > -\tilde{U}_{II}(r_1 = 1)$ com $-\tilde{U}_{II}(r_1 = 1) \approx 0.39$.

- Na região intermediária, $-\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) < \tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}})$, temos $r_{1\text{máx}} - 1$ quadrados centrados nos pontos

$$\left(-\frac{\tilde{U}_{II}(r_1) + \tilde{U}_{II}(r_1 + 1)}{2}, 0 \right), \quad r_{1\text{mín}} \leq r_1 \leq r_{1\text{máx}} - 1 \quad (4.42a)$$

com diagonais nas direções dos eixos e de comprimento $D(r_1) = \tilde{U}_{II}(r_1 + 1) - \tilde{U}_{II}(r_1)$ dado explicitamente por

$$D(r_1) = \frac{\sin \frac{2\pi}{M} \sin \frac{(2r_1+1)\pi}{M}}{\cos \frac{2\pi q}{M}}. \quad (4.42b)$$

(B) $a_2^2 - 4a_0 > 0$: Tanto a abscissa do vértice $(-\tilde{U}_{III}(r_1), 0)$ quanto a curvatura $\kappa(r_1) = -2\tilde{U}_{IV}^{-1}(r_1)$ da parábola, com $\tilde{U}_{III}$ e $\tilde{U}_{IV}$ dados em (4.37c) e (4.37d), são funções decrescentes de ϵ_{r_1} . Deste modo, parábolas associadas a diferentes quadrupletos não se cruzam já que as curvaturas diminuem quando r_1 aumenta. Assim, fica evidente que o domínio de validade delimitado pela parábola do quadrupletto $r_1 = r_{1\text{mín}}$ está totalmente imerso no domínio dos demais e, portanto, corresponde ao domínio onde a validade de $a_2^2 - 4a_0 > 0$ é garantida para todo quadrupletto, veja Figura 4.5(b).

(C) $a_2 < 0$: A abscissa do ponto de cruzamento $(-\tilde{U}_I(r_1), 0)$ da reta perpendicular, com $\tilde{U}_I$ dado em (4.37a), pode ser uma função crescente ou decrescente de ϵ_{r_1} e isto depende do sinal de $(1 - \tan^2 \frac{2\pi q}{M})$. Desta maneira, é necessário considerar separadamente os dois casos definidos pelo sinal da diferença:

- (i) Se $\tan^2 \frac{2\pi q}{M} < 1$, que engloba todos os quase-momentos tais que $0 < \frac{2\pi q}{M} < \frac{\pi}{4}$, a abscissa de $(-\tilde{U}_I(r_1), 0)$ é uma função decrescente de ϵ_{r_1} . Levando em conta que o domínio de validade para um particular quadrupletto r_1 é $\tilde{U} > -\tilde{U}_I(r_1)$, constatamos imediatamente que se

$$\tilde{U} > -\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) \quad (4.43a)$$

então $a_2 < 0$ é válida para todo quadrupletto, veja Figura 4.5(c).

- (ii) Se $\tan^2 \frac{2\pi q}{M} > 1$, que engloba todos os quase-momentos tais que $\frac{\pi}{4} < \frac{2\pi q}{M} < \frac{\pi}{2}$, a abscissa de $(-\tilde{U}_I(r_1), 0)$ é uma função crescente de ϵ_{r_1} . Logo, neste caso, se

$$\tilde{U} > -\tilde{U}_I(r_{1\text{máx}}) \quad (4.43b)$$

então $a_2 < 0$ é válida para todo quadrupletto.

Figura 4.5: Domínios (em cinza-claro) onde a validade de (a) $a_0 > 0$, (b) $a_2^2 - 4a_0 > 0$ e (c) $a_2 < 0$ é assegurada para todo quadrupeto de uma mistura de condensados contra-propagantes com $q = 1$ em uma rede com $M = 9$ sítios. Para este caso, $r_{1\min} = 1$ e $r_{1\max} = 4$. Em (a) temos duas regiões ilimitadas em $\tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_1 = 4)$ e $\tilde{U} > -\tilde{U}_{II}(r_1 = 1)$ com $-\tilde{U}_{II}(r_1 = 4) \approx -0.73$ e $-\tilde{U}_{II}(r_1 = 1) \approx 0.39$ e três quadrados na região intermediária. Em (b) o domínio é a região exterior a parábola cuja abscissa do vértice vale $-\tilde{U}_{III}(r_1 = 1) \approx -0.09$ e curvatura $\kappa(r_1 = 1) \approx -1.05$. Em (c) o domínio é o semi-plano $\tilde{U} > -\tilde{U}_I(r_1 = 1)$ com a reta perpendicular ocupando a abscissa $-\tilde{U}_I(r_1 = 1) \approx -0.57$.

Domínio de Estabilidade Dinâmica

Uma vez identificados os domínios onde as desigualdades são satisfeitas individualmente para todo quadrupeto, estamos prontos para determinar a região do espaço dos parâmetros de controle onde o espectro é real.

Começamos analisando a interseção dos domínios para $a_0 > 0$ e $a_2^2 - 4a_0 > 0$. Podemos distinguir duas possibilidades que são definidas pela posição do vértice da parábola $(-\tilde{U}_{III}(r_{1\min}), 0)$ com relação ao segmento que une os pontos $(-\tilde{U}_{II}(r_{1\max}), 0)$ e $(-\tilde{U}_{II}(r_{1\min}), 0)$, a saber:

- (I) Se $-\tilde{U}_{II}(r_{1\max}) < -\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) < -\tilde{U}_{II}(r_{1\min})$ a parábola cruza o eixo das abscissas na região intermediária do domínio de $a_0 > 0$, veja Figura 4.6(a).
- (II) Por outro lado, se $-\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) < -\tilde{U}_{II}(r_{1\max})$ o cruzamento ocorre na região ilimitada do domínio de $a_0 > 0$ que se estende para $-\infty$, veja Figura 4.6(b).

Podemos mostrar que a forma desta interseção está relacionada diretamente com os pontos de cruzamento da parábola ($r_1 = r_{1\min}$) com o par de retas concorrentes que se cruzam

em $(-\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}), 0)$ cujas abscissas são dadas por

$$\begin{aligned}\tilde{U}^{(<)} \equiv & -\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) - \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \\ & - \sqrt{2 \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \left[\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right]}\end{aligned}\quad (4.44)$$

$$\begin{aligned}\tilde{U}^{(>)} \equiv & -\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) - \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \\ & + \sqrt{2 \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \left[\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right]}.\end{aligned}\quad (4.45)$$

Para isto basta notar que

- se $\tilde{U}^{(<)} < -\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) < \tilde{U}^{(>)}$ temos a possibilidade (I); e
- se $-\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) > \tilde{U}^{(>)}$ temos a possibilidade (II).

Em ambos os casos, vemos que a interseção é composta por duas regiões distintas das quais uma está sempre definida para $\tilde{U} < \tilde{U}^{(<)}$ e a outra é determinada a partir da ocorrência de alguma das possibilidades (I) ou (II), veja Figura 4.6.

Resta agora considerar o domínio para $a_2 < 0$. É possível verificar que o efeito deste domínio é a exclusão da região da interseção de $a_0 > 0$ e $a_2^2 - 4a_0 > 0$ definida para $\tilde{U} < \tilde{U}^{(<)}$ pois a abscissa da reta perpendicular é sempre maior do que $\tilde{U}^{(<)}$. Para mostrar isto vamos considerar separadamente os casos:

- Para $0 < \frac{2\pi q}{M} < \frac{\pi}{4}$, onde a abscissa da reta perpendicular é $\tilde{U} = -\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}})$, podemos reescrever (4.44) da forma

$$\begin{aligned}\tilde{U}^{(<)} + \tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) = & - \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \\ & - \sqrt{2 \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \left[\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right]}.\end{aligned}\quad (4.46)$$

Como $\tilde{U}_{II}(r_1)$ é uma função crescente de ϵ_{r_1} , fica evidente que $\tilde{U}^{(<)} + \tilde{U}_I(r_{1\text{mín}})$ é estritamente negativa e, portanto,

$$-\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) > \tilde{U}^{(<)}.\quad (4.47)$$

- Para $\frac{\pi}{4} < \frac{2\pi q}{M} < \frac{\pi}{2}$, onde a abscissa da reta perpendicular é $\tilde{U} = -\tilde{U}_I(r_{1\text{máx}})$, podemos escrever uma expressão para a combinação $\tilde{U}^{(<)} + \tilde{U}_I(r_{1\text{máx}})$ que, com

Figura 4.6: Interseção (cinza-claro) dos domínios onde $a_0 > 0$ e $a_2^2 - 4a_0 > 0$ são válidas para todo quadrupeto nos casos (a) $q = 1$ e (b) $q = 2$ com $M = 9$. Aqui $r_{1\min} = 1$ e $r_{1\max} = 4$. Em (a) a parábola intercepta o eixo das abscissas na região intermediária do domínio de $a_0 > 0$. Nestas condições, vemos que a abscissa $-\tilde{U}_{II}(r_1 = 4) \approx -0.77$ está contida no intervalo $[\tilde{U}^{(<)} \approx -3.14, \tilde{U}^{(>)} \approx -0.22]$ definido pelas abscissas dos pontos de cruzamento da parábola com o par de retas concorrentes que se cruzam em $(-\tilde{U}_{II}(r_1 = 4), 0)$. Em (b) acontece o contrário, a parábola intercepta o eixo das abscissas na região ilimitada $\tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_1 = 4) \approx 0$. No painel dentro de (b) vemos que $-\tilde{U}_{II}(r_1 = 4) > \tilde{U}^{(>)} \approx -0.02$. A linha tracejada corresponde a reta perpendicular do domínio de $a_2 < 0$ localizada em (a) $\tilde{U} = -\tilde{U}_I(r_1 = 1) \approx -0.57$ e (b) $\tilde{U} = -\tilde{U}_I(r_1 = 4) \approx -0.34$, cujo efeito é eliminar a interseção definida para $\tilde{U} < \tilde{U}^{(<)}$ onde em (b) $\tilde{U}^{(<)} \approx -19.7$.

auxílio de (4.44), tem a forma

$$\begin{aligned} \tilde{U}^{(<)} + \tilde{U}_I(r_{1\text{máx}}) = & - \left[\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) - \tilde{U}_I(r_{1\text{máx}}) \right] - \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \\ & - \sqrt{2 \left[\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) - \tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \right] \left[\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) - \tilde{U}_I(r_{1\text{máx}}) \right]}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Como $\tilde{U}_I(r_1)$ e $\tilde{U}_{II}(r_1)$ são, respectivamente, funções decrescente e crescente de ϵ_{r_1} vemos que $\tilde{U}^{(<)} + \tilde{U}_I(r_{1\text{máx}})$ é estritamente negativa e, portanto,

$$-\tilde{U}_I(r_{1\text{máx}}) > \tilde{U}^{(<)}. \quad (4.49)$$

Logo, concluímos que a região da interseção definida para $\tilde{U} < \tilde{U}^{(<)}$ está fora do domínio onde $a_2 < 0$ é válida para todo quadrupletto, veja Figura (4.6) onde representamos com uma linha tracejada a posição da reta perpendicular. Na Figura (4.7) apresentamos o diagrama de estabilidade dinâmica para uma mistura de condensados contra-propagantes com (a) $q = 1$ e (b) $q = 2$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios.

Figura 4.7: Diagrama de estabilidade dinâmica de uma mistura de condensados contra-propagantes com (a) $q = 1$ e (b) $q = 2$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios. Na região representada em cinza-claro a mistura é dinamicamente estável.

Nossa análise revelou que, para valores pequenos do número de sítios M , os diagramas de estabilidade dinâmica para misturas com $q_A = -q_B$, quando comparados aos diagramas do caso $q_A = q_B$, diferem não só pela forma mas também pela sua dependência com

o quase-momento dos condensados. No caso $q_A = q_B$, os diagramas de estabilidade para diferentes valores de q nos quartos centrais correspondem a translações no eixo das abscissas de uma mesma forma que é equivalente a dizer que existe uma invariância da forma dos diagramas com respeito à variação do quase-momento dos condensados. Por outro lado, para $q_A = -q_B$ vemos que isto não ocorre uma vez que a forma depende de q . Como veremos a seguir, as diferenças entre os dois casos se acentuam no limite termodinâmico.

Limite Termodinâmico

Investigaremos agora o diagrama de estabilidade dinâmica da mistura de condensados contra-propagantes no limite termodinâmico para dois valores de quase-momento tomados nas extremidades dos quartos centrais: $q = 1$ e $q = q_{\text{máx}}$ com $q_{\text{máx}}$ dado em (4.21). Para isto basta analisar como este limite afeta os domínios onde cada uma das desigualdades é válida isoladamente para todo quadrupletto através do cálculo do limite $M \rightarrow \infty$ das quantidades: $\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}})$, $\tilde{U}_I(r_{1\text{máx}})$, $\tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}})$, $\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}})$, $\tilde{U}_{III}(r_{1\text{mín}})$ e $\kappa(r_{1\text{mín}}) = -2\tilde{U}_{IV}^{-1}(r_{1\text{mín}})$. Na Tabela 4.1 apresentamos os resultados destes limites para $q = 1$ e $q = q_{\text{máx}}$. Com base nestes resultados, discutiremos como fica a forma destes domínios o que nos permitirá achar o domínio de estabilidade dinâmica.

$q = 1$	$q = q_{\text{máx}}$
$\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}}) \rightarrow 0^+$	$\tilde{U}_I(r_{1\text{máx}}) \rightarrow 0^+$
$\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) \rightarrow 1$	$\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) \rightarrow 0^+$
$\tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \rightarrow 0^-$	$\tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \rightarrow -\infty$
$\tilde{U}_{III}(r_{1\text{mín}}) \rightarrow 0^+$	$\tilde{U}_{III}(r_{1\text{mín}}) \rightarrow 0^+$
$\kappa \rightarrow -\infty$	$\kappa \rightarrow 0^-$

Tabela 4.1: Resumo dos resultados obtidos do cálculo do limite $M \rightarrow \infty$ das quantidades que definem a forma dos domínios onde cada desigualdade é válida isoladamente para todos os quadrupletos do espectro de excitação das misturas de condensados contra-propagantes com $q = 1$ e $q = q_{\text{máx}}$.

(I) $q = 1$

- Para $a_0 > 0$ as regiões ilimitadas estão definidas em $\tilde{U} < -1$ e $\tilde{U} > 0$ pois $\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}) \rightarrow 1$ e $\tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}}) \rightarrow 0^-$. Na região intermediária, à medida que M cresce o número de quadrados aumenta enquanto o tamanho das suas diagonais diminuem, $D \rightarrow 0$ com D dado em (4.42b), de modo que no limite $M \rightarrow \infty$ temos um segmento de reta. Logo, para $-1 < \tilde{U} < 0$, o domínio é simplesmente o trecho da abscissa definida neste intervalo.

- Para $a_2^2 - 4a_0 > 0$, como $\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) \rightarrow 0^+$ e $\kappa \rightarrow -\infty$, vemos que a parábola coincide com o eixo negativo das abscissas. Assim, o domínio é todo o plano excluído este semi-eixo.
- Para $a_2 < 0$ a reta perpendicular coincide com o eixo das ordenadas pois $\tilde{U}_I(r_{1\min}) \rightarrow 0^+$ e, desta forma, seu domínio é o semi-plano $\tilde{U} > 0$.

A interseção destes domínios revela que no limite termodinâmico o domínio de estabilidade dinâmica para a mistura de condensados contra-propagantes com $q = 1$ é definida por

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} > 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} > 0, \quad (4.50)$$

que é o mesmo resultado obtido no limite termodinâmico para misturas com $q_A = q_B$ nos quartos centrais, veja Subseção 4.2.1. Logo, somos levados a conclusões equivalentes.

(II) $q = q_{\max}$

- Os limites $\tilde{U}_{II}(r_{1\max}) \rightarrow 0^+$ e $\tilde{U}_{II}(r_{1\min}) \rightarrow -\infty$ revelam que o domínio de $a_0 > 0$ agora é formado por uma região ilimitada definida em $\tilde{U} < 0$ e todo o eixo positivo das abscissas.
- A parábola de $a_2^2 - 4a_0 > 0$ coincide com o eixo das ordenadas pois $\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) \rightarrow 0^+$ e $\kappa \rightarrow 0^-$. Nestas condições, seu domínio é o semi-plano $\tilde{U} > 0$.
- A reta perpendicular de $a_2 < 0$ coincide com o eixo das ordenadas pois $\tilde{U}_I(r_{1\max}) \rightarrow 0^+$ e o seu domínio é também o semi-plano $\tilde{U} > 0$.

Assim, no limite termodinâmico, o domínio de estabilidade dinâmica da mistura de condensados contra-propagantes com $q = q_{\max}$ é o eixo positivo das abscissas,

$$\tilde{U}_{AB} = 0 \quad \text{com} \quad \tilde{U} > 0. \quad (4.51)$$

Isto nos permite concluir que para $\tilde{U}$ repulsivo a presença de um $\tilde{U}_{AB}$ ligeiramente diferente de zero já desestabiliza completamente a mistura binária de condensados contra-propagantes.

Concluimos que no limite termodinâmico as condições de estabilidade dinâmica de misturas com $q_A = -q_B$ nas proximidades do centro da primeira zona de Brillouin são exatamente as mesmas para o caso de uma mistura com $q_A = q_B$. Por outro lado, se o quase-momento está nas proximidades da borda de separação entre os quartos centrais

e laterais a situação é diferente pois a existência de uma interação inter-espécies ligeiramente diferente de zero desestabiliza completamente a mistura de condensados contra-propagantes.

4.3.2 Quase-momentos nos quartos laterais

Este caso engloba todos os valores de quase-momento tais que $\frac{\pi}{2} < \frac{2\pi q}{M} < \pi$. Todo o procedimento para a determinação do diagrama de estabilidade, neste caso, é análogo ao realizado no caso dos quartos centrais e os diagramas apresentam propriedades análogas diferindo apenas pelo fato de que sua forma é a reflexão em relação a um eixo vertical da forma dos diagramas do caso anterior. Deste modo, seremos sucintos na discussão e apresentaremos os resultados obtidos em uma análise equivalente a realizada anteriormente. Apresentaremos o diagrama de estabilidade dinâmica e discutiremos o limite termodinâmico para os casos $q = q_{\text{mín}}$ com $q_{\text{mín}}$ dado em (4.28) e $q = (M - 1)/2$.

Análise para um particular quadrupletto

Para um particular quadrupletto r_1 vemos que as fronteiras das desigualdades estão ordenadas agora da forma

$$-\tilde{U}_{II}(r_1) < -\tilde{U}_{III}(r_1) < -\tilde{U}_I(r_1). \quad (4.52)$$

Para $a_0 > 0$ temos a mesma fronteira e o mesmo domínio de validade do caso anterior. Para $a_2 < 0$ a reta perpendicular delimita agora o domínio $\tilde{U} < \tilde{U}_I(r_1)$ pois o sinal da desigualdade (4.36a) se inverte devido à negatividade do cosseno. Para $a_2^2 - 4a_0 > 0$, a parábola possui agora curvatura estritamente positiva e seu domínio de validade continua sendo todos os pontos exteriores a ela. A interseção destes domínios identifica a região onde as energias de excitação do quadrupletto r_1 são reais, veja Figura 4.8.

Análise para o espectro e o domínio de estabilidade dinâmica

O domínio de estabilidade dinâmica da mistura resulta da interseção dos domínios onde cada desigualdade é válida isoladamente para todo quadrupletto. O domínio de $a_0 > 0$ é novamente formado por duas regiões ilimitadas só que agora definidas em $\tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_{1\text{mín}})$ e $\tilde{U} > -\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}})$ pois $-\tilde{U}_{II}(r_1)$ é uma função crescente de ϵ_{r_1} . Na região intermediária temos os $r_{1\text{máx}} - 1$ quadrados com diagonais nas direções dos eixos. Para $a_2^2 - 4a_0 > 0$ vemos que o domínio é a região exterior a parábola com $r_1 = r_{1\text{mín}}$ e isto é consequência de $-\tilde{U}_{III}(r_1)$ e $\kappa(r_1)$ serem funções crescentes de ϵ_{r_1} . Já para $a_2 < 0$ encontramos duas possibilidades que dependem da localização de q nos quartos laterais da primeira zona, a saber:

Figura 4.8: Região (cinza-claro) onde as energias de excitação do quadrupeto com $r_1 = 2$ são reais para uma mistura de condensados contra-propagantes com $q = 4$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios. Temos uma região limitada em $\tilde{U} > -\tilde{U}_{II}(r_1 = 2)$ e uma região ilimitada que se estende para $-\infty$ em $\tilde{U} < -\tilde{U}_{II}(r_1 = 2)$ com $-\tilde{U}_{II}(r_1 = 2) \approx 0.31$. Este domínio possui as mesmas propriedades geométricas vistas no caso dos quartos centrais diferindo apenas pela orientação da forma no eixo das abscissas que é uma reflexão em relação a um eixo vertical da forma do domínio do caso anterior.

- (i) Se $\frac{\pi}{2} < \frac{2\pi q}{M} < \frac{3\pi}{4}$ o domínio é o semi-plano $\tilde{U} < -\tilde{U}_I(r_{1\text{máx}})$ uma vez que $-\tilde{U}_I(r_1)$ é uma função decrescente de ϵ_{r_1} .
- (ii) Se $\frac{3\pi}{4} < \frac{2\pi q}{M} < \pi$ o domínio é o semi-plano $\tilde{U} < -\tilde{U}_I(r_{1\text{mín}})$ uma vez que $-\tilde{U}_I(r_1)$ é uma função crescente de ϵ_{r_1} .

Se realizarmos a interseção destes domínios seguindo os mesmos procedimentos realizados no caso dos quartos centrais, chegaremos a conclusões análogas. Novamente a forma da interseção dos domínios de $a_0 > 0$ e $a_2^2 - 4a_0 > 0$ estão relacionadas com os pontos de cruzamento da parábola ($r_1 = r_{1\text{mín}}$) com o par de retas concorrentes que se cruzam no ponto $(-\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}), 0)$ de abscissas dadas em (4.44) e (4.45). É a posição de $(-\tilde{U}_{II}(r_{1\text{máx}}), 0)$ relativo ao segmento que une $(\tilde{U}^{(<)}, 0)$ e $(\tilde{U}^{(>)}, 0)$ que identifica se a parábola intercepta o eixo das abscissas na região intermediária ou ilimitada $(+\infty)$ do domínio de $a_0 > 0$. O efeito do domínio de $a_2 < 0$ é novamente eliminar uma das regiões desta interseção, que neste caso, é a região definida para $\tilde{U} > \tilde{U}^{(>)}$. Isto ocorre pois a abscissa da reta perpendicular é sempre menor do que $\tilde{U}^{(>)}$. Na Figura 4.9 apresentamos o diagrama de estabilidade dinâmica para uma mistura de condensados contra-propagantes com (a) $q = 3$ e (b) $q = 4$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios.

Figura 4.9: Diagrama de estabilidade dinâmica de uma mistura de condensados contra-propagantes com (a) $q = 3$ e (b) $q = 4$ em uma rede óptica com $M = 9$ sítios. Na região representada em cinza-claro a mistura é dinamicamente estável.

Aqui também fica evidente a dependência da forma dos diagramas de estabilidade com o quase-momento dos condensados. Isto não ocorre para misturas com $q_A = q_B$ nos quartos laterais onde existe uma invariância da forma dos diagramas pela variação de q .

Limite Termodinâmico

Para finalizar vamos discutir o limite termodinâmico das misturas para dois valores de quase-momentos tomados nas extremidades dos quartos laterais: $q = q_{\min}$ e $q = (M-1)/2$, com $q_{\min}$ dado em (4.28). Os limites das quantidades relevantes para a análise estão na Tabela 4.2.

$q = q_{\min}$	$q = \frac{M-1}{2}$
$\tilde{U}_I(r_{1\max}) \rightarrow 0^-$	$\tilde{U}_I(r_{1\min}) \rightarrow 0^-$
$\tilde{U}_{II}(r_{1\max}) \rightarrow 0^-$	$\tilde{U}_{II}(r_{1\max}) \rightarrow -1$
$\tilde{U}_{II}(r_{1\min}) \rightarrow +\infty$	$\tilde{U}_{II}(r_{1\min}) \rightarrow 0$
$\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) \rightarrow 0^-$	$\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) \rightarrow 0^-$
$\kappa \rightarrow 0^+$	$\kappa \rightarrow +\infty$

Tabela 4.2: Resumo dos resultados obtidos do cálculo do limite $M \rightarrow \infty$ das quantidades que definem a forma dos domínios onde cada desigualdade é válida isoladamente para todos os quadrupletos do espectro de excitação das misturas de condensados contra-propagantes com $q = q_{\min}$ e $q = (M-1)/2$ nos quartos laterais.

(a) $q = q_{\min}$

- Os limites $\tilde{U}_{II}(r_{1\min}) \rightarrow +\infty$ e $\tilde{U}_{II}(r_{1\max}) \rightarrow 0^-$ mostram que o domínio de $a_0 > 0$ é formado por uma região ilimitada em $\tilde{U} > 0$ e pelo eixo negativo das abscissas.
- Para $a_2^2 - 4a_0 > 0$ a parábola coincide com o eixo das ordenadas pois $\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) \rightarrow 0^-$ e $\kappa \rightarrow 0^+$. Logo, seu domínio é o semi-plano $\tilde{U} < 0$.
- A reta perpendicular de $a_2 < 0$ também coincide com o eixo das ordenadas, $\tilde{U}_I(r_{1\max}) \rightarrow 0^-$, e seu domínio é o semi-plano $\tilde{U} < 0$.

Concluimos então que o domínio de estabilidade dinâmica da mistura de condensados contra-propagantes com $q = q_{\min}$ é o eixo negativo das abscissas,

$$\tilde{U}_{AB} = 0 \quad \text{com} \quad \tilde{U} < 0, \quad (4.53)$$

mostrando novamente que a presença de uma interação inter-espécies ligeiramente diferente de zero já desestabiliza a mistura.

(b) $q = \frac{M-1}{2}$

- Para $a_0 > 0$ os limites $\tilde{U}_{II}(r_{1\min}) \rightarrow 0$ e $\tilde{U}_{II}(r_{1\max}) \rightarrow -1$ revelam que o domínio é formado pelas duas regiões ilimitadas em $\tilde{U} < 0$ e $\tilde{U} > 1$ e pelo trecho da abscissa em $0 < \tilde{U} < 1$.

- Para $a_2^2 - 4a_0 > 0$ a parábola se reduz ao eixo positivo das abscissas já que $\tilde{U}_{III}(r_{1\min}) \rightarrow 0^-$ e $\kappa \rightarrow +\infty$. Assim, o domínio é todo o plano menos o eixo positivo das abscissas.
- A reta perpendicular de $a_2 < 0$ coincide com o eixo das ordenadas, $\tilde{U}_I(r_{1\min}) \rightarrow 0^-$, e seu domínio é o semi-plano $\tilde{U} < 0$.

Da interseção destes domínios verificamos que a mistura de condensados contra-propagantes com $q = (M - 1)/2$ é dinamicamente estável na região definida por

$$\tilde{U} + \tilde{U}_{AB} < 0 \quad \text{e} \quad \tilde{U} - \tilde{U}_{AB} < 0, \quad (4.54)$$

que corresponde à mesma região obtida para misturas de condensados com $q_A = q_B$ definido nos quartos laterais, veja Subseção 4.2.2. Assim, somos levados a conclusões equivalentes.

No limite termodinâmico, as condições de estabilidade dinâmica de misturas com $q_A = -q_B$ próximos das extremidades da primeira zona de Brillouin são exatamente as mesmas para o caso de uma mistura com $q_A = q_B$. Por outro lado, nas proximidades da borda de separação entre os quartos centrais e laterais vemos novamente que uma interação inter-espécies ligeiramente diferente de zero desestabiliza completamente a mistura de condensados contra-propagantes.

Capítulo 5

A conversão inter-espécies e a rota para a catástrofe

Neste capítulo, analisaremos as propriedades dos estados de equilíbrio de uma mistura onde os átomos podem mudar de espécie no tunelamento entre os sítios primeiros vizinhos da rede óptica. O sistema apresenta agora uma dinâmica populacional na qual o número de átomos de cada espécie não é mais uma constante do movimento. Nestas condições, os estados de equilíbrio serão identificados pela polarização, definida como sendo a diferença entre as densidades de átomos de cada espécie, e uma fase relativa que minimizam a energia total do sistema. Mostraremos que a variação dos parâmetros de controle da Hamiltoniana MBH pode conduzir o sistema a uma catástrofe do tipo cúspide e a chave deste comportamento é a presença de um termo de tunelamento inter-espécies que induz bi-estabilidade dos estados de equilíbrio. Investigaremos se a catástrofe é acessível a uma observação experimental. De acordo com nosso critério, esta observação é impossível se o plano de bifurcação for a fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica. Assim, através da análise da estabilidade dinâmica dos estados de equilíbrio, mostraremos que para um sistema invariante por inversão de cor esta resposta depende apenas da razão entre as intensidades de tunelamento intra e inter-espécies.

5.1 A Hamiltoniana MBH com conversão inter-espécies

No MBH padrão para duas componentes bosônicas os átomos de uma dada espécie tunelam através das barreiras de potencial sem alterar sua identidade. O efeito de uma conversão inter-espécies na dinâmica do sistema aparece quando consideramos na Hamiltoniana MBH o termo de tunelamento inter-espécies, $J_{AB} \neq 0$, dado explicitamente

por

$$-J_{AB} \sum_{\lambda=0}^{M-1} (\hat{a}_{A\lambda}^\dagger \hat{a}_{B\lambda+1} + \hat{a}_{B\lambda}^\dagger \hat{a}_{A\lambda+1} + \hat{a}_{A\lambda+1}^\dagger \hat{a}_{B\lambda} + \hat{a}_{B\lambda+1}^\dagger \hat{a}_{A\lambda}). \quad (5.1)$$

Note que um sistema descrito por uma Hamiltoniana MBH com tunelamento inter-espécies apresenta uma dinâmica populacional na qual o número de átomos de cada espécie, $\hat{N}_A$ e $\hat{N}_B$, não é mais uma constante do movimento mas o número total de átomos, $\hat{N} = \hat{N}_A + \hat{N}_B$, permanece conservado.

A determinação dos estados de equilíbrio e das excitações elementares será realizada no contexto da Teoria de Bogoliubov seguindo os mesmos procedimentos efetuados no Capítulo 3. Novamente, o ponto de partida é a Hamiltoniana Grande-Canônica, $\hat{\mathcal{H}}_{\text{MBH}} \equiv \hat{H}_{\text{MBH}} - \mu \hat{N}$, que na representação do quase-momento é dada por

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{MBH}} = & \sum_{j,l=A}^B \sum_k \left(-2J_{jl} \cos \frac{2\pi k}{M} - \mu \delta_{jl} \right) \hat{\mathcal{A}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{lk} \\ & + \sum_{j,l=A}^B \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} \frac{U_{jl}}{2M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - k_{3j} - k_{4l}) \hat{\mathcal{A}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{lk_2}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{jk_3} \hat{\mathcal{A}}_{lk_4}, \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde o potencial químico μ fixa o número total de átomos no sistema.

Admitindo que os átomos de cada espécie ocupam no estado de equilíbrio um estado de quase-momento nulo, os operadores deslocados $\hat{\mathcal{C}}_{jk}$ são dados pela transformação

$$\hat{\mathcal{A}}_{jk} = \hat{\mathcal{C}}_{jk} + z_{j0} \delta_{k,0} \quad j = A, B \quad (5.3)$$

onde z_{j0} é um parâmetro variacional complexo que aparece como um deslocamento no operador com $k = 0$. Em termos de (5.3), a Hamiltoniana Grande-Canônica pode ser escrita como uma expansão em ordem normal da forma

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MBH}} = \sum_{i=0}^4 \hat{\mathcal{H}}^{(i)}, \quad (5.4a)$$

onde i indica o número de operadores deslocados e

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} = \sum_{j,l=A}^B \left[-(2J_{jl} + \mu \delta_{jl}) z_{j0}^* z_{l0} + \frac{U_{jl}}{2M} |z_{j0}|^2 |z_{l0}|^2 \right], \quad (5.4b)$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}^{(1)} = \sum_{j,l=A}^B & \left[\left(-2J_{jl}z_{l0} + \frac{U_{jl}}{M}z_{j0}|z_{l0}|^2 - \mu z_{j0} \delta_{jl} \right) \hat{\mathcal{C}}_{j0}^\dagger \right. \\ & \left. + \left(-2J_{jl}z_{l0}^* + \frac{U_{jl}}{M}z_{j0}^*|z_{l0}|^2 - \mu z_{j0}^* \delta_{jl} \right) \hat{\mathcal{C}}_{j0} \right],\end{aligned}\quad (5.4c)$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = & \sum_{j,l=A}^B \sum_k \left[-2J_{jl} \cos \frac{2\pi k}{M} + \frac{U_{jl}}{M}z_{j0}z_{l0}^* + \left(\sum_{s=A}^B \frac{U_{js}}{M}|z_{s0}|^2 - \mu \right) \delta_{jl} \right] \hat{\mathcal{C}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk} \\ & + \sum_{j,l=A}^B \sum_k \frac{U_{jl}}{2M} (z_{j0}z_{l0} \hat{\mathcal{C}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{l-k}^\dagger + z_{j0}^*z_{l0}^* \hat{\mathcal{C}}_{l-k} \hat{\mathcal{C}}_{jk}),\end{aligned}\quad (5.4d)$$

$$\hat{\mathcal{H}}^{(3)} = \sum_{j,l=A}^B \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3}} \frac{U_{jl}}{M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - k_{3l}) (z_{j0} \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_3} + z_{j0}^* \hat{\mathcal{C}}_{lk_3}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2} \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}) \quad (5.4e)$$

e

$$\hat{\mathcal{H}}^{(4)} = \sum_{j,l=A}^B \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} \frac{U_{jl}}{2M} \delta_M(k_{1j} + k_{2l} - k_{3j} - k_{4l}) \hat{\mathcal{C}}_{jk_1}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk_2}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{jk_3} \hat{\mathcal{C}}_{lk_4}. \quad (5.4f)$$

5.2 Os estados de equilíbrio

Na Teoria de Bogoliubov o estado fundamental do sistema, que denotamos por $|z_{A0}, z_{B0}\rangle$, é um estado coerente que corresponde ao estado de vácuo dos operadores deslocados. Calculando o valor médio da Hamiltoniana Grande-Canônica neste estado de vácuo, verificamos que a única contribuição é dada pelo termo independente dos operadores deslocados, $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$, dado em (5.4b). Desta forma, os estados de equilíbrio serão identificados pelo par de números complexos (z_{A0}, z_{B0}) que tornam a energia $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ estacionária sujeita a um vínculo de conservação do número total de átomos. Tal vínculo segue diretamente do valor médio do operador número total $\hat{N}$ no vácuo dos operadores deslocados do qual extraímos a relação

$$N = |z_{A0}|^2 + |z_{B0}|^2. \quad (5.5)$$

Nestas condições, da estacionaridade de $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$, seguem as equações de GP para os estados de equilíbrio,

$$\begin{cases} \left(-2J_{AA} + \frac{U_{AA}}{M}|z_{A0}|^2 + \frac{U_{AB}}{M}|z_{B0}|^2 - \mu\right) z_{A0} - 2J_{AB}z_{B0} = 0 \\ \left(-2J_{BB} + \frac{U_{BB}}{M}|z_{B0}|^2 + \frac{U_{AB}}{M}|z_{A0}|^2 - \mu\right) z_{B0} - 2J_{AB}z_{A0} = 0 \end{cases} \quad (5.6)$$

que tornam o termo linear (5.4c) identicamente nulo.

As funções de onda do condensado, z_{A0} e z_{B0} , podem ser escritas como produtos de uma amplitude e uma fase, $z_{A0} = |z_{A0}|e^{i\phi_A}$ e $z_{B0} = |z_{B0}|e^{i\phi_B}$. O vínculo (5.5) impõe que o quadrado da amplitude deva ser interpretado como o número de átomos da respectiva espécie, ou seja, $|z_{A0}|^2 = N_A$ e $|z_{B0}|^2 = N_B$. Por outro lado, a invariância das equações de equilíbrio por uma fase global nos permite expressar z_{A0} e z_{B0} como

$$z_{A0} = \sqrt{N_A} \quad \text{e} \quad z_{B0} = \sqrt{N_B}e^{-i\phi_{AB}}, \quad (5.7)$$

onde

$$\phi_{AB} \equiv \phi_A - \phi_B \quad (5.8)$$

é a **fase relativa** entre as duas espécies.

Para resolver as equações de GP em (5.6) é útil definirmos uma grandeza que não é afetada pelo vínculo de conservação de número. Esta quantidade é a diferença relativa entre o número de átomos de cada espécie,

$$f \equiv \frac{N_A - N_B}{N}, \quad -1 < f < 1, \quad (5.9)$$

que recebe o nome de **polarização**. A polarização mede o grau de desbalanceamento populacional da mistura de modo que se $f \rightarrow 1$ os átomos do sistema serão predominantemente da espécie A , se $f \rightarrow -1$ serão da espécie B e se $f = 0$ teremos o mesmo número de átomos de cada espécie, $N_A = N_B = N/2$. Dados o número total de átomos N e a polarização f , podemos parametrizar N_A e N_B como

$$N_A = \frac{N}{2}(1 + f) \quad \text{e} \quad N_B = \frac{N}{2}(1 - f). \quad (5.10)$$

As equações de GP, em termos da polarização f e da fase relativa ϕ_{AB} , assumem a forma

$$\sin \phi_{AB} = 0 \quad (5.11a)$$

e

$$\left(\gamma_1 + \frac{J_{AB} \cos \phi_{AB}}{\sqrt{1-f^2}} \right) f + \gamma_0 = 0 \quad (5.11b)$$

onde os parâmetros de controle γ_1 e γ_0 são definidos como

$$\gamma_1 \equiv \frac{n(U_{AA} + U_{BB} - 2U_{AB})}{8}, \quad (5.12a)$$

$$\gamma_0 \equiv \frac{n(U_{AA} - U_{BB}) - 4(J_{AA} - J_{BB})}{8}. \quad (5.12b)$$

As equações (5.11a) e (5.11b) são idênticas àsquelas obtidas para um sistema homogêneo na referência [47] onde a constante de acoplamento Josephson pode ser identificada com $-J_{AB}$ e o termo de *off-set* com $-(J_{AA} - J_{BB})$. γ_1 é o parâmetro de interação mútua que mede o efeito das interações no desbalanceamento populacional do sistema, ou seja, se $\gamma_1 < 0$ a separação dos átomos de espécies diferentes é favorecida de modo que o sistema tende a uma polarização significativa ($|f| \rightarrow 1$) e se $\gamma_1 > 0$ a superposição de átomos de espécies diferentes é favorecida de modo que a polarização é pequena ($f \rightarrow 0$). γ_0 é o parâmetro de assimetria que mede o desbalanceamento da população das duas espécies, ou seja, se $\gamma_0 < 0$ a espécie A é favorecida ($f \rightarrow 1$) e se $\gamma_0 > 0$ a espécie B é favorecida ($f \rightarrow -1$).

5.2.1 A fase relativa e a polarização dos estados de equilíbrio

Um estado de equilíbrio do sistema é especificado pelo par ordenado composto pela polarização e pela fase relativa, (f, ϕ_{AB}) , que seguem como soluções das equações de GP. A equação (5.11a) revela que existem apenas duas possíveis fases relativas,

$$\phi_{AB} = 0 \quad \text{ou} \quad \phi_{AB} = \pi, \quad (5.13)$$

de modo que, no equilíbrio, ou ambas as espécies atômicas estão em fase com $\phi_{AB} = 0$ ou em oposição de fase com $\phi_{AB} = \pi$. Para cada uma destas fases relativas, utilizamos a equação (5.11b) para obter as correspondentes polarizações e dependendo dos parâmetros de controle podemos encontrar uma única solução ou três soluções. Tal fato pode ser visualizado na Figura 5.1 onde apresentamos a superfície de equilíbrio descrita pela polarização f como função dos parâmetros de controle γ_1/J_{AB} e γ_0/J_{AB} para $\phi_{AB} = 0$. Note que é possível distinguir domínios onde temos ou apenas uma única polarização ou três polarizações e esta dependência peculiar dos estados de equilíbrio com os parâmetros de controle revela a presença de bifurcação no sistema.

Delimitaremos estes domínios no espaço dos parâmetros de controle e investigaremos

Figura 5.1: Superfícies de equilíbrio da polarização f como função dos parâmetros de controle γ_0/J_{AB} e γ_1/J_{AB} para $\phi_{AB} = 0$. Cada ponto de superfície de equilíbrio corresponde a um estado de equilíbrio do sistema. A estrutura desta superfície mostra a existência de domínios no espaço dos parâmetros de controle nos quais o sistema pode admitir desde três até um único estado de equilíbrio.

a estabilidade de população e fase dos correspondentes estados de equilíbrio (f, ϕ_{AB}) classificando-os como máximos, mínimos ou pontos de sela da energia cuja expressão, em termos da polarização f e da fase relativa ϕ_{AB} , tem a forma

$$\begin{aligned} \frac{E_0}{N}(f, \phi_{AB}) &= \frac{\mathcal{H}^{(0)} + \mu N}{N} \\ &= \gamma_1 f^2 + 2\gamma_0 f - 2J_{AB} \cos \phi_{AB} \sqrt{1 - f^2} + \gamma_2 - J_{AA} - J_{BB} \end{aligned} \quad (5.14a)$$

onde

$$\gamma_2 \equiv \frac{n(U_{AA} + U_{BB} + 2U_{AB})}{8}. \quad (5.14b)$$

A classificação de um estado de equilíbrio (f, ϕ_{AB}) quanto a sua estabilidade de po-

pulação e fase é realizada a partir da análise do sinal dos autovalores da matriz Hessiana¹,

$$\mathbb{H}(f, \phi_{AB}) = \begin{bmatrix} 2N \left(\gamma_1 + \frac{J_{AB} \cos \phi_{AB}}{(1-f^2)^{3/2}} \right) & 0 \\ 0 & 2N J_{AB} \cos \phi_{AB} \sqrt{1-f^2} \end{bmatrix}, \quad (5.15)$$

como função dos parâmetros de controle do sistema. A matriz (5.15) é diagonal e como consequência seus dois autovalores são os próprios elementos da diagonal principal, $\mathbb{H}_{11}$ e $\mathbb{H}_{22}$. Note que o sinal do autovalor $\mathbb{H}_{22}$ é especificado apenas pela fase relativa ϕ_{AB} , ou seja, se $\phi_{AB} = 0$ temos $\mathbb{H}_{22} > 0$ e se $\phi_{AB} = \pi$ temos $\mathbb{H}_{22} < 0$. Desta forma, a classificação de um estado de equilíbrio depende apenas do sinal de $\mathbb{H}_{11}$ de acordo com o critério

- $\phi_{AB} = 0$:

$$\gamma_1 + \frac{J_{AB}}{(1-f^2)^{3/2}} \begin{cases} > 0 & \rightarrow \text{mínimo} \\ < 0 & \rightarrow \text{ponto de sela} \end{cases} \quad (5.16a)$$

- $\phi_{AB} = \pi$:

$$\gamma_1 - \frac{J_{AB}}{(1-f^2)^{3/2}} \begin{cases} < 0 & \rightarrow \text{máximo} \\ > 0 & \rightarrow \text{ponto de sela} \end{cases} . \quad (5.16b)$$

O critério estabelecido acima mostra que, dependendo dos parâmetros de controle do sistema, os estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ correspondem ou a mínimos ou pontos de sela da energia. Quando são mínimos dizemos que estes estados de equilíbrio são populacionalmente estáveis. Por outro lado, os estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = \pi$ ou são máximos ou pontos de sela e, portanto, não podem ser populacionalmente estáveis. Discutiremos separadamente os casos ressonante ($\gamma_0 = 0$) e não-ressonante ($\gamma_0 \neq 0$).

Ressonante ($\gamma_0 = 0$)

Na ressonância a equação (5.11b) assume a forma

$$\left(\gamma_1 + \frac{J_{AB} \cos \phi_{AB}}{\sqrt{1-f^2}} \right) f = 0 \quad (5.17)$$

¹Se a matriz Hessiana calculada em um ponto crítico,

$$\mathbb{H}(f, \phi_{AB}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E_0}{\partial f^2}(f, \phi_{AB}) & \frac{\partial^2 E_0}{\partial f \partial \phi_{AB}}(f, \phi_{AB}) \\ \frac{\partial^2 E_0}{\partial \phi_{AB} \partial f}(f, \phi_{AB}) & \frac{\partial^2 E_0}{\partial \phi_{AB}^2}(f, \phi_{AB}) \end{bmatrix},$$

for positiva-definida (autovalores positivos) então (f, ϕ_{AB}) será um mínimo da energia E_0 . No caso em que a matriz é negativa-definida (autovalores negativos) então será um máximo. Por outro lado, se a matriz for indefinida (autovalores positivos e negativos) então temos um ponto de sela. Este critério não considera o caso de autovalores nulos.

cujas soluções podem ser obtidas facilmente. Uma solução é $f = 0$ que independe dos parâmetros de controle do sistema. Por outro lado, para $|\gamma_1| > J_{AB}$, encontramos duas outras soluções $f = \pm f_c$ com $f_c \equiv \sqrt{1 - (\gamma_1/J_{AB})^{-2}}$. A estrutura destas soluções indica a existência de domínios no espaço dos parâmetros de controle onde o sistema admite ou um único estado de equilíbrio ou três cuja fronteira é definida pela relação

$$\frac{\gamma_1}{J_{AB}} = -\cos \phi_{AB}. \quad (5.18)$$

Assim, utilizando o critério Hessiano estabelecido em (5.16a) e (5.16b), para cada fase relativa ϕ_{AB} , obtemos a classificação:

- Para $\phi_{AB} = 0$,
 1. se $\gamma_1/J_{AB} > -1$ temos $f = 0$ que corresponde a um mínimo;
 2. se $\gamma_1/J_{AB} < -1$ temos $f = 0$ que é um ponto de sela e $f = \pm f_c$ que são mínimos locais.
- Para $\phi_{AB} = \pi$,
 1. se $\gamma_1/J_{AB} < 1$ temos $f = 0$ que corresponde a um máximo;
 2. se $\gamma_1/J_{AB} > 1$ temos $f = 0$ que é um ponto de sela e $f = \pm f_c$ que são máximos locais.

Para $\gamma_1/J_{AB} < -1$ o sistema admite dois estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ e com polarizações simétricas e iguais a $f = \pm f_c$ que são mínimos locais da energia e, portanto, populacionalmente estáveis. Logo, neste domínio dos parâmetros de controle, os estados de equilíbrio do sistema apresentam uma estrutura **bi-estável**.

Não-ressonante ($\gamma_0 \neq 0$)

Para identificar os domínios do espaço dos parâmetros de controle onde o sistema admite, para cada fase relativa de equilíbrio ϕ_{AB} , um ou três estados de equilíbrio é conveniente reescrevermos a equação (5.11b) da forma

$$\frac{\gamma_0}{J_{AB}} + \frac{\gamma_1}{J_{AB}} f = -\frac{\cos \phi_{AB} f}{\sqrt{1 - f^2}}, \quad (5.19a)$$

onde todos os termos que envolvem os parâmetros de controle do sistema γ_0 , γ_1 e J_{AB} foram isolados no primeiro membro. Nestas condições, as polarizações de equilíbrio são

obtidas identificando as interseções entre as duas curvas descritas pelas funções

$$g_1(f) \equiv \frac{\gamma_0}{J_{AB}} + \frac{\gamma_1}{J_{AB}} f \quad \text{e} \quad g_2(f) \equiv -\frac{\cos \phi_{AB} f}{\sqrt{1-f^2}}. \quad (5.19b)$$

no domínio $-1 < f < 1$. Estamos interessados especificamente em investigar, para cada ϕ_{AB} , a relação entre o número de interseções, que corresponde ao número de estados de equilíbrio, e os parâmetros de controle do sistema. Isto pode ser realizado geometricamente já que γ_0/J_{AB} e γ_1/J_{AB} são, respectivamente, os coeficientes linear e angular da reta definida por $g_1(f)$. Assim, estabeleceremos geometricamente esta relação analisando a variação da inclinação e translações ao longo do eixo vertical da reta $g_1(f)$ com relação a curva $g_2(f)$.

O efeito do parâmetro γ_0/J_{AB} não-nulo é a translação da reta $\frac{\gamma_1}{J_{AB}} f$ ao longo do eixo vertical e, desta maneira, a análise do caso não-ressonante pode ser feita a partir de uma generalização apropriada dos resultados obtidos para o caso ressonante. Discutiremos, em detalhes, o caso com $\phi_{AB} = 0$ e para $\phi_{AB} = \pi$ apenas sistematizaremos os resultados obtidos pois as análises de ambos os casos são exatamente análogas.

- Para $\phi_{AB} = 0$,

1. Se $\gamma_1/J_{AB} > -1$ vimos que, na ressonância, o sistema apresenta um único estado de equilíbrio. Geometricamente isto significa que a reta $\frac{\gamma_1}{J_{AB}} f$ intercepta a curva $g_2(f)$ em um único ponto, veja Figura 5.2(a). Qualquer translação desta reta ao longo do eixo vertical não muda o número de interseções com $g_2(f)$ e, portanto, o sistema continua apresentando um único estado de equilíbrio, Figura 5.2(b). Além disso, é possível mostrar através da análise do sinal do autovalor $\mathbb{H}_{11}$ da matriz Hessiana (5.15) que estes estados de equilíbrio continuam sendo mínimos da energia. Note que quando a reta é transladada, a partir do limite ressonante, o módulo de f vai se aproximando cada vez mais da unidade. Como consequência, levando em conta que $\mathbb{H}_{11}$ é uma função crescente de $|f|$ e estritamente positiva para $f = 0$, concluímos que para qualquer valor de γ_0/J_{AB} a desigualdade $\mathbb{H}_{11} > 0$ continua válida garantindo assim a estabilidade populacional destes estados de equilíbrio.
2. Se $\gamma_1/J_{AB} < -1$ o sistema admite, na ressonância, três estados de equilíbrio, veja Figura 5.3(a). À medida que transladamos a reta $\frac{\gamma_1}{J_{AB}} f$ ao longo do eixo vertical identificamos um domínio finito de valores de γ_0/J_{AB} no qual ainda existem três interseções com a curva $g_2(f)$, veja Figura 5.3(b). Todavia, duas interseções adjacentes vão se aproximando cada vez mais até colidirem em um

Figura 5.2: Gráficos de $g_1(f)$ e $g_2(f)$ como funções de f para $\phi_{AB} = 0$ e $\gamma_1/J_{AB} = 1$ nos casos (a) ressonante e (b) não-ressonante ($\gamma_0/J_{AB} = 1.5$). Note que a translação da reta $g_1(f) = f$ ao longo do eixo vertical admite uma única interseção mostrando que, nestas condições, qualquer que seja o parâmetro γ_0/J_{AB} , o sistema tem um único estado de equilíbrio que corresponde a um mínimo da energia.

dos pontos de tangência entre as curvas e este é o limite que define a transição para o domínio onde há apenas uma interseção. Denotando por γ_0^* o valor crítico de γ_0 que define esta fronteira, da Eq.(5.11b) e da condição de tangência $g'_1(f) = g'_2(f)$, segue

$$\frac{\gamma_0^*}{J_{AB}} = \left[\left(\frac{\gamma_1}{J_{AB}} \right)^{2/3} - 1 \right]^{3/2}, \quad (5.20)$$

de modo que para $|\gamma_0| < \gamma_0^*$ temos três estados de equilíbrio distintos e para $|\gamma_0| > \gamma_0^*$ temos apenas um único estado de equilíbrio. Podemos investigar a estabilidade destes estados de equilíbrio através da análise do sinal do autovalor $\mathbb{H}_{11}$ da matriz Hessiana (5.15). Vamos considerar inicialmente as duas interseções adjacentes que se aproximam na translação. Na ressonância estes pontos críticos correspondem a dois estados de equilíbrio que são ponto de sela ($\mathbb{H}_{11} < 0$) e mínimo ($\mathbb{H}_{11} > 0$) da energia. Quando ocorre a colisão destas interseções, para $|\gamma_0| = \gamma_0^*$, em um dos pontos de tangência entre $g_1(f)$ e $g_2(f)$ o autovalor $\mathbb{H}_{11}$ se anula². Este fato indica que o sinal de $\mathbb{H}_{11}$, que é uma função crescente de $|f|$, para cada uma destas interseções permanece o mesmo desde o limite ressonante até o colapso onde ele se anula. Como consequência, a estabilidade destes estados de equilíbrio não-ressonantes permanece igual ao do caso ressonante. Para a terceira interseção verificamos que com a translação o módulo de f se aproxima da unidade e, como na ressonância

²Podemos expressar o autovalor $\mathbb{H}_{11}$ da forma $\mathbb{H}_{11} = 2NJ_{AB}(g'_1(f) - g'_2(f))$ de modo que, na colisão das duas interseções adjacentes nos pontos de tangência das curvas ($g'_1(f) = g'_2(f)$) verificamos que $\mathbb{H}_{11} = 0$.

este ponto crítico corresponde a um mínimo da energia, a desigualdade $\mathbb{H}_{11} > 0$ permanece válida indefinidamente garantindo a estabilidade do correspondente estado de equilíbrio fora da ressonância. Assim, concluímos que para $|\gamma_0| < \gamma_0^*$ o sistema apresenta uma estrutura bi-estável de estados de equilíbrio e para $|\gamma_0| > \gamma_0^*$ o único estado de equilíbrio é populacionalmente estável.

Figura 5.3: Gráficos de $g_1(f)$ e $g_2(f)$ como funções de f para $\phi_{AB} = 0$ e $\gamma_1/J_{AB} = -4$ nos casos (a) ressonante e (b) não-ressonante ($\gamma_0/J_{AB} = 1$). A translação da reta $g_1(f) = -4f$ ao longo do eixo vertical pode ter três ou apenas uma interseção com a curva $g_2(f)$. O valor crítico $\gamma_0^*/J_{AB} = 1.9$ define a fronteira entre estes dois domínios de modo que para $|\gamma_0|/J_{AB} < 1.9$ o sistema admite três estados de equilíbrio dentre os quais temos dois mínimos locais e um ponto de sela e para $|\gamma_0|/J_{AB} > 1.9$ temos um único estado de equilíbrio que é um mínimo.

Na Tabela 5.1 apresentamos o resumo dos resultados obtidos na análise da estabilidade de população e fase dos estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ fora da ressonância.

Parâmetros de controle		Estabilidade ($\phi_{AB} = 0$)
$\gamma_1/J_{AB} > -1$	para todo γ_0/J_{AB}	1 mínimo
$\gamma_1/J_{AB} < -1$	$ \gamma_0 < \gamma_0^*$	2 mínimos e 1 ponto de sela
	$ \gamma_0 > \gamma_0^*$	1 mínimo

Tabela 5.1: Estabilidade de população e fase dos estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ e em diferentes domínios do espaço dos parâmetros de controle.

- Para $\phi_{AB} = \pi$ a análise é exatamente idêntica ao caso anterior. Tomaremos a liberdade de apenas sistematizar as conclusões da estrutura dos estados de equilíbrio.
 1. Se $\gamma_1/J_{AB} < 1$ vimos que, na ressonância, o sistema possui um único estado de equilíbrio que é um máximo da energia e, portanto, populacionalmente instável. Desta forma, qualquer que seja γ_0/J_{AB} não-nulo, o sistema continuará

admitindo um único estado de equilíbrio que será também populacionalmente instável.

2. Se $\gamma_1/J_{AB} > 1$ o sistema apresenta, na ressonância, três estados de equilíbrio dos quais um é ponto de sela e dois máximos simétricos. Encontramos também dois possíveis domínios definidos pelo valor crítico γ_0^* dado em (5.20). Nestas condições, para $|\gamma_0| < \gamma_0^*$ temos dois estados de equilíbrio populacionalmente instáveis e um ponto de sela e para $|\gamma_0| > \gamma_0^*$ temos apenas um estado de equilíbrio populacionalmente instável. Na Tabela 5.2 resumimos os resultados obtidos na análise da estabilidade de população e fase dos estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = \pi$.

Parâmetros de controle		Estabilidade ($\phi_{AB} = \pi$)
$\gamma_1/J_{AB} < 1$	para todo γ_0/J_{AB}	1 máximo
$\gamma_1/J_{AB} > 1$	$ \gamma_0 < \gamma_0^*$	2 máximos e 1 ponto de sela
	$ \gamma_0 > \gamma_0^*$	1 máximo

Tabela 5.2: Estabilidade de população e fase dos estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = \pi$ e em diferentes domínios do espaço dos parâmetros de controle.

Concluimos então que, dependendo do domínio de valores onde os parâmetros de controle estão definidos, o sistema pode admitir ou apenas um único estado de equilíbrio ou três estados de equilíbrio com fase relativa ϕ_{AB} . Na Figura 5.4 destacamos estes domínios, tanto para $\phi_{AB} = 0$ quanto $\phi_{AB} = \pi$, onde as fronteiras de bifurcação são descritas pela equação $\gamma_0 = |\gamma_0^*|$ com γ_0^* dado em (5.20). As duas regiões representadas em cor cinza-escuro correspondem aos domínios onde o sistema admite três estados de equilíbrio com a mesma fase relativa. No domínio inferior, $\gamma_1/J_{AB} < -1$ e $\gamma_0 < |\gamma_0^*|$, temos dois mínimos e um ponto de sela com $\phi_{AB} = 0$ e um único máximo com $\phi_{AB} = \pi$. Já no domínio superior, $\gamma_1/J_{AB} > 1$ e $\gamma_0 < |\gamma_0^*|$, temos dois máximos e um ponto de sela com $\phi_{AB} = \pi$ e um único mínimo com $\phi_{AB} = 0$. Fora destas regiões, representada em cinza-claro, encontramos apenas um mínimo com $\phi_{AB} = 0$ e um máximo com $\phi_{AB} = \pi$.

A bi-estabilidade ocorre apenas para estados de equilíbrio nos quais as duas espécies atômicas estão em fase, $\phi_{AB} = 0$. Na Figura 5.5 apresentamos o gráfico da polarização como função de γ_0/J_{AB} para os casos (a) $\gamma_1/J_{AB} > -1$ onde o sistema apresenta um único estado de equilíbrio populacionalmente estável e (b) $\gamma_1/J_{AB} < -1$ onde a bi-estabilidade ocorre para $\gamma_0 < |\gamma_0^*|$. Uma bifurcação na qual uma solução estável origina duas novas soluções estáveis e outra instável caracteriza um tipo particular de catástrofe chamada cúspide [45]. A ocorrência de uma catástrofe no sistema implica a existência de histerese, ou seja, o estado do sistema depende da sua “história” no espaço dos parâmetros

Figura 5.4: Fronteiras de bifurcação no espaço dos parâmetros de controle $\gamma_0/J_{AB} \times \gamma_1/J_{AB}$. Nos domínios representados em cinza-escuro o sistema apresenta três estados de equilíbrio de mesma fase relativa: $\phi_{AB} = 0$ (domínio inferior) e $\phi_{AB} = \pi$ (domínio superior). Já a região clara corresponde ao domínio onde o sistema tem um único estado de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ (mínimo) e $\phi_{AB} = \pi$ (máximo). A bi-estabilidade ocorre apenas para os estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ quando os parâmetros de controle estão no domínio definido por $\gamma_1/J_{AB} < -1$ e $\gamma_0 < |\gamma_0^*|$.

de controle. Mais especificamente, o estado de equilíbrio do sistema em um dado instante depende tanto dos parâmetros de controle quanto do estado de equilíbrio que estava ocupando anteriormente. Assim, se o sistema possui dois estados de equilíbrio populacionalmente estáveis qualquer um deles poderá estar ocupado dependendo de suas condições iniciais.

Figura 5.5: Diagrama de bifurcação onde representamos a polarização f dos estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ como função do parâmetro γ_0/J_{AB} para (a) $\gamma_1/J_{AB} = -0.4$ e (b) $\gamma_1/J_{AB} = -3$. As linhas cheias e pontilhadas representam, respectivamente, as soluções populacionalmente estáveis e instáveis. Na bifurcação a única solução populacionalmente estável no domínio de estabilidade única bifurca-se em novas soluções das quais duas são estáveis e a outra instável caracterizando assim uma catástrofe cúspide.

5.3 As excitações elementares

Restringiremos nossa análise apenas para o caso onde os estados de equilíbrio possuem fase relativa $\phi_{AB} = 0$ pois, como visto anteriormente, são estes que apresentam uma estrutura bi-estável. Para cada bloco da Hamiltoniana Efetiva resolveremos as equações características (3.39b) para obter as energias de excitação do espectro.

Na Teoria de Bogoliubov supõe-se que a maioria dos átomos está no estado condensado e, deste modo, a dinâmica do sistema na vizinhança de um estado de equilíbrio é descrita por uma Hamiltoniana Efetiva obtida truncando-se a Hamiltoniana Grande-Canônica até

os termos bilineares no produto de operadores deslocados. Levando em conta que $\mathcal{H}^{(0)}$ é apenas uma constante e que $\hat{\mathcal{H}}^{(1)}$ é identicamente zero devido às equações de GP, (5.6), vemos que a Hamiltoniana Efetiva do sistema corresponde ao termo quadrático $\hat{\mathcal{H}}^{(2)}$ da expansão normal,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = & \sum_{j,l=A}^B \left[h_{j0,l0} \hat{\mathcal{C}}_{j0}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{l0} + \frac{1}{2} \Delta_{j0,l0} \left(\hat{\mathcal{C}}_{j0}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{l0}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{l0} \hat{\mathcal{C}}_{j0} \right) \right] \\ & + \sum_{j,l=A}^B \sum_{k \neq 0} \left[h_{jk,lk} \hat{\mathcal{C}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{lk} + \frac{1}{2} \Delta_{jk,l-k} \left(\hat{\mathcal{C}}_{jk}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{l-k}^\dagger \hat{\mathcal{C}}_{l-k} + \hat{\mathcal{C}}_{jk} \right) \right],\end{aligned}\quad (5.21a)$$

onde $h_{jk,lk}$ e $\Delta_{jk,l-k}$ são quantidades reais que satisfazem as relações

$$h_{jk,lk} = h_{lk,jk} = h_{j-k,l-k} \quad \text{e} \quad \Delta_{jk,l-k} = \Delta_{l-k,jk} = \Delta_{j-k,lk} \quad (5.21b)$$

e são dados explicitamente por

$$h_{Ak,Ak} \equiv 2J_{AA} \left(1 - \cos \frac{2\pi k}{M} \right) + 2J_{AB} \sqrt{\frac{n_B}{n_A}} + U_{AA} n_A \quad (5.21c)$$

$$h_{Bk,Bk} \equiv 2J_{BB} \left(1 - \cos \frac{2\pi k}{M} \right) + 2J_{AB} \sqrt{\frac{n_A}{n_B}} + U_{BB} n_B \quad (5.21d)$$

$$h_{Ak,Bk} \equiv -2J_{AB} \cos \frac{2\pi k}{M} + \sqrt{n_A n_B} U_{AB} \quad (5.21e)$$

$$\Delta_{Ak,A-k} \equiv U_{AA} n_A \quad (5.21f)$$

$$\Delta_{Bk,B-k} \equiv U_{BB} n_B \quad (5.21g)$$

$$\Delta_{Ak,B-k} \equiv \sqrt{n_A n_B} U_{AB}. \quad (5.21h)$$

Uma inspeção de (5.21a) mostra que a Hamiltoniana Efetiva acopla apenas os pares de quase-momentos $(k_A, -k_A)$ e $(k_B, -k_B)$ evidenciando assim uma estrutura matricial (3.38a) bloco-diagonal onde identificamos

- um bloco de dimensão 4×4 associado ao acoplamento dos pares de quase-momentos idênticos de cada espécie, $(0, 0)$, cuja diagonalização resulta em um **dubleto** de modos de excitação;
- $(M-1)/2$ blocos de dimensão 8×8 associados ao acoplamento dos pares de quase-momentos distintos, $(k, -k)$ com

$$1 \leq k \leq \frac{M-1}{2}, \quad (5.22)$$

de cada espécie cujas diagonalizações resultam nos **quadrupletos** do espectro das excitações elementares.

5.3.1 Dubleto

Para o bloco 4×4 , que envolve o acoplamento dos singletos $(0_A, 0_A) \leftrightarrow (0_B, 0_B)$, as equações de BdG (3.39a) são

$$\begin{bmatrix} h_{A0,A0} & h_{A0,B0} & \Delta_{A0,A0} & \Delta_{A0,B0} \\ h_{B0,A0} & h_{B0,B0} & \Delta_{B0,A0} & \Delta_{B0,B0} \\ \Delta_{A0,A0} & \Delta_{A0,B0} & h_{A0,A0} & h_{A0,B0} \\ \Delta_{B0,A0} & \Delta_{B0,B0} & h_{B0,A0} & h_{B0,B0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{A0} \\ u_{B0} \\ v_{A0} \\ v_{B0} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{A0} \\ u_{B0} \\ v_{A0} \\ v_{B0} \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

A equação característica associada tem a forma

$$E^4 + a_2 E^2 = 0 \quad (5.24a)$$

onde o coeficiente a_2 é dado explicitamente por

$$-a_2 \equiv \frac{4n^2 J_{AB}^2 + 4J_{AB} (n_A n_B)^{3/2} (U_{AA} + U_{BB} - 2U_{AB})}{n_A n_B}. \quad (5.24b)$$

A equação (5.24a) admite duas soluções identicamente nulas e duas soluções finitas $\pm\sqrt{-a_2}$ que são reais se $a_2 < 0$. Agrupando estas soluções em pares, fica evidente que o dubleto é composto por um modo de energia zero e um modo de lacuna (*gap mode*) de energia

$$E_{\text{gap}} = \sqrt{-a_2}. \quad (5.25)$$

Para interpretar fisicamente os modos de energia zero e de lacuna é conveniente reescrevermos os termos da Hamiltoniana Efetiva com $k = 0$, que denotaremos por $\hat{\mathcal{H}}_d^{(2)}$, em termos das variáveis canônicas de posição $\hat{Q}_j$ e momento $\hat{P}_j$ definidas, respectivamente, pelas transformações

$$\hat{Q}_j = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{C}}_{j0} - \hat{\mathcal{C}}_{j0}^\dagger) \quad \text{e} \quad \hat{P}_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathcal{C}}_{j0} + \hat{\mathcal{C}}_{j0}^\dagger), \quad (5.26a)$$

e que satisfazem as relações de comutação

$$[\hat{Q}_j, \hat{Q}_l] = [\hat{P}_j, \hat{P}_l] = 0, \quad [\hat{Q}_j, \hat{P}_l] = i\delta_{jl}. \quad (5.26b)$$

Assim, segue que

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_d^{(2)} = & U_{AA}n_A \hat{P}_A^2 + U_{BB}n_B \hat{P}_B^2 + 2U_{AB}\sqrt{n_An_B} \hat{P}_A\hat{P}_B \\
& + \frac{J_{AB}}{\sqrt{n_An_B}} \left(\sqrt{n_B}\hat{P}_A - \sqrt{n_A}\hat{P}_B \right)^2 + \frac{J_{AB}}{\sqrt{n_An_B}} \left(\sqrt{n_B}\hat{Q}_A - \sqrt{n_A}\hat{Q}_B \right)^2 \\
& - \frac{U_{AA}n_A}{2} - \frac{U_{BB}n_B}{2} - \frac{nJ_{AB}}{\sqrt{n_An_B}}
\end{aligned} \tag{5.27}$$

onde os operadores de posição e momento aparecem desacoplados. Queremos determinar uma transformação canônica que diagonaliza esta forma quadrática. Para isto é conveniente primeiramente introduzir a mudança de variáveis

$$\hat{Q}_1 \equiv \sqrt{\frac{n_B}{n}}\hat{Q}_A - \sqrt{\frac{n_A}{n}}\hat{Q}_B \tag{5.28a}$$

$$\hat{P}_1 \equiv \sqrt{\frac{n_B}{n}}\hat{P}_A - \sqrt{\frac{n_A}{n}}\hat{P}_B \tag{5.28b}$$

$$\hat{Q}_2 \equiv \sqrt{\frac{n_A}{n}}\hat{Q}_A + \sqrt{\frac{n_B}{n}}\hat{Q}_B \tag{5.28c}$$

$$\hat{P}_2 \equiv \sqrt{\frac{n_A}{n}}\hat{P}_A + \sqrt{\frac{n_B}{n}}\hat{P}_B \tag{5.28d}$$

que formam um conjunto de variáveis canonicamente conjugadas. Nestas condições, reescrevemos $\hat{\mathcal{H}}_d^{(2)}$ como

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_d^{(2)} = & \left[\frac{nJ_{AB}}{\sqrt{n_An_B}} + \frac{n_An_B(U_{AA} + U_{BB} - 2U_{AB})}{n} \right] \hat{P}_1^2 + \left[\frac{U_{AA}n_A^2 + U_{BB}n_B^2 + 2U_{AB}n_An_B}{n} \right] \hat{P}_2^2 \\
& + \frac{2\sqrt{n_An_B}[U_{AA}n_A - U_{BB}n_B + U_{AB}(n_B - n_A)]}{n} \hat{P}_1\hat{P}_2 + \frac{nJ_{AB}}{\sqrt{n_An_B}} \hat{Q}_1^2 \\
& - \frac{U_{AA}n_A}{2} - \frac{U_{BB}n_B}{2} - \frac{nJ_{AB}}{\sqrt{n_An_B}}.
\end{aligned} \tag{5.29}$$

Podemos construir uma transformação canônica da forma

$$\hat{\bar{Q}}_1 \equiv \hat{Q}_1 \tag{5.30a}$$

$$\hat{\bar{P}}_1 \equiv \hat{P}_1 + \alpha\hat{P}_2 \tag{5.30b}$$

$$\hat{\bar{Q}}_2 \equiv \hat{Q}_2 - \alpha\hat{Q}_1 \tag{5.30c}$$

$$\hat{\bar{P}}_2 \equiv \hat{P}_2 \tag{5.30d}$$

onde α é um parâmetro que deve ser escolhido de tal modo que os termos cruzados de

(5.29) sejam eliminados. Tal fato impõe que

$$\alpha = \frac{n_A n_B [(U_{AA} - U_{AB}) n_A - (U_{BB} - U_{AB}) n_B]}{n^2 J_{AB} + (n_A n_B)^{3/2} (U_{AA} + U_{BB} - 2U_{AB})}. \quad (5.31)$$

de modo que, nesta representação, $\hat{\mathcal{H}}_d^{(2)}$ é diagonal,

$$\hat{\mathcal{H}}_d^{(2)} = \frac{\hat{\mathcal{P}}_2^2}{2\lambda_2} + \frac{\hat{\mathcal{P}}_1^2}{2\lambda_1} + \frac{\lambda_1 \omega_{\text{gap}}^2}{2} \hat{\mathcal{Q}}_1^2 - \frac{U_{AA} n_A}{2} - \frac{U_{BB} n_B}{2} - \frac{n J_{AB}}{\sqrt{n_A n_B}} \quad (5.32a)$$

onde os parâmetros inerciais λ_1 e λ_2 e a frequência angular ω_{gap} são definidos em termos dos parâmetros de controle como

$$\frac{1}{2\lambda_1} \equiv \frac{n J_{AB}}{\sqrt{n_A n_B}} + \frac{n_A n_B (U_{AA} + U_{BB} - 2U_{AB})}{n} \quad (5.32b)$$

$$\frac{1}{2\lambda_2} \equiv \frac{n J_{AB} (n_A^2 U_{AA} + n_B^2 U_{BB} + 2n_A n_B U_{AB}) + n (n_A n_B)^{3/2} (U_{AA} U_{BB} - U_{AB}^2)}{n^2 J_{AB} + (n_A n_B)^{3/2} (U_{AA} + U_{BB} - 2U_{AB})} \quad (5.32c)$$

$$\omega_{\text{gap}} \equiv \sqrt{\frac{4n^2 J_{AB}^2 + 4J_{AB} (n_A n_B)^{3/2} (U_{AA} + U_{BB} - 2U_{AB})}{n_A n_B}}. \quad (5.32d)$$

O termo cinético em (5.32a) que envolve a variável $\hat{\mathcal{P}}_2$ está relacionado com o modo de energia zero do sistema que corresponde a um estado de equilíbrio indiferente. Em contraste com um sistema sem tunelamento inter-espécies no qual existem dois modos de energia zero, aqui encontramos apenas um único modo de energia zero. Isto ocorre pois a Aproximação de Bogoliubov introduz uma única quebra de simetria contínua já que a Hamiltoniana Efetiva do sistema viola a conservação do número total de átomos do sistema. Por outro lado, o termo de oscilador harmônico que envolve as variáveis canonicamente conjugadas $\hat{\mathcal{Q}}_1$ e $\hat{\mathcal{P}}_1$ revela que o modo de lacuna corresponde à oscilação do número de átomos de cada espécie com frequência ω_{gap} igual a (5.25). Mostraremos, a posteriori, que na bifurcação esta frequência se anula de modo que, ao cruzar o plano de bifurcação, a dinâmica populacional torna-se instável já que esta energia fica complexa. Tal fato é a assinatura da catástrofe no sistema.

5.3.2 Quadrupletos

Para um particular bloco 8×8 que envolve o acoplamento dos dubletos $(k_A, -k_A) \leftrightarrow (k_B, -k_B)$ de cada espécie, as equações de BdG (3.39a) são tais que

$$h = \begin{bmatrix} h_{Ak,Ak} & 0 & h_{Ak,Bk} & 0 \\ 0 & h_{A-k,A-k} & 0 & h_{A-k,B-k} \\ h_{Bk,Ak} & 0 & h_{Bk,Bk} & 0 \\ 0 & h_{B-k,A-k} & 0 & h_{B-k,B-k} \end{bmatrix}, \quad (5.33a)$$

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 & \Delta_{Ak,A-k} & 0 & \Delta_{Ak,B-k} \\ \Delta_{A-k,Ak} & 0 & \Delta_{A-k,Bk} & 0 \\ 0 & \Delta_{Bk,A-k} & 0 & \Delta_{Bk,B-k} \\ \Delta_{B-k,Ak} & 0 & \Delta_{B-k,Bk} & 0 \end{bmatrix} \quad (5.33b)$$

com o autovetor correspondente à energia de excitação E sendo da forma

$$\mathcal{V} = \begin{bmatrix} u_{Ak} & u_{A-k} & u_{Bk} & u_{B-k} & v_{Ak} & v_{A-k} & v_{Bk} & v_{B-k} \end{bmatrix}^T. \quad (5.33c)$$

Da mesma forma como ocorre no caso sem tunelamento inter-espécies tratado no Capítulo 3, a equação de autovalores é decomposta em dois grupos de equações de dimensão 4×4 ,

- **Grupo I** para autovetores da forma

$$\mathcal{V}_I = \begin{bmatrix} u_{Ak}^I & 0 & u_{Bk}^I & 0 & 0 & v_{A-k}^I & 0 & v_{B-k}^I \end{bmatrix}^T, \quad (5.34a)$$

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} h_{Ak,Ak} & h_{Ak,Bk} & \Delta_{Ak,A-k} & \Delta_{Ak,B-k} \\ h_{Bk,Ak} & h_{Bk,Bk} & \Delta_{Bk,A-k} & \Delta_{Bk,B-k} \\ \Delta_{A-k,Ak} & \Delta_{A-k,Bk} & h_{A-k,A-k} & h_{A-k,B-k} \\ \Delta_{B-k,Ak} & \Delta_{B-k,Bk} & h_{B-k,A-k} & h_{B-k,B-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Ak}^I \\ u_{Bk}^I \\ v_{A-k}^I \\ v_{B-k}^I \end{bmatrix} \\ &= E_I \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{Ak}^I \\ u_{Bk}^I \\ v_{A-k}^I \\ v_{B-k}^I \end{bmatrix}. \quad (5.34b) \end{aligned}$$

- **Grupo II** para autovetores da forma

$$\mathcal{V}_{II} = \begin{bmatrix} 0 & u_{A-k}^{II} & 0 & u_{B-k}^{II} & v_{Ak}^{II} & 0 & v_{Bk}^{II} & 0 \end{bmatrix}^T, \quad (5.35a)$$

$$\begin{bmatrix} h_{A-k,A-k} & h_{A-k,B-k} & \Delta_{A-k,Ak} & \Delta_{A-k,Bk} \\ h_{B-k,A-k} & h_{B-k,B-k} & \Delta_{B-k,Ak} & \Delta_{B-k,Bk} \\ \Delta_{Ak,A-k} & \Delta_{Ak,B-k} & h_{Ak,Ak} & h_{Ak,Bk} \\ \Delta_{Bk,A-k} & \Delta_{Bk,B-k} & h_{Bk,Ak} & h_{Bk,Bk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{A-k}^{II} \\ u_{B-k}^{II} \\ v_{Ak}^{II} \\ v_{Bk}^{II} \end{bmatrix} = E_{II} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{A-k}^{II} \\ u_{B-k}^{II} \\ v_{Ak}^{II} \\ v_{Bk}^{II} \end{bmatrix}. \quad (5.35b)$$

Levando em conta que $h_{jk,lk}$ e $\Delta_{jk,l-k}$ são funções pares de k , segue que as equações características de (5.34b) e (5.35b) são, respectivamente,

$$E_I^4 + a_2 E_I^2 + a_0 = 0 \quad \text{e} \quad E_{II}^4 + a_2 E_{II}^2 + a_0 = 0 \quad (5.36)$$

com

$$\begin{aligned} a_2 \equiv & - \left(4J_{AA}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_B}{n_A}} \right) \left(4J_{AA}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_B}{n_A}} + 2U_{AA}n_A \right) \\ & - \left(4J_{BB}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_A}{n_B}} \right) \left(4J_{BB}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_A}{n_B}} + 2U_{BB}n_B \right) \\ & - 4J_{AB}(1 - 2\epsilon_k) [2J_{AB}(1 - 2\epsilon_k) - 2U_{AB}\sqrt{n_A n_B}] \end{aligned} \quad (5.37a)$$

e

$$\begin{aligned} a_0 \equiv & \left[\left(4J_{AA}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_B}{n_A}} \right) \left(4J_{BB}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_A}{n_B}} \right) - 4J_{AB}^2(1 - 2\epsilon_k)^2 \right] \\ & \times \left[\left(4J_{AA}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_B}{n_A}} + 2U_{AA}n_A \right) \left(4J_{BB}\epsilon_k + 2J_{AB}\sqrt{\frac{n_A}{n_B}} + 2U_{BB}n_B \right) \right. \\ & \left. - (2J_{AB}(1 - 2\epsilon_k) - 2U_{AB}\sqrt{n_A n_B})^2 \right], \end{aligned} \quad (5.37b)$$

onde introduzimos a variável

$$\epsilon_k \equiv \sin^2 \frac{\pi k}{M} \quad \text{com} \quad \sin^2 \frac{\pi}{M} \leq \epsilon_k \leq \cos^2 \frac{\pi}{2M}. \quad (5.38)$$

Se as raízes das equações características são reais,

$$E_I^{(\pm\pm)} = E_{II}^{(\pm\pm)} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{-a_2 \pm \sqrt{a_2^2 - 4a_0}}, \quad (5.39)$$

então cada par $(E_I^{(i)}, E_{II}^{(i)} = -E_I^{(i)})$, com $i = \pm\pm$, corresponde a um modo de excitação.

5.4 A estabilidade dinâmica e a rota para a catástrofe

A questão essencial que queremos responder é sob quais condições a catástrofe do sistema pode ser observada do ponto de vista experimental. A instabilidade dinâmica do condensado é um mecanismo que certamente inibe esta observação e desta maneira, dentro deste critério, se existir uma região no espaço dos parâmetros de controle na qual o plano de bifurcação é também a fronteira de um domínio onde o estado de equilíbrio é dinamicamente instável o acesso experimental da catástrofe não será possível. Investigaremos esta questão para um sistema invariante por inversão de cor e mostraremos que a observação da catástrofe depende apenas da razão J_{AB}/J entre as intensidades de tunelamento inter e intra-espécies. Em cada caso, também apresentaremos os diagramas de estabilidade dinâmica dos estados de equilíbrio.

Um sistema invariante por inversão de cor (4.2) é um sistema ressonante ($\gamma_0 = 0$) e o diagrama de bifurcação é apresentado na Figura 5.6.

- Para $\gamma_1/J_{AB} > -1$, que define o **domínio de estabilidade única**, o estado de equilíbrio com polarização $f = 0$ é o único mínimo da energia.
- Por outro lado, para $\gamma_1/J_{AB} < -1$, que define o **domínio de bi-estabilidade**, o estado de equilíbrio com $f = 0$ é agora um ponto de sela e o sistema admite dois estados de equilíbrio com polarizações $f = \pm f_c$ não-nulas, $f_c \equiv \sqrt{1 - (\gamma_1/J_{AB})^{-2}}$, que são dois mínimos simétricos e degenerados.

Este tipo de bifurcação na qual um mínimo dá origem a dois mínimos degenerados no domínio de bi-estabilidade caracteriza um caso particular da catástrofe cúspide denominada catástrofe *pitchfork* pois o diagrama de bifurcação tem o formato de uma forquilha. Podemos estabelecer uma conexão entre a catástrofe *pitchfork* e o fenômeno da quebra espontânea de simetria de cor da Hamiltoniana MBH. Note que no domínio de estabilidade única, a solução $f = 0$ exibe a mesma propriedade de invariância que a Hamiltoniana MBH. Já no domínio de bi-estabilidade, a simetria é quebrada pois a inversão de cor leva um estado de equilíbrio populacionalmente estável no outro, $f \rightarrow -f$. A instabilidade

populacional em $f = 0$ quando γ_1/J_{AB} decresce e passa pelo valor crítico $\gamma_1/J_{AB} = -1$ é análoga a uma transição de fase de segunda ordem em Mecânica Estatística com γ_1/J_{AB} desempenhando o papel da temperatura e f sendo o parâmetro de ordem.

Figura 5.6: Diagrama de bifurcação para um sistema invariante por inversão de cor (ressonante) onde representamos a polarização f dos estados de equilíbrio com $\phi_{AB} = 0$ como função do parâmetro γ_1/J_{AB} . As linhas cheias e pontilhadas representam, respectivamente, as soluções populacionalmente estáveis e instáveis. Na bifurcação o estado de equilíbrio $f = 0$, que é um mínimo para $\gamma_1/J_{AB} > -1$, torna-se um ponto de sela ao mesmo tempo que surgem dois estados de equilíbrio $f = \pm f_c$, $f_c \equiv \sqrt{1 - (J_{AB}/\gamma_1)^2}$, populacionalmente estáveis e degenerados. Este comportamento caracteriza um caso particular da catástrofe cúspide denominada catástrofe *pitchfork* uma vez que a forma do diagrama de bifurcação lembra uma forquilha.

O procedimento para determinar as regiões de estabilidade dinâmica do estado de equilíbrio, análogo ao realizado no capítulo anterior, começa analisando sob quais condições as energias de excitação de um particular quadrupletto k são reais. De acordo com a expressão (5.39), isto ocorre se as desigualdades

$$a_2 < 0, \quad a_0 > 0 \quad \text{e} \quad a_2^2 - 4a_0 > 0, \quad (5.40)$$

são satisfeitas simultaneamente. Os coeficientes a_2 e a_0 , dados em (5.37a) e (5.37b), agora são funções dos parâmetros de controle J , J_{AB} , γ_1 e γ_2 com

$$\gamma_1 = \frac{n(U - U_{AB})}{4} \quad \text{e} \quad \gamma_2 = \frac{n(U + U_{AB})}{4}. \quad (5.41)$$

Em termos destes parâmetros e da polarização f , esses coeficientes podem ser reescritos

da forma

$$\begin{aligned} \frac{-a_2}{16} = & 2(J^2 + J_{AB}^2)\epsilon_k^2 + \frac{J_{AB}^2}{1-f^2} + 2\left(\frac{JJ_{AB}}{\sqrt{1-f^2}} - J_{AB}^2\right)\epsilon_k \\ & + \gamma_2(J + J_{AB}\sqrt{1-f^2})\epsilon_k + \gamma_1[(J - J_{AB}\sqrt{1-f^2})\epsilon_k + J_{AB}\sqrt{1-f^2}] \quad (5.42a) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{a_0}{256} = & \left[(J^2 - J_{AB}^2)\epsilon_k^2 + \left(\frac{JJ_{AB}}{\sqrt{1-f^2}} + J_{AB}^2\right)\epsilon_k \right] \left[(J^2 - J_{AB}^2)\epsilon_k^2 + \left(\frac{JJ_{AB}}{\sqrt{1-f^2}} + J_{AB}^2\right)\epsilon_k \right. \\ & + \gamma_1\gamma_2(1-f^2) + \gamma_2\left((J - J_{AB}\sqrt{1-f^2})\epsilon_k + \frac{J_{AB}}{\sqrt{1-f^2}}\right) \\ & \left. + \gamma_1\left((J + J_{AB}\sqrt{1-f^2})\epsilon_k - J_{AB}\sqrt{1-f^2} + \frac{J_{AB}}{\sqrt{1-f^2}}\right) \right]. \quad (5.42b) \end{aligned}$$

Adotaremos J como sendo uma escala de energia de modo que a dependência com os parâmetros de controle se reduz às combinações γ_1/J , γ_2/J e J_{AB}/J . Entretanto, para não carregar a notação, continuaremos denotando os parâmetros de controle como γ_1 , γ_2 e J_{AB} , mas sob a ressalva de que estão escalonados por J ,

$$\gamma_1 \longrightarrow \gamma_1/J \quad (5.43)$$

$$\gamma_2 \longrightarrow \gamma_2/J \quad (5.44)$$

$$J_{AB} \longrightarrow J_{AB}/J. \quad (5.45)$$

Nestas condições, fixado o valor de k , a interseção dos domínios de validade das desigualdades (5.40) define a região no espaço $\gamma_1 \times \gamma_2 \times J_{AB}$ onde as energias de excitação de um particular quadrupletos são reais. Estendendo esta análise para todos os quadrupletos identificaremos uma condição geral que garante que o espectro é real, definindo, portanto, o domínio de estabilidade dinâmica do estado de equilíbrio. Assim, de acordo com nosso critério, se o plano de bifurcação $\gamma_1 = -J_{AB}$ for a fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica então a catástrofe não pode ser acessada experimentalmente. Por outro lado, se for fronteira de um domínio de estabilidade dinâmica, a observação da catástrofe é possível supondo a existência de uma rota adiabática até o plano de bifurcação. O dubleto não é considerado aqui pois como visto anteriormente o modo de energia zero corresponde a um estado de equilíbrio indiferente e o modo de lacuna está associado com a dinâmica de população e fase da mistura para $k = 0$. Mostraremos que na catástrofe a dinâmica de população e fase fica instável, pois ao cruzar o plano de bifurcação a energia

do modo de lacuna torna-se complexa.

Discutiremos separadamente os casos onde o sistema está definido no domínio de estabilidade única ($\gamma_1 > -J_{AB}$) e no domínio de bi-estabilidade ($\gamma_1 < -J_{AB}$).

5.4.1 Domínio de estabilidade única

O domínio de estabilidade única está definido para

$$\gamma_1 > -J_{AB} \quad (5.46)$$

onde o sistema admite um único estado de equilíbrio populacionalmente estável com polarização $f = 0$ independentemente dos parâmetros de controle do sistema. Para $f = 0$ os coeficientes (5.42a) e (5.42b) podem ser colocados da forma

$$\begin{aligned} \frac{-a_2}{16} &= [(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB}] [(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB} + \gamma_1] \\ &\quad + [(1 + J_{AB}) \epsilon_k] [(1 + J_{AB}) \epsilon_k + \gamma_2] \end{aligned} \quad (5.47a)$$

$$\begin{aligned} \frac{a_0}{256} &= [(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB}] [(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB} + \gamma_1] \\ &\quad \times [(1 + J_{AB}) \epsilon_k] [(1 + J_{AB}) \epsilon_k + \gamma_2]. \end{aligned} \quad (5.47b)$$

Utilizando estas expressões podemos escrever explicitamente cada desigualdade em (5.40) em termos dos parâmetros de controle do sistema e do quase-momento k do quadruplo.

(A) A desigualdade $a_2^2 - 4a_0 > 0$, que assume a forma explícita

$$\begin{aligned} &[(2\epsilon_k + J_{AB}) (2J_{AB}\epsilon_k - J_{AB} + \gamma_2 - \gamma_1) \\ &\quad + (2J_{AB}\epsilon_k - J_{AB}) (2\epsilon_k + J_{AB} + \gamma_2 + \gamma_1)]^2 > 0, \end{aligned} \quad (5.48)$$

é sempre satisfeita uma vez que seu primeiro membro é um quadrado e, portanto, positivo.

(B) A desigualdade $a_0 > 0$,

$$\begin{aligned} &[(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB}] [(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB} + \gamma_1] \\ &\quad \times [(1 + J_{AB}) \epsilon_k] [(1 + J_{AB}) \epsilon_k + \gamma_2] > 0, \end{aligned} \quad (5.49a)$$

envolve o produto de quatro termos distintos dos quais os dois que independem de γ_1 e γ_2 são estritamente positivos. Nestas condições, a desigualdade (5.49a) se reduz

apenas a

$$[(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB} + \gamma_1] [(1 + J_{AB}) \epsilon_k + \gamma_2] > 0 \quad (5.49b)$$

que é satisfeita se ambos os fatores compartilham do mesmo sinal. Assim, temos dois domínios de validade distintos,

$$(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB} + \gamma_1 > 0 \quad \text{e} \quad (1 + J_{AB}) \epsilon_k + \gamma_2 > 0 \quad (5.50a)$$

ou

$$(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB} + \gamma_1 < 0 \quad \text{e} \quad (1 + J_{AB}) \epsilon_k + \gamma_2 < 0. \quad (5.50b)$$

(C) A desigualdade $a_2 < 0$ pode ser escrita explicitamente da forma

$$\begin{aligned} & [(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB}] [(1 - J_{AB}) \epsilon_k + J_{AB} + \gamma_1] \\ & + [(1 + J_{AB}) \epsilon_k] [(1 + J_{AB}) \epsilon_k + \gamma_2] > 0. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Para determinar a região onde as energias de excitação de um particular quadrupletto k são reais devemos analisar simultaneamente as desigualdades (5.49a) e (5.51) já que, como visto anteriormente, a desigualdade (5.48) é satisfeita. Note que os termos da desigualdade (5.51) aparecem multiplicados em (5.49a). Deste modo, levando em conta que os termos independentes de γ_1 e γ_2 são estritamente positivos, segue que

- se (5.50a) é satisfeita então (5.51) é satisfeita;
- se (5.50b) é satisfeita então (5.51) é violada.

Destas considerações, concluímos que as energias de excitação de um particular quadrupletto k são reais na região dada pelas desigualdades (5.50a), que podem ser reescritas da forma

$$\gamma_1 > \gamma_1^*(k) \quad (5.52a)$$

$$\gamma_2 > \gamma_2^*(k) \quad (5.52b)$$

onde definimos

$$\gamma_1^*(k) \equiv -J_{AB} + (J_{AB} - 1)\epsilon_k \quad (5.52c)$$

$$\gamma_2^*(k) \equiv -(J_{AB} + 1)\epsilon_k. \quad (5.52d)$$

Agora determinaremos o domínio onde o espectro é real através da interseção das regiões definidas por (5.52a) e (5.52b) para todos os quadrupletos. Para cada desigualdade,

determinaremos a condição dominante que, como ficará evidente a seguir, depende dos valores de J_{AB} . Assim, distinguiremos dois casos: $J_{AB} < 1$ e $J_{AB} > 1$.

(a) $J_{AB} < 1$

Vemos que a desigualdade (5.52a) é satisfeita no domínio de estabilidade única pois $\gamma_1 > -J_{AB}$. Para a desigualdade (5.52b) vemos que a condição dominante deve ocorrer para o maior valor possível de $\gamma_2^*(k)$ como função de k . Se levarmos em conta que $\gamma_2^*(k)$ é uma função decrescente de ϵ_k , concluímos que se $\gamma_2 > \gamma_2^*(k_{\min})$, com $k_{\min} = 1$, então (5.52b) é satisfeita para todos os quadrupletos. Logo, o espectro é real no domínio definido por

$$\gamma_2 > -(J_{AB} + 1) \sin^2 \frac{\pi}{M}, \quad (5.53)$$

que corresponde ao domínio de estabilidade dinâmica do estado de equilíbrio com $f = 0$ para $J_{AB} < 1$, veja Figura 5.7(a). Observe que, neste caso, o plano de bifurcação é fronteira do domínio de estabilidade dinâmica o que nos leva a concluir, de acordo com nosso critério, que a catástrofe pode ser observada experimentalmente.

(b) $J_{AB} > 1$

Para a desigualdade (5.52a), uma vez que $\gamma_1^*(k)$ é uma função crescente de ϵ_k , segue que se $\gamma_1 > \gamma_1^*(k_{\max})$, com $k_{\max} = (M - 1)/2$, a desigualdade (5.52a) é satisfeita para todos os quadrupletos. Para (5.52b) vimos anteriormente que a condição dominante ocorre para o quadrupletos $k_{\min} = 1$. Logo, concluímos que o espectro é real no domínio definido por

$$\gamma_1 > (J_{AB} - 1) \cos^2 \frac{\pi}{2M} - J_{AB} \quad (5.54a)$$

$$\gamma_2 > -(J_{AB} + 1) \sin^2 \frac{\pi}{M}, \quad (5.54b)$$

que é o domínio onde o estado de equilíbrio com $f = 0$ é dinamicamente estável para $J_{AB} > 1$, veja Figura 5.7(b). Note que aqui o plano de bifurcação é agora fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica e, de acordo com nosso critério, a catástrofe não pode ser observada experimentalmente.

Nossa análise revela que se percorrermos o espaço dos parâmetros de controle no domínio de estabilidade única a observação experimental da catástrofe ocorre apenas se a razão entre as intensidades de tunelamento inter- e intras-espécies for menor do que a unidade, $J_{AB}/J < 1$, onde estamos supondo a existência de uma rota adiabática até o

Figura 5.7: Diagrama de estabilidade dinâmica do estado de equilíbrio com $f = 0$ no domínio de estabilidade única de uma mistura binária em uma rede óptica com $M = 9$ sítios com (a) $J_{AB} = 0.5$ e (b) $J_{AB} = 4$. As cores cinza claro e escuro identificam, respectivamente, os domínios de estabilidade e instabilidade dinâmica do estado de equilíbrio. Em (a) o plano de bifurcação $\gamma_1 = -0.5$ é fronteira do domínio de estabilidade dinâmica $\gamma_2 > \gamma_2^*(k_{\min} = 1) \approx -0.18$ e a observação experimental da catástrofe é possível. Em (b) o início da instabilidade dinâmica ocorre em $\gamma_1 = \gamma_1^*(k_{\max} = 4) \approx -1.09$, isto é, antes do sistema atingir o plano de bifurcação $\gamma_1 = -4$. Logo, o plano de bifurcação é fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica e concluímos que não é possível observar experimentalmente a catástrofe.

plano de bifurcação. Além disto, podemos mostrar que ao cruzar o plano de bifurcação a dinâmica populacional do sistema torna-se instável. Como visto anteriormente, o modo de lacuna que compõe o dubleto está relacionado com a oscilação do número de átomos de cada espécie e desta forma, para o estado de equilíbrio com $f = 0$, essa frequência é, de acordo com (5.24b), igual a

$$\omega_{\text{gap}} = \sqrt{16J_{AB}(\gamma_1 + J_{AB})}. \quad (5.55)$$

Note que ao atingir o plano de bifurcação, $\gamma_1 = -J_{AB}$, a frequência se anula e ao cruzar torna-se complexa mostrando que a dinâmica de população e fase do sistema fica instável.

5.4.2 Domínio de bi-estabilidade

O domínio de bi-estabilidade está definido para

$$\gamma_1 < -J_{AB} \quad (5.56)$$

onde os estados de equilíbrio violam a invariância por inversão de cor. Temos dois estados de equilíbrio populacionalmente estáveis que são degenerados e apresentam polarizações opostas,

$$f = \pm f_c \quad \text{com} \quad f_c \equiv \sqrt{1 - (\gamma_1/J_{AB})^{-2}},$$

que dependem dos parâmetros de controle γ_1 e J_{AB} . Como os coeficientes (5.42a) e (5.42b) são funções pares de f fica evidente que as condições de estabilidade dinâmica para estados de equilíbrio com polarizações f_c e $-f_c$ são as mesmas. Para $f = \pm f_c$ esses coeficientes são dados por

$$-\frac{a_2}{16} = 2(1 + J_{AB}^2)\epsilon_k^2 - (\gamma_1 + J_{AB}^2)\epsilon_k + \gamma_1^2 - J_{AB}^2 + \frac{\gamma_2}{\gamma_1}(\gamma_1 - J_{AB}^2)\epsilon_k \quad (5.57a)$$

$$\begin{aligned} \frac{a_0}{256} = & [(1 - J_{AB}^2)\epsilon_k^2 - (\gamma_1 - J_{AB}^2)\epsilon_k] \\ & \times \left[(1 - J_{AB}^2)\epsilon_k^2 - (\gamma_1^2 - J_{AB}^2) + \frac{\gamma_2}{\gamma_1}[(\gamma_1 + J_{AB}^2)\epsilon_k - (\gamma_1^2 - J_{AB}^2)] \right] \end{aligned} \quad (5.57b)$$

Para esta análise será conveniente parametrizarmos cada uma das desigualdades mantendo a dependência explícita com γ_2 e definindo coeficientes que carreguem a dependência com γ_1 , J_{AB} e k .

(I) Podemos expressar a desigualdade $a_0 > 0$ como

$$G(\alpha_1\gamma_2 + \alpha_0) > 0 \quad (5.58)$$

onde os coeficientes $G(\gamma_1, J_{AB}, k)$ e $\alpha_i(\gamma_1, J_{AB}, k)$ são da forma

$$G \equiv \epsilon_k [\epsilon_k + J_{AB}^2(1 - \epsilon_k) - \gamma_1] \quad (5.59a)$$

$$\alpha_1 \equiv \frac{(\gamma_1 + J_{AB}^2)\epsilon_k - (\gamma_1^2 - J_{AB}^2)}{\gamma_1} \quad (5.59b)$$

$$\alpha_0 \equiv (1 - J_{AB}^2)\epsilon_k^2 - (\gamma_1^2 - J_{AB}^2). \quad (5.59c)$$

De (5.59a), vemos que G é estritamente positivo uma vez que $\gamma_1 < -J_{AB}$. Assim, (5.58) se reduz simplesmente a

$$\alpha_1\gamma_2 + \alpha_0 > 0. \quad (5.60)$$

(II) Da mesma forma podemos parametrizar $a_2 < 0$ que fica

$$\beta_1\gamma_2 + \beta_0 > 0, \quad (5.61)$$

onde os coeficientes $\beta_i(\gamma_1, J_{AB}, k)$ são

$$\beta_1 \equiv \frac{(\gamma_1 - J_{AB}^2)\epsilon_k}{\gamma_1} \quad (5.62a)$$

$$\beta_0 \equiv 2(1 + J_{AB}^2)\epsilon_k^2 + (\gamma_1^2 - J_{AB}^2) - (\gamma_1 + J_{AB}^2)\epsilon_k. \quad (5.62b)$$

(III) A desigualdade $a_2^2 - 4a_0 > 0$ pode ser reescrita na forma

$$c_2\gamma_2^2 + c_1\gamma_2 + c_0 > 0, \quad (5.63)$$

onde os coeficientes $c_i(\gamma_1, J_{AB}, k)$ são dados em termos de G , α_1 , α_0 , β_1 e β_0 como

$$c_2 \equiv \beta_1^2 \quad (5.64a)$$

$$c_1 \equiv 2\beta_0\beta_1 - 4G\alpha_1 \quad (5.64b)$$

$$c_0 \equiv \beta_0^2 - 4G\alpha_0. \quad (5.64c)$$

Podemos mostrar que (5.63) é satisfeita no domínio de bi-estabilidade. Para isto

basta mostrar que o menor valor da função

$$D(\gamma_2, \gamma_1, J_{AB}, k) \equiv c_2 \gamma_2^2 + c_1 \gamma_2 + c_0 \quad (5.65)$$

definido neste domínio é uma quantidade estritamente positiva. Observe que, se fixarmos os parâmetros γ_1 , J_{AB} e k , a função D descreve uma parábola no plano $\gamma_2 \times D$ com curvatura

$$\kappa = 2c_2 \quad (5.66a)$$

e vértice de coordenadas (γ_2^V, D^V) onde

$$\gamma_2^V = -\frac{c_1}{2c_2} \quad \text{e} \quad D^V = c_0 - \frac{c_1^2}{4c_2}. \quad (5.66b)$$

Como a curvatura κ é estritamente positiva, o vértice corresponde a um ponto de mínimo da parábola. Assim, vemos que o menor valor que D assume no domínio de bi-estabilidade corresponde à ordenada de um vértice de parábola no plano $\gamma_2 \times D$. Uma inspeção da forma explícita de D^V ,

$$D^V = \frac{4G}{\beta_1^2} [\beta_1(\alpha_1\beta_0 - \alpha_0\beta_1) - G\alpha_1^2], \quad (5.67a)$$

revela que, se levarmos em conta que $G > 0$ e que o termo entre colchetes

$$\beta_1(\alpha_1\beta_0 - \alpha_0\beta_1) - G\alpha_1^2 = \frac{J_{AB}^2 \epsilon_k^2}{\gamma_1^2} (1 + 2\epsilon_k - \gamma_1)^2 (\gamma_1^2 - J_{AB}^2) \quad (5.67b)$$

é estritamente positivo para $\gamma_1 < -J_{AB}$, então $D^V > 0$. Logo, atestamos a validade de $a_2^2 - 4a_0 > 0$ no domínio de bi-estabilidade.

Para determinar a região do espaço dos parâmetros de controle onde as energias de excitação de um particular quadrupletto são reais, devemos achar a interseção dos domínios de validade de (5.60) e (5.61) já que, como visto anteriormente, (5.63) é sempre satisfeita no domínio de bi-estabilidade. Para isto devemos analisar simultaneamente as desigualdades

$$\begin{cases} a_0 > 0 : & \alpha_1 \gamma_2 + \alpha_0 > 0 \\ a_2 < 0 : & \beta_1 \gamma_2 + \beta_0 > 0 \end{cases}. \quad (5.68)$$

No Apêndice D apresentamos as possibilidades que surgem quando tomamos a interseção de duas desigualdades genéricas da forma (5.68). Cada uma dessas possibilidades é defi-

nida pelos sinais de α_1 , β_1 e da função $F(\gamma_1, J_{AB}, k)$ dada por

$$F = \frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1}. \quad (5.69)$$

A positividade do termo (5.67b) impõe uma condição para a função F . De fato, expressando essa quantidade em termos de $F = (\alpha_0\beta_1 - \alpha_1\beta_0)/\alpha_1\beta_1$, segue que

$$\alpha_1(F\beta_1^2 + G\alpha_1) < 0. \quad (5.70)$$

Para o coeficiente β_1 notamos de (5.62a) que

$$\beta_1 > 0 \quad (5.71)$$

para $\gamma_1 < -J_{AB}$. Por outro lado, como veremos adiante, o coeficiente α_1 pode se anular dependendo dos valores de J_{AB} . Assim, devemos considerar separadamente os casos $J_{AB} < 1$ e $J_{AB} > 1$. Em cada caso, após identificarmos a região onde as energias de um quadrupletto são reais, determinaremos o domínio de estabilidade dinâmica do estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$.

(a) $J_{AB} < 1$

Vamos agora analisar o sinal de α_1 . Introduzindo a identidade $\gamma_1 + J_{AB}^2 = (\gamma_1 + J_{AB}) - J_{AB}(1 - J_{AB})$ no termo que multiplica ϵ_k em (5.59b),

$$\alpha_1 = \frac{[(\gamma_1 + J_{AB}) - J_{AB}(1 - J_{AB})] \epsilon_k - (\gamma_1^2 - J_{AB}^2)}{\gamma_1}, \quad (5.72)$$

e levando em conta que $\gamma_1 < -J_{AB}$ e $J_{AB} < 1$ fica evidente que $\alpha_1 > 0$. Logo, para este caso, temos

$$\alpha_1 > 0 \quad \text{e} \quad \beta_1 > 0 \quad (5.73)$$

que se enquadra no Caso A do Apêndice D. Duas possibilidades podem ocorrer quando consideramos a interseção das desigualdades (5.68), a saber:

- (i) se $F < 0$ então $a_0 > 0$ é dominante;
- (ii) se $F > 0$ então $a_2 < 0$ é dominante.

Para determinar o sinal de F recorreremos a condição (5.70). Observe que a positividade de α_1 impõe que $F\beta_1^2 + G\alpha_1 < 0$, ou seja,

$$F < -\frac{G\alpha_1}{\beta_1^2}. \quad (5.74)$$

Como $G > 0$ e $\alpha_1 > 0$ segue que $F < 0$. Logo, concluímos que a desigualdade $a_0 > 0$ é dominante e define, para um particular k , a região onde as energias de excitação do quadrupletto k são reais,

$$\alpha_1(k)\gamma_2 + \alpha_0(k) > 0. \quad (5.75)$$

Para determinar o domínio onde o espectro é real, devemos tomar a interseção das regiões definidas por (5.75) para todo quadrupletto. Como $\alpha_1(k) > 0$ segue que

$$\gamma_2 > -\frac{\alpha_0}{\alpha_1}(k) \quad (5.76)$$

de modo que a condição dominante ocorre para o maior valor de $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ como função do quase-momento k . Podemos mostrar que $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ é uma função decrescente de ϵ_k e para isto basta verificar o sinal da sua derivada. Embora esta função seja discreta podemos calcular a derivada assumindo que ϵ_k seja uma variável contínua,

$$\frac{d}{d\epsilon_k} \left[-\frac{\alpha_0}{\alpha_1}(k) \right] = -\frac{1}{\alpha_1^2(k)} [\lambda_2 \epsilon_k^2 + \lambda_1 \epsilon_k + \lambda_0] \quad (5.77)$$

com

$$\lambda_2(\gamma_1, J_{AB}) \equiv \frac{(1 - J_{AB}^2)(\gamma_1 + J_{AB}^2)}{\gamma_1} \quad (5.78a)$$

$$\lambda_1(\gamma_1, J_{AB}) \equiv \frac{-2(1 - J_{AB}^2)(\gamma_1^2 - J_{AB}^2)}{\gamma_1} \quad (5.78b)$$

$$\lambda_0(\gamma_1, J_{AB}) \equiv \frac{(\gamma_1^2 - J_{AB}^2)(\gamma_1 + J_{AB}^2)}{\gamma_1}. \quad (5.78c)$$

Levando em conta que $\gamma_1 < -J_{AB}$ e $J_{AB} < 1$ vemos que os coeficientes λ_i são todos positivos e o discriminante

$$\lambda_1^2 - 4\lambda_2\lambda_0 = \frac{-4J_{AB}^2(1 + \gamma_1)^2(1 - J_{AB}^2)(\gamma_1^2 - J_{AB}^2)}{\gamma_1^2} \quad (5.79)$$

é sempre negativo. Logo, a derivada nunca se anula e é estritamente negativa para qualquer ϵ_k e, portanto, $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ é função decrescente de ϵ_k . Assim, retomando o conjunto de valores discretos de k , fica evidente que essa função assume seu maior valor para $k_{\min} = 1$. Deste modo,

$$\alpha_1(k_{\min})\gamma_2 + \alpha_0(k_{\min}) > 0 \quad (5.80)$$

define o domínio onde o espectro é real e, portanto, o domínio de estabilidade dinâmica

Figura 5.8: Diagrama de estabilidade dinâmica do estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$ no domínio de bi-estabilidade de uma mistura binária em uma rede óptica com $M = 9$ sítios e $J_{AB} = 0.5$. Notamos que o plano de bifurcação $\gamma_1 = -0.5$ é fronteira de um domínio de estabilidade dinâmica e nestas condições, a catástrofe pode ser observada experimentalmente.

do estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$ para $J_{AB} < 1$, veja Figura 5.8(a). Aqui vemos que o plano de bifurcação é a fronteira de um domínio de estabilidade dinâmica e dentro do nosso critério é possível observar experimentalmente a catástrofe.

(b) $J_{AB} > 1$

Neste caso o coeficiente α_1 pode se anular. De (5.59b) vemos que $\alpha_1(\gamma_1) = 0$ possui duas raízes

$$\gamma_1^{(\pm)}(J_{AB}, k) \equiv \frac{\epsilon_k}{2} \pm \sqrt{\frac{\epsilon_k^2}{4} + J_{AB}^2(1 + \epsilon_k)}. \quad (5.81)$$

A raiz $\gamma_1^{(+)}$ é positiva e pode ser descartada já que está fora do domínio de bi-estabilidade. Já a raiz $\gamma_1^{(-)}$ está definida neste domínio. Para verificar isto basta notar que

$$\gamma_1^{(-)} + J_{AB} = \left(\frac{\epsilon_k}{2} + J_{AB}\right) - \sqrt{\left(\frac{\epsilon_k}{2} + J_{AB}\right)^2 + (J_{AB} - 1)J_{AB}\epsilon_k} \quad (5.82)$$

é sempre negativo para $J_{AB} > 1$ e, portanto, $\gamma_1^{(-)} < -J_{AB}$. Se expressarmos α_1 em

termos de suas raízes $\gamma_1^{(\pm)}$,

$$\alpha_1 = -\frac{(\gamma_1 - \gamma_1^{(-)})(\gamma_1 - \gamma_1^{(+)})}{\gamma_1}, \quad (5.83)$$

fica evidente que se $\gamma_1 > \gamma_1^{(-)}$ temos $\alpha_1 < 0$ e se $\gamma_1 < \gamma_1^{(-)}$ temos $\alpha_1 > 0$. Assim é necessário separar a análise em dois casos:

- Se $\gamma_1^{(-)} < \gamma_1 < -J_{AB}$ então

$$\alpha_1 < 0 \quad \text{e} \quad \beta_1 > 0 \quad (5.84)$$

que se enquadra no Caso B do Apêndice D onde temos que

- (i) se $F > 0$ a interseção é nula;
- (ii) se $F < 0$ a interseção é o intervalo limitado $-\frac{\beta_0}{\beta_1} < \gamma_2 < -\frac{\alpha_0}{\alpha_1}$.

De (5.70) vemos que a negatividade de α_1 impõe que $F\beta_1^2 + G\alpha_1 > 0$, ou seja,

$$F > -\frac{G\alpha_1}{\beta_1^2}. \quad (5.85)$$

Como $G > 0$ e $\alpha_1 < 0$ segue que $F > 0$ mostrando que a interseção entre as desigualdades (5.68) é nula, ou seja, não existem pontos neste domínio onde ambas sejam satisfeitas simultaneamente. Deste modo, para todo quadrupletto, o estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$ será sempre dinamicamente instável em

$$\gamma_1^{(-)}(k) < \gamma_1 < -J_{AB}. \quad (5.86)$$

Como $\gamma_1^{(-)}(k)$ é uma função decrescente de ϵ_k , vemos então que toda a região limitada em

$$\gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}}) < \gamma_1 < -J_{AB}, \quad (5.87)$$

com $k_{\text{máx}} = (M - 1)/2$, está definida no domínio de instabilidade dinâmica do estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$. Assim, devemos agora restringir a análise ao domínio $\gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$.

- Para $\gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$ vemos que para todo quadrupletto

$$\alpha_1 > 0 \quad \text{e} \quad \beta_1 > 0 \quad (5.88)$$

que se enquadra no Caso A. A positividade de α_1 exige que $F > 0$ e, deste modo,

segue que a desigualdade $a_0 > 0$ é dominante e, para um particular k , define a região onde as energias de excitação do quadrupeto k são reais.

A região onde o espectro é real é definida pela condição dominante de

$$\alpha_1(k)\gamma_2 + \alpha_0(k) > 0 \quad \text{para} \quad \gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}}). \quad (5.89)$$

Como $\alpha_1(k) > 0$ vemos que tal condição ocorre para o maior valor possível de $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ como função de k . Uma inspeção de (5.77) revela que a derivada, neste caso, pode se anular e tal fato exige uma análise mais detalhada do comportamento da função no intervalo $k_{\text{mín}} \leq k \leq k_{\text{máx}}$.

Aqui analisamos numericamente o comportamento de $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ como função de k , $\gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$ e $J_{AB} > 1$. Nossos resultados mostraram que, fixado $J_{AB} > 1$, o ponto de cruzamento das fronteiras dos domínios de validade de (5.89) para $k_{\text{mín}}$ e $k_{\text{máx}}$ define dois intervalos distintos em $\gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$ onde em um a função $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ assume o maior valor para $k_{\text{mín}}$ e no outro para $k_{\text{máx}}$. Denotando por γ_1^C a abscissa deste ponto cruzamento temos:

- Para $\gamma_1^C < \gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$ a condição dominante ocorre para $k_{\text{máx}}$,

$$\alpha_1(k_{\text{máx}})\gamma_2 + \alpha_0(k_{\text{máx}}) > 0. \quad (5.90a)$$

- Para $\gamma_1 < \gamma_1^C$ a condição dominante ocorre para $k_{\text{mín}}$,

$$\alpha_1(k_{\text{mín}})\gamma_2 + \alpha_0(k_{\text{mín}}) > 0. \quad (5.90b)$$

Na Figura 5.9 apresentamos os gráficos que ilustram o comportamento de $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ como função de k para diferentes valores de $\gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$ definidos nos intervalos descritos acima. A abscissa γ_1^C é determinada da igualdade

$$-\frac{\alpha_0}{\alpha_1}(\gamma_1^C, k_{\text{máx}}) = -\frac{\alpha_0}{\alpha_1}(\gamma_1^C, k_{\text{mín}}), \quad (5.91)$$

da qual segue que γ_1^C é solução da equação cúbica

$$\gamma_1^C{}^3 + d_2\gamma_1^C{}^2 + d_1\gamma_1^C + d_0 = 0, \quad (5.92)$$

com

$$d_2(J_{AB}) \equiv (J_{AB}^2 - 1)(\epsilon_{k_{\text{máx}}} + \epsilon_{k_{\text{mín}}}) + J_{AB}^2 \quad (5.93a)$$

$$d_1(J_{AB}) \equiv -(J_{AB}^2 - 1)\epsilon_{k_{\text{máx}}}\epsilon_{k_{\text{mín}}} - J_{AB}^2 \quad (5.93b)$$

$$d_0(J_{AB}) \equiv -J_{AB}^2(J_{AB}^2 - 1)(\epsilon_{k_{\text{máx}}} + \epsilon_{k_{\text{máx}}}\epsilon_{k_{\text{mín}}} + \epsilon_{k_{\text{mín}}}) - J_{AB}^4, \quad (5.93c)$$

que está definida em $\gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$.

Figura 5.9: Gráficos de $-\alpha_0/\alpha_1(k)$ como função dos quase-momento k dos quadrupletos do espectro de excitação do estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$ no domínio de bi-estabilidade de uma mistura binária em uma rede óptica com $M = 9$ sítios e $J_{AB} = 4$ para (a) $\gamma_1 = -5.35$, (b) $\gamma_1 = \gamma_1^C \approx -32.33$ e (c) $\gamma_1 = -100$. Nas proximidades de $\gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}}) \approx -5.15$, caso (a), o maior valor da função ocorre para $k_{\text{máx}} = 4$. Isto perdura até γ_1 atingir o valor γ_1^C , caso (b), onde as fronteiras dos domínios de $k_{\text{máx}} = 4$ e $k_{\text{mín}} = 1$ se cruzam. A partir deste ponto, caso (c), a função atinge seu maior valor apenas para $k_{\text{mín}} = 1$.

Concluimos, portanto, que o espectro é real no domínio dado pelas desigualdades (5.90a) e (5.90b) que define a região onde o estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$ é dinamicamente estável para $J_{AB} > 1$, veja Figura (5.10). Vimos anteriormente que na região $\gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}}) < \gamma_1 < -J_{AB}$ o estado de equilíbrio é dinamicamente instável mostrando assim que o plano de bifurcação é fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica. Logo, de acordo com nosso critério, a catástrofe não pode ser observada experimentalmente.

Os resultados acima mostram que se percorrermos o espaço dos parâmetros de controle no domínio de bi-estabilidade a observação experimental da catástrofe também ocorre apenas se $J_{AB}/J < 1$. Além disto, é possível verificar que a dinâmica populacional torna-se instável quando cruzamos o plano de bifurcação. Para os estados de equilíbrio com $f = \pm f_c$ vemos de (5.24b) que

$$\omega_{\text{gap}} = \sqrt{16(\gamma_1 + J_{AB})(\gamma_1 - J_{AB})}. \quad (5.94)$$

Figura 5.10: (a) Diagrama de estabilidade dinâmica do estado de equilíbrio com $f = \pm f_c$ no domínio de bi-estabilidade de uma mistura binária em uma rede óptica com $M = 9$ sítios e $J_{AB} = 4$. Aqui o plano de bifurcação $\gamma_1 = -4$ é a fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica e dentro do nosso critério não é possível acessar experimentalmente a catástrofe. A fronteira do domínio de estabilidade dinâmica é composta por um trecho associado ao quadrupeto $k_{\text{máx}} = 4$ para $\gamma_1^C < \gamma_1 < \gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}})$ e ao quadrupeto $k_{\text{mín}} = 1$ para $\gamma_1 < \gamma_1^C$ onde $\gamma_1^C \approx -32.33$ e $\gamma_1^{(-)}(k_{\text{máx}}) \approx -5.15$. A linha perpendicular em $\gamma_1 = \gamma_1^C$ indica a separação desses dois intervalos. Em (b) ilustramos o cruzamento onde as linhas cheia e tracejada representam, respectivamente, as fronteiras para $k_{\text{máx}}$ e $k_{\text{mín}}$.

Ao atingir o plano de bifurcação $\gamma_1 = -J_{AB}$ a frequência se anula e fica complexa quando ocorre o cruzamento. Logo, a dinâmica de população e fase do sistema torna-se instável.

Capítulo 6

Conclusões

Aqui apresentaremos as conclusões da tese:

(A) As misturas binárias de condensados e suas excitações elementares

- Deduzimos e resolvemos as equações de GP para o MBH generalizado para uma mistura binária de átomos bosônicos sem o termo de tunelamento inter-espécies ($J_{AB} = 0$) e mostramos que os estados de equilíbrio são misturas binárias de condensados nos quais os átomos de cada espécie ocupam estados de quase-momento bem-definido. Os possíveis valores do quase-momento formam um conjunto discreto associado com as M -ésimas raízes da unidade, que está definido na primeira zona de Brillouin. Examinando as soluções das equações de GP verificamos que os átomos são não-localizados nos condensados e que existe uma correlação entre as fases dos sítios, a diferença de fase entre sítios consecutivos fixa e uma função do quase-momento do estado ocupado pelos átomos no condensado, $e^{i\frac{2\pi q_j}{M}}$.
- De acordo com a Teoria de Bogoliubov determinamos as energias das excitações elementares resolvendo as equações de BdG do MBH que resultam da diagonalização de uma Hamiltoniana Efetiva que é bilinear no produto de operadores deslocados. Um exame da estrutura de acoplamento dos quase-momentos na Hamiltoniana Efetiva revela que o termo de interação inter-espécies acopla apenas pares de quase-momentos acoplados nos termos de interação intra-espécie. Como consequência desta estrutura de acoplamento vimos que a Hamiltoniana Efetiva pode ser decomposta na soma direta de um bloco 4×4 e $(M - 1)/2$ blocos 8×8 o que simplifica consideravelmente o problema da diagonalização da matriz $4M \times 4M$. A diagonalização do bloco 4×4 , que envolve o acoplamento dos singletos (q_A, q_A) e (q_B, q_B) , resultou em um dubleto de modos de energia zero que aparecem como consequência

da violação da conservação do número de átomos de cada espécie introduzidas pela Aproximação de Bogoliubov. Tais soluções correspondem fisicamente aos estados de equilíbrio indiferente do sistema. Já a diagonalização dos $(M-1)/2$ blocos 8×8 , que acoplam os dubletos de cada espécie, identifica os quadrupletos cujo espectro de excitação possui quatro ramos.

(B) Estabilidade dinâmica das misturas binárias de condensados

- No contexto da Teoria de Bogoliubov investigamos a estabilidade dinâmica de dois casos de misturas binárias de condensados onde, em um caso, $q_A = q_B$ e, no outro, $q_A = -q_B$ para um sistema invariante por inversão de cor onde $J_{AA} = J_{BB}$ e $U_{AA} = U_{BB}$. Fixamos $n_A = n_B = n/2$ pois o número de átomos de cada espécie é uma constante do movimento e deste modo analisamos apenas estados de equilíbrio que não violam a invariância de cor.

(i) Condensados com $q_A = q_B = 0$

Para sistemas com uma única componente bosônica um condensado com $q = 0$ é sempre dinamicamente instável em um regime de interação repulsiva. Entretanto, vimos que a mistura de dois condensados com $q = 0$ pode ser dinamicamente instável. O agente desestabilizador da mistura é a interação inter-espécies que, sendo atrativa ou repulsiva, pode tornar a mistura dinamicamente instável. No limite termodinâmico basta que a magnitude de $\tilde{U}_{AB}$ seja ligeiramente maior do que $\tilde{U}$ para que a mistura se torne dinamicamente instável.

(ii) Condensados com $q_A = q_B = q$

Nossos resultados revelam que as condições de estabilidade dinâmica dependem se o quase-momento q está definido nos quartos centrais ou laterais da primeira zona de Brillouin.

- Para q finito nos quartos centrais as condições de estabilidade dinâmica são uma extensão das condições obtidas para $q = 0$. A forma dos diagramas de estabilidade independem do quase-momento q do condensado. Observamos a existência de uma ordem de instabilidade, ou seja, quando $|\tilde{U}_{AB}|$ cresce com $\tilde{U}$ repulsivo fixo, a primeira mistura que se torna instável é com $q = q_{\text{máx}} = \text{Floor}(M/4)$ e a última é com $q = 0$. No limite termodinâmico este ordenamento desaparece de modo que se $|\tilde{U}_{AB}| > \tilde{U}$, para $\tilde{U}$ repulsivo, todas as misturas com q nos quartos centrais são instáveis. Já para $\tilde{U}$ atrativo a mistura é sempre dinamicamente instável.

- Para q nos quartos laterais vemos que a forma do diagrama de estabilidade é a reflexão com respeito a um eixo vertical da forma dos diagramas do caso anterior. Novamente fica evidente a invariância da forma destes diagramas pela variação do quase-momento q do condensado. Além disso, quando $|\tilde{U}_{AB}|$ cresce para um dado $\tilde{U}$ atrativo fixo, a primeira mistura que se torna instável é a com $q = q_{\min} = \text{Floor}(M/4) + 1$ e a última com $q = (M - 1)/2$. No limite termodinâmico se $|\tilde{U}_{AB}| > \tilde{U}$, para $\tilde{U}$ atrativo, todas as misturas com q nos quartos laterais são instáveis. Por outro lado, para $\tilde{U}$ repulsivo, a mistura é sempre dinamicamente instável.

(iii) **Condensados com $q_A = -q_B = q > 0$**

Os diagramas de estabilidade dinâmica para misturas com $q_A = -q_B$ apresentam algumas características distintas quando comparados com o caso $q_A = q_B$. Estas diferenças não residem apenas na forma mas também na sua dependência com o quase-momento do condensado. No caso $q_A = q_B$ a forma dos domínios de estabilidade é invariante com respeito a variação do quase-momento q do condensado. Por outro lado, para o caso contra-propagante, isto não ocorre pois a forma dos diagramas depende diretamente de q . As diferenças se acentuam no limite termodinâmico onde mostramos que para quase-momentos próximos do centro e das extremidades da primeira zona de Brillouin as condições de estabilidade dinâmica da mistura com $q_A = -q_B$ são exatamente as mesmas obtidas no caso $q_A = q_B$. Já nas bordas que separam os quartos centrais e laterais o comportamento é completamente diferente pois a presença de um $\tilde{U}_{AB}$ ligeiramente diferente de zero já desestabiliza completamente a mistura de condensados contra-propagantes.

Em todos estes casos ficou evidente o papel desestabilizador que $\tilde{U}_{AB}$ desempenha nas misturas binárias. No caso onde $\tilde{U}_{AB}$ é mais repulsivo do que $\tilde{U}$, os sítios tendem a ser ocupados por átomos da mesma espécie que é equivalente a uma separação espacial. Por outro lado, se $\tilde{U}_{AB}$ torna-se mais atrativo os sítios tendem a ser ocupados por átomos de espécies distintas que é equivalente a uma coexistência espacial.

(C) **O termo de conversão inter-espécies e a rota para a catástrofe**

- Quando consideramos um termo de tunelamento atômico inter-espécies não-nulo Hamiltoniana MBH, $J_{AB} \neq 0$, o número de átomos de cada espécie não é mais uma constante do movimento mas o número total permanece conservado. No contexto

da Teoria de Bogoliubov determinamos os estados de equilíbrio do sistema admitindo que os átomos de cada espécie ocupam um estado de quase-momento nulo. Os estados de equilíbrio são identificados pela fase relativa e polarização que são determinadas resolvendo as equações de Gross-Pitaevskii do MBH. Identificamos duas possíveis fases relativas, $\phi_{AB} = 0$ e $\phi_{AB} = \pi$, e para cada uma delas verificamos que, dependendo dos parâmetros de controle, temos uma única ou três soluções possíveis para a polarização.

- Através de uma análise Hessiana, mostramos que a bi-estabilidade ocorre apenas para os estados de equilíbrio nos quais as duas espécies atômicas estão em fase, $\phi_{AB} = 0$. Se $\gamma_1/J_{AB} > -1$ o sistema admite um único estado de equilíbrio populacionalmente estável. Por outro lado, se $\gamma_1/J_{AB} < -1$ a bi-estabilidade ocorre somente se $\gamma_0 < |\gamma_0^*|$ com $\gamma_0^*/J_{AB} = [(\gamma_1/J_{AB})^{2/3} - 1]^{3/2}$. Esta estrutura de bifurcação na qual uma solução estável dá origem a duas soluções estáveis e uma instável caracteriza uma catástrofe cúspide e indica a existência de histerese. Os resultados obtidos foram os mesmos da referência [47] para uma mistura homogênea de condensados com acoplamento Josephson. Para um sistema invariante por inversão de cor encontramos no regime de estabilidade única um único mínimo com $f = 0$ e no regime de bi-estabilidade dois mínimos degenerados com $f = \pm f_c$, $f_c \equiv \sqrt{1 - (J_{AB}/\gamma_1)^2}$. Este caso particular da catástrofe cúspide é a catástrofe *pitchfork* e neste caso é possível estabelecer uma conexão com o fenômeno da quebra espontânea da simetria de cor onde o regime de estabilidade única representa a fase simétrica e o regime de bi-estabilidade a fase não-simétrica. A instabilidade populacional em $f = 0$ quando γ_1/J_{AB} cruza o valor crítico tem um comportamento parecido com uma transição de fase de segunda ordem em Mecânica Estatística onde γ_1/J_{AB} faz o papel da temperatura e a polarização f do parâmetro de ordem.
- Deduzimos e resolvemos as equações de BdG para determinar as energias das excitações elementares. Novamente identificamos uma estrutura formada por um dubleto e $(M - 1)/2$ quadrupletos. No dubleto temos um modo de energia zero e um modo de lacuna que está relacionado com a dinâmica de população e fase da mistura. Mostramos que, quando o sistema cruza a curva de bifurcação, a energia do modo de lacuna fica complexa e como consequência a dinâmica populacional torna-se instável. Tal fato é a assinatura da catástrofe no sistema.
- Mapeamos os diagramas de estabilidade dinâmica dos estados de equilíbrio e, de acordo com nosso critério, a observação experimental da catástrofe é impossível se o plano de bifurcação for a fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica do

estado de equilíbrio. Nossa análise revelou que essa resposta depende apenas da razão entre as intensidades de tunelamento intra e inter-espécies. Tanto no regime de estabilidade única quanto bi-estabilidade vimos que se $J_{AB}/J > 1$ o plano de bifurcação é fronteira de um domínio de instabilidade dinâmica e, nestas condições, a observação experimental é impossível. Por outro lado, se $J_{AB}/J < 1$, o plano de bifurcação é fronteira do domínio de estabilidade dinâmica o que torna possível o acesso experimental da catástrofe, supondo a existência de uma rota adiabática até a bifurcação.

Apêndice A

Diagonalização de Hamiltonianas quadráticas bosônicas

Apresentaremos aqui o esquema geral da diagonalização de uma Hamiltoniana quadrática bosônica e as principais propriedades do problema de autovalores. Maiores detalhes e demonstrações dos principais teoremas podem ser encontrados na referência [57].

Uma Hamiltoniana quadrática bosônica tem a forma geral

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\alpha,\beta} h_{\alpha\beta} \hat{\mathcal{C}}_{\alpha}^{\dagger} \hat{\mathcal{C}}_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} (\Delta_{\alpha\beta} \hat{\mathcal{C}}_{\alpha}^{\dagger} \hat{\mathcal{C}}_{\beta}^{\dagger} + \Delta_{\alpha\beta}^* \hat{\mathcal{C}}_{\beta} \hat{\mathcal{C}}_{\alpha}) \quad (\text{A.1})$$

onde $\hat{\mathcal{C}}_{\alpha}^{\dagger}$ e $\hat{\mathcal{C}}_{\alpha}$ são operadores de criação e aniquilação de bósons que satisfazem a relação de comutação,

$$[\hat{\mathcal{C}}_{\alpha}, \hat{\mathcal{C}}_{\beta}^{\dagger}] = \delta_{\alpha\beta}.$$

Como $\hat{\mathcal{H}}$ tem que ser um operador hermitiano, decorre que os coeficientes $h_{\alpha\beta}$ e $\Delta_{\alpha\beta}$, respectivamente, são elementos de uma matriz hermitiana e uma simétrica.

Diagonalizar uma Hamiltoniana quadrática consiste em determinar uma transformação canônica que define os **operadores de quase-partícula**,

$$\hat{\mathcal{B}}_n^{\dagger} = \sum_r (u_r^n \hat{\mathcal{C}}_r^{\dagger} - v_r^n \hat{\mathcal{C}}_r), \quad (\text{A.2a})$$

$$\hat{\mathcal{B}}_n = \sum_r (u_r^{n*} \hat{\mathcal{C}}_r - v_r^{n*} \hat{\mathcal{C}}_r^{\dagger}), \quad (\text{A.2b})$$

tal que, nesta representação, $\hat{\mathcal{H}}$ assume a forma diagonal,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_n E_n \hat{\mathcal{B}}_n^{\dagger} \hat{\mathcal{B}}_n.$$

Desta imposição segue,

$$\begin{bmatrix} h & \Delta \\ \Delta^* & h^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^n \\ v^n \end{bmatrix} = E_n \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^n \\ v^n \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

que é a forma matricial das **equações de Bogoliubov-de Gennes** que determinam as energias E_n e a composição das excitações elementares $V^n = [u^n \ v^n]^T$, com T denotando a transposição da correspondente matriz. Em uma notação mais compacta, o problema de autovalores pode ser escrito da forma

$$\eta \mathcal{H} V^n = E_n V^n,$$

onde $\eta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ e $\mathcal{H} = \begin{bmatrix} h & \Delta \\ \Delta^* & h^* \end{bmatrix}$. Devemos, dessa maneira, diagonalizar $\eta \mathcal{H}$ que é uma matriz não-hermitiana. Os autovalores são obtidos da equação característica

$$\det(\eta \mathcal{H} - E_n) = 0. \quad (\text{A.4})$$

Se a matriz $\mathcal{H}$ é semi-positiva definida os autovalores da matriz $\eta \mathcal{H}$ são reais. Nessas condições, os autovalores aparecem em pares da forma $(E_n, -E_n)$ cujas normas dos autovetores correspondentes,

$$\sum_r (|u_r^n|^2 - |v_r^n|^2), \quad (\text{A.5})$$

possuem sinais contrários. Se V^n for o autovetor com autovalor E_n então γV^{n*} , com

$$\gamma = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

é o autovetor com autovalor $-E_n$. A energia de excitação é identificada com o autovalor cujo autovetor tem norma positiva.

Apêndice B

Acoplamento intra-espécies de quase-momentos na Hamiltoniana Efetiva para M par

Discutiremos aqui a determinação dos pares de quase-momentos da mesma espécie acoplados na Hamiltoniana Efetiva para M par. Neste caso, devido a equivalência dos quase-momentos $\pm \frac{M}{2}$, o intervalo de valores possíveis do quase-momento é assimétrico. Entretanto, para estabelecer um procedimento análogo ao realizado para M ímpar, identificaremos os pares acoplados admitindo inicialmente que os quase-momentos $\pm \frac{M}{2}$ são distinguíveis e no final impomos esta equivalência.

Vamos considerar separadamente os casos $q = 0$, $q > 0$ e $q < 0$.

- (i) Para $q = 0$ os pares acoplados são identificados a partir da equação

$$k_1 + k_2 = 0 \quad (\text{B.1})$$

da qual seguem $M + 1$ pares de quase-momentos opostos $(k, -k)$ com $-\frac{M}{2} \leq k \leq \frac{M}{2}$. Impondo a equivalência observamos que os pares $(-\frac{M}{2}, \frac{M}{2})$ e $(\frac{M}{2}, -\frac{M}{2})$ correspondem ao mesmo par $(\frac{M}{2}, \frac{M}{2})$. Assim temos um total de M pares dos quais $M - 2$ têm quase-momentos distintos e dois têm quase-momentos idênticos, $k = 0$ e $k = \frac{M}{2}$.

- (ii) Para $q > 0$ definimos na reta

$$k_1 + k_2 - 2q = 0 \quad (\text{B.2})$$

um segmento com extremidades $(\frac{M}{2} + 2q, -\frac{M}{2})$ e $(-\frac{M}{2}, \frac{M}{2} + 2q)$. Neste segmento de reta existem $M + 1 + 2q$ pontos, com $M + 1 - 2q$ definidos na primeira zona de Brillouin e $4q$ fora, que podem ser classificados em três grupos (pontos apresentados

em ordem decrescente de k_1):

- Grupo **I** formado por $2q$ pontos onde k_1 está fora da primeira zona de Brillouin,

$$\left(\frac{M}{2} + 2q, -\frac{M}{2}\right), \dots, \left(\frac{M}{2} + 1, -\frac{M}{2} + 2q - 1\right).$$

- Grupo **II** com $M + 1 - 2q$ pontos onde ambos os quase-momentos, k_1 e k_2 , estão localizados na primeira zona de Brillouin,

$$\left(\frac{M}{2}, -\frac{M}{2} + 2q\right), \dots, (q, q), \dots, \left(-\frac{M}{2} + 2q, \frac{M}{2}\right),$$

que inclui o par de quase-momentos idênticos, (q, q) , que envolve o quase-momento do estado ocupado pelos átomos no condensado.

- Grupo **III** formado por $2q$ pontos onde k_2 está fora da primeira zona de Brillouin,

$$\left(-\frac{M}{2} + 2q - 1, \frac{M}{2} + 1\right), \dots, \left(-\frac{M}{2}, \frac{M}{2} + 2q\right).$$

Como no caso M ímpar, notamos que os $2q + 1$ pontos da reta

$$k_1 + k_2 - 2q = -M \tag{B.3}$$

contidos na primeira zona de Brillouin estão relacionados por uma translação de $-M$ com os $4q$ pontos dos grupos **I** e **III** de (B.2). As reduções dos pontos das extremidades do segmento definido em (B.2), $\left(\frac{M}{2} + 2q, -\frac{M}{2}\right)$ do grupo **I** e $\left(-\frac{M}{2}, \frac{M}{2} + 2q\right)$ do grupo **III**, resultam respectivamente nos pontos $\left(-\frac{M}{2} + 2q, -\frac{M}{2}\right)$ e $\left(-\frac{M}{2}, -\frac{M}{2} + 2q\right)$ de (B.3). Impondo a equivalência dos quase-momentos $\pm \frac{M}{2}$ nestes pontos reduzidos, obtemos exatamente as extremidades do grupo **II**. Para os demais pontos verificamos que uma translação de $-M$ estabelece uma correspondência de dois para um e os pontos equivalentes dos grupos **I** e **III** são aqueles relacionados por $k_1^{\text{III}} = k_1^{\text{I}} - M$ e $k_2^{\text{III}} = k_2^{\text{I}} + M$. Logo, a redução dos pontos de **I** e **III** resultam no mesmo conjunto de pontos de (B.3). Concluimos, portanto, que o conjunto dos pares de quase-momentos da mesma espécie acoplados é formado pelos **pares não-reduzidos** do grupo **II** e pelos **pares reduzidos** provenientes ou do grupo **I** ou do **III**, sendo a última escolha arbitrária.

- (iii) Os pares acoplados para $q < 0$ podem ser obtidos através de uma reflexão dos pares acoplados para $q > 0$ com respeito a reta $k_1 + k_2 = 0$. Deste modo, se (k_1, k_2) é um

par de quase-momentos acoplados para $q > 0$ então o par refletido $(-k_2, -k_1)$ é o correspondente par acoplado para $q < 0$.

Na Tabela B.1 apresentamos os pares de quase-momentos da mesma espécie acoplados para $q < 0$ e $q > 0$ nas categorias não-reduzidos e reduzidos já levando em conta a equivalência dos quase-momentos $\pm \frac{M}{2}$.

M par	
$q < 0$	
Não-reduzidos	$(-\frac{M}{2} + 1, \frac{M}{2} - 1 - 2 q) \cdots (- q , - q) \cdots (\frac{M}{2} - 1 - 2 q , -\frac{M}{2} + 1)$
Reduzidos	$(\frac{M}{2} - 2 q , \frac{M}{2}) \cdots (- q + \frac{M}{2}, - q + \frac{M}{2}) \cdots (\frac{M}{2}, \frac{M}{2} - 2 q)$
$q > 0$	
Não-reduzidos	$(\frac{M}{2}, -\frac{M}{2} + 2q) \cdots (q, q) \cdots (-\frac{M}{2} + 2q, \frac{M}{2})$
Reduzidos	$(-\frac{M}{2} - 1 + 2q, -\frac{M}{2} + 1) \cdots (q - \frac{M}{2}, q - \frac{M}{2}) \cdots (-\frac{M}{2} + 1, -\frac{M}{2} - 1 + 2q)$

Tabela B.1: Tabela com os pares de quase-momentos da mesma espécie acoplados para M par nos casos $q < 0$ e $q > 0$. A equivalência dos quase-momentos $\pm \frac{M}{2}$ já está incorporada nos resultados apresentados.

Todas as propriedades discutidas aqui podem ser visualizadas nos diagramas de acoplamento no plano $k_1 \times k_2$, veja Figura B.1. O quadrante de linhas sólidas de centro na origem e lado igual a M define a primeira zona de Brillouin no sentido que todos os pontos no seu interior e fronteira envolvem quase-momentos que estão na primeira zona. A equação (3.26a) com k_1 restrito na primeira zona, $-5 \leq k_1 \leq 5$, define um segmento de reta neste plano com um trecho definido na primeira zona e o outro fora. O processo de redução é a translação de $\nu(q)M$, com $\nu(q)$ definido em (3.26c), da quantidade k_2 de modo a trazer os pontos que estão fora para dentro da primeira zona. Após esta redução, devemos impor a equivalência dos quase-momentos $\pm \frac{M}{2}$ para todos os pares reduzidos que estiverem localizados na fronteira tracejada do quadrante finalizando assim o procedimento para a determinação dos pares acoplados da mesma espécie. Uma outra propriedade ilustrada nos diagramas é a correspondência entre pares acoplados para $q > 0$ e $q < 0$ onde fica evidente que esses pares estão relacionados através de uma reflexão com respeito a reta $k_1 + k_2 = 0$ que associa o par (k_1, k_2) no par refletido $(-k_2, -k_1)$.

Para M par a existência de mais um par envolvendo quase-momentos idênticos e iguais a $\tilde{q} = q + \nu(q)\frac{M}{2}$ revela que neste caso o espectro das excitações elementares apresenta mais um dubleto de modos de excitação. O termo da Hamiltoniana Efetiva que envolve

Figura B.1: Diagrama de acoplamento intra-espcies de quase-momentos para $M = 10$ e (a) $q = -1$ e (b) $q = 1$. O quadrante de linhas slidas corresponde a primeira zona de Brillouin. Fixado o valor de k_1 na primeira zona, $-5 \leq k_1 \leq 5$, determinamos o correspondente par atravs de $k_2 = -k_1 + 2q$. Os pontos indicados pelo smbolo “x” esto fora da primeira zona e a reduo leva aos pontos, (a) $(5, -7) \rightarrow (5, 3)$ e $(4, -6) \rightarrow (4, 4)$ e (b) $(-5, 7) \rightarrow (-5, -3)$ e $(-4, 6) \rightarrow (-4, -4)$. Aps a reduo impomos a equivalncia dos quase-momentos $\pm \frac{M}{2}$ para todos os pontos que estiverem localizados nas linhas tracejadas do quadrante (indicados pelo smbolo “o”) completando assim a determinao dos pares acoplados. Comparando os diagramas observamos que os pares de quase-momentos acoplados em (a) e (b) esto relacionados por uma reflexo com respeito reta $k_1 + k_2 = 0$ (ponto-tracejada).

o acoplamento $(\tilde{q}_A, \tilde{q}_A) \leftrightarrow (\tilde{q}_B, \tilde{q}_B)$ tem a forma

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_I^{(2)} = & (\epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} + U_{AA}n_A)\hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A} + (\epsilon_{B\tilde{q}_B}^{(q_B)} + U_{BB}n_B)\hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B} \\
& + \frac{U_{AA}n_A}{2}(\hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A}^{\dagger 2} + \hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A}^2) + \frac{U_{BB}n_B}{2}(\hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B}^{\dagger 2} + \hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B}^2) \\
& + U_{AB}\sqrt{n_An_B}(\hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B} + \hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A}) \\
& + U_{AB}\sqrt{n_An_B}(\hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A}^\dagger\hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B}^\dagger + \hat{\mathcal{C}}_{B\tilde{q}_B}\hat{\mathcal{C}}_{A\tilde{q}_A}).
\end{aligned} \tag{B.4}$$

As energias de excitação deste dubleto são obtidas resolvendo as equações de BdG,

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{B\tilde{q}_B}^{(q_B)} + U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{BB}n_B \\ U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} + U_{AA}n_A & U_{AB}\sqrt{n_An_B} \\ U_{AB}\sqrt{n_An_B} & U_{BB}n_B & U_{AB}\sqrt{n_An_B} & \epsilon_{B\tilde{q}_B}^{(q_B)} + U_{BB}n_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{A\tilde{q}_A} \\ u_{B\tilde{q}_B} \\ v_{A\tilde{q}_A} \\ v_{B\tilde{q}_B} \end{bmatrix} \\
& = E \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{A\tilde{q}_A} \\ u_{B\tilde{q}_B} \\ v_{A\tilde{q}_A} \\ v_{B\tilde{q}_B} \end{bmatrix}, \tag{B.5}
\end{aligned}$$

cujas equação característica associada é

$$E^4 + a_2E^2 + a_0 = 0 \tag{B.6a}$$

com

$$a_2 = -\epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} \left(\epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} + 2U_{AA}n_A \right) - \epsilon_{B\tilde{q}_B}^{(q_B)} \left(\epsilon_{B\tilde{q}_B}^{(q_B)} + 2U_{BB}n_B \right) \tag{B.6b}$$

$$a_0 = \epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} \epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} \left[\left(\epsilon_{A\tilde{q}_A}^{(q_A)} + 2U_{AA}n_A \right) \left(\epsilon_{B\tilde{q}_B}^{(q_B)} + 2U_{BB}n_B \right) - 4U_{AB}^2 n_A n_B \right]. \tag{B.6c}$$

De acordo com (B.6a) os autovalores são da forma

$$E = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{-a_2 \pm \sqrt{a_2^2 - 4a_0}}. \tag{B.7}$$

Agrupando estas energias em pares da forma $(E, -E)$ identificamos o dubleto de modos de excitação com energias finitas que são reais se as desigualdades

$$a_2 < 0, \quad a_0 > 0 \quad \text{e} \quad a_2^2 - 4a_0 > 0 \tag{B.8}$$

forem satisfeitas simultaneamente. Desta maneira, para determinar as condições de esta-

bilidade dinâmica dos estados de equilíbrio para M par, devemos analisar as energias de excitação de todos os quadrupletos e também as energias de excitação deste dubleto para garantir que todo o espectro seja real.

Apêndice C

Quase-momento relativo

Aqui apresentaremos a parametrização dos pares de quase-momentos da mesma espécie acoplados na Hamiltoniana Efetiva em termos do quase-momento relativo $r \equiv k - q$ e estabeleceremos uma forma de especificar os dubletos que compõem os quadrupletos do espectro das excitações.

C.1 Parametrização pelo quase-momento relativo

Para cada par de quase-momentos acoplados podemos associar um par de quase-momentos relativos,

$$(k_1, k_2) \leftrightarrow (r_1, r_2) \quad (\text{C.1})$$

de modo que

$$r_1 + r_2 = \begin{cases} 0 & \text{se } (k_1, k_2) \text{ for não-reduzido} \\ \nu(q)M & \text{se } (k_1, k_2) \text{ for reduzido} \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

com $\nu(q)$ dado em (3.26c). Abaixo apresentamos, nos casos $q > 0$ e $q < 0$, os pares de quase-momentos relativos obtidos diretamente da Tabela 3.1 e a forma da parametrização.

(a) $q > 0$

- **Pares Não-Reduzidos**

Em ordem decrescente de r_1 :

$$\left(\frac{M-1}{2} - q, -\frac{M-1}{2} + q \right) \cdots (1, -1), (0, 0), (-1, 1) \cdots \left(-\frac{M-1}{2} + q, \frac{M-1}{2} - q \right).$$

Como $r_1 + r_2 = 0$ a forma da parametrização é

$$\boxed{(-r_1, r_1) \quad \text{com} \quad -\frac{M-1}{2} + q \leq r_1 \leq \frac{M-1}{2} - q.} \quad (\text{C.3})$$

Temos $M - 2q$ pares dos quais um envolve quase-momentos relativos idênticos e $M - 2q - 1$ distintos.

- **Pares Reduzidos**

Em ordem decrescente de r_1 :

$$\left(-\frac{M-1}{2} + q - 1, -\frac{M-1}{2} - q\right) \cdots \left(-\frac{M-1}{2}, -\frac{M-1}{2} - 1\right), \\ \left(-\frac{M-1}{2} - 1, -\frac{M-1}{2}\right) \cdots \left(-\frac{M-1}{2} - q, -\frac{M-1}{2} + q - 1\right).$$

Como $r_1 + r_2 = -M$ a forma da parametrização é

$$\boxed{(-r_1, r_1 - M) \quad \text{com} \quad \frac{M-1}{2} - q + 1 \leq r_1 \leq \frac{M-1}{2} + q.} \quad (\text{C.4})$$

Temos $2q$ pares todos envolvendo quase-momentos relativos distintos.

(b) $q < 0$

- **Pares Não-Reduzidos**

Em ordem crescente de r_1 :

$$\left(-\frac{M-1}{2} + |q|, \frac{M-1}{2} - |q|\right) \cdots (-1, 1), (0, 0), (1, -1) \cdots \left(\frac{M-1}{2} - |q|, -\frac{M-1}{2} + |q|\right).$$

Como $r_1 + r_2 = 0$ a forma da parametrização é

$$\boxed{(-r_1, r_1) \quad \text{com} \quad -\frac{M-1}{2} + |q| \leq r_1 \leq \frac{M-1}{2} - |q|.} \quad (\text{C.5})$$

Aqui temos $M - 2|q|$ pares dos quais um envolve quase-momentos relativos idênticos e $M - 2|q| - 1$ distintos.

- **Pares Reduzidos**

Em ordem crescente de r_1 :

$$\left(\frac{M-1}{2} - |q| + 1, \frac{M-1}{2} + |q|\right) \cdots \left(\frac{M-1}{2}, \frac{M-1}{2} + 1\right), \\ \left(\frac{M-1}{2} + 1, \frac{M-1}{2}\right) \cdots \left(\frac{M-1}{2} + |q|, \frac{M-1}{2} - |q| + 1\right).$$

Como $r_1 + r_2 = M$ a forma da parametrização é

$$\boxed{(-r_1, r_1 + M) \quad \text{com} \quad -\frac{M-1}{2} - |q| \leq r_1 \leq -\frac{M-1}{2} + |q| - 1.} \quad (\text{C.6})$$

Temos $2|q|$ pares todos envolvendo quase-momentos relativos distintos.

C.2 Identificando um quadrupletto

Uma questão relevante que devemos discutir é como identificar os quadrupletos de modos de excitação. Um quadrupletto é composto por dois dubletos e a cada um deles estão associados pares de quase-momentos distintos de uma espécie,

$$\begin{cases} \text{Dubleto } A : & (k_{1A}, k_{2A}) \text{ e } (k_{2A}, k_{1A}) \\ \text{Dubleto } B : & (k_{3B}, k_{4B}) \text{ e } (k_{4B}, k_{3B}) \end{cases}. \quad (\text{C.7})$$

Desta maneira para identificar um particular quadrupletto no espectro é suficiente especificar apenas um par de quase-momentos de cada dubleto. Assim, se levarmos em conta que pares de quase-momentos (k_1, k_2) e (k_2, k_1) que diferem pela troca dos quase-momentos do par estão relacionados por uma reflexão com respeito à reta $k_1 = k_2$, podemos então identificar um dubleto pelo valor r_1 definido no intervalo contínuo:

(a) $q > 0$

$$\boxed{1 \leq r_1 \leq \frac{M-1}{2}} \quad (\text{C.8})$$

- Se $1 \leq r_1 \leq \frac{M-1}{2} - q$ associamos ao dubleto r_1 o par não-reduzido $(-r_1, r_1)$;
- Se $\frac{M-1}{2} - q + 1 \leq r_1 \leq \frac{M-1}{2}$ associamos ao dubleto r_1 o par reduzido $(-r_1, r_1 - M)$.

(b) $q < 0$

$$\boxed{-\frac{M-1}{2} \leq r_1 \leq -1} \quad (\text{C.9})$$

- Se $-\frac{M-1}{2} \leq r_1 \leq -\frac{M-1}{2} + |q| - 1$ associamos ao dubleto r_1 o par reduzido $(-r_1, r_1 + M)$;
- Se $-\frac{M-1}{2} + |q| \leq r_1 \leq -1$ associamos ao dubleto r_1 o par não-reduzido $(-r_1, r_1)$.

Cada valor de r_1 definido neste intervalo identifica univocamente um dubleto.

Apêndice D

Análise de desigualdades

Neste Apêndice apresentaremos as diferentes interseções entre os domínios de validade das desigualdades

$$\begin{cases} \text{(I)} & \alpha_1 \gamma_2 + \alpha_0 > 0 \\ \text{(II)} & \beta_1 \gamma_2 + \beta_0 > 0 \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

onde α_i e β_i , com $i = 0, 1$, são coeficientes reais com α_1 e β_1 sendo não-nulos. Os domínios de validade destas desigualdades são

$$\text{(I)} \Rightarrow \begin{cases} \gamma_2 > -\frac{\alpha_0}{\alpha_1} & \text{se } \alpha_1 > 0 \\ \gamma_2 < -\frac{\alpha_0}{\alpha_1} & \text{se } \alpha_1 < 0 \end{cases} \quad \text{(II)} \Rightarrow \begin{cases} \gamma_2 > -\frac{\beta_0}{\beta_1} & \text{se } \beta_1 > 0 \\ \gamma_2 < -\frac{\beta_0}{\beta_1} & \text{se } \beta_1 < 0 \end{cases}. \quad (\text{D.2})$$

Para determinar as possíveis interseções desses intervalos é necessário distinguirmos dois casos especificados pelos sinais dos coeficientes α_1 e β_1 :

- **Caso A:** $\alpha_1 \beta_1 > 0$

Aqui as duas desigualdades tem o mesmo sinal.

- **A1:** Para $\alpha_1 > 0$ e $\beta_1 > 0$ temos que

- (i) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} < 0$ então a interseção é o domínio de validade de (I);
- (ii) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} > 0$ então a interseção é o domínio de validade de (II).

- **A2:** Para $\alpha_1 < 0$ e $\beta_1 < 0$ temos que

- (i) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} < 0$ então a interseção é o domínio de validade de (II);
- (ii) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} > 0$ então a interseção é o domínio de validade de (I).

Quando a interseção é definida por uma das desigualdades dizemos que ela é **dominante**.

- **Caso B:** $\alpha_1\beta_1 < 0$

Aqui as duas desigualdades tem sinais contrários.

– **B1:** Para $\alpha_1 > 0$ e $\beta_1 < 0$ temos as possibilidades:

- (i) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} < 0$ a interseção é nula;
- (ii) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} > 0$ então a interseção é $-\frac{\alpha_0}{\alpha_1} < \gamma_2 < -\frac{\beta_0}{\beta_1}$.

– **B2:** Para $\alpha_1 < 0$ e $\beta_1 > 0$ temos as possibilidades:

- (i) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} > 0$ a interseção é nula;
- (ii) se $\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} < 0$ então a interseção é $-\frac{\beta_0}{\beta_1} < \gamma_2 < -\frac{\alpha_0}{\alpha_1}$.

Nosso procedimento para determinar qual das possibilidades acima ocorre começa analisando o sinal dos coeficientes α_1 e β_1 para identificar em qual caso, A ou B, a interseção está enquadrada. Por fim, as diferentes possibilidades de cada caso são definidas pelo sinal de

$$F \equiv \frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\beta_0}{\beta_1} = \frac{\alpha_0\beta_1 - \alpha_1\beta_0}{\alpha_1\beta_1}. \quad (\text{D.3})$$

Note que no nosso caso, F é uma função dos parâmetros de controle γ_1/J e J_{AB}/J e do quase-momento k do quadrupletto.

Referências Bibliográficas

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [2] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [3] C. C. Bradley, C. A. Sacket, J. J. Tollett and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
- [4] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [5] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307 (2001).
- [6] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(de) and U. Sen, *Advances in Physics*, **56**,2, 243 (2007)
- [7] I. Bloch, J. Dalibard and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
- [8] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 806 (2000).
- [9] K. W. Madison, F. Chevy, V. Bretin, and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4443 (2001).
- [10] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, W. Ketterle, *Science* **292**, 476 (2001).
- [11] W. K. Hensinger, H. Häffner, A. Browaeys, N. R. Heckenberg, K. Helmerson, C. McKenzie, G. J. Milburn, W. D. Phillips, S. L. Rolston, H. Rubinsztein-Dunlop, and B. Upcroft, *Nature* **412**, 52 (2001).
- [12] M. Greiner, M. O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).

- [13] I. Bloch, Nature **453**, 1016 (2008).
- [14] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998).
- [15] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).
- [16] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit and T. V. Ramakrishnan, Europhys. Lett. **22**, 257 (1993).
- [17] J. K. Freericks and H. Monien, Europhys. Lett. **26**, 545 (1995).
- [18] D. van Oosten, P. van der Straten and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. A **63**, 053601 (2001).
- [19] Gh.-S. Paraoanu, Phys. Rev. A **67**, 023607 (2003).
- [20] A. R. Kolovsky, New J. Phys. **8**, 197 (2006).
- [21] E. Altman, A. Polkovnikov, E. Demler, B. I. Halperin and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **95**, 020402 (2005).
- [22] B. Wu and Q. Niu, Phys. Rev. A **64**, 061603 (2001).
- [23] B. Wu and Q. Niu, New J. Phys. **5**, 104 (2003).
- [24] M. Machholm, C. J. Pethick and H. Smith, Phys. Rev. A **67**, 053613 (2003).
- [25] M. Modugno, C. Tozzo and F. Dalfovo, Phys. Rev. A **70**, 043625 (2004).
- [26] L. Fallani, L. DeSarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **93**, 140406 (2004).
- [27] L. DeSarlo, L. Fallani, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort and M. Inguscio, Phys. Rev. A **72**, 013603 (2005).
- [28] J. Mun, P. Medley, G. K. Campbell, L. G. Marcassa, D. E. Pritchard and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **99**, 150604 (2007).
- [29] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **78**, 586 (1997).
- [30] D. S. Hall, M. R. Matthews, J. R. Ensher, C. E. Wieman and e. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **81**, 1539 (1998).

- [31] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **80**, 2027 (1998).
- [32] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur and W. Ketterle, Nature **396**, 345 (1998).
- [33] D. R. Romano and E. J. V. de Passos, Phys. Rev. A **70**, 043614 (2004).
- [34] Q. Gu, K. Bongs and K. Sengstock, Phys. Rev. A **70**, 063609 (2004).
- [35] G.-H. Cheng and Y.-S. Wu, Phys. Rev. A **67**, 013606 (2003).
- [36] A. Kuklov, N. Prokofév and B. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **92**, 050402 (2004).
- [37] A. Kuklov, N. Prokofév and B. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **92**, 030403 (2004).
- [38] E. Altman, W. Hofstetter, E. Demler and M. D. Lukin, New J. Phys. **5**, 113.1 (2003).
- [39] O. Mandel, M. Greiner, A. Widera, T. Rom, T. W. Hansch, Nature **425**, 6961 (2003).
- [40] D. M. Weld, P. Medley, H. Miyake, D. Hucul, D. E. Pritchard and Wolfgang Ketterle, Phys. Rev. Lett. **103**, 245301 (2009).
- [41] A. Widera, F. Gerbier, S. Fölling, T. Gericke, O. Mandel and I. Bloch, Phys. Rev. Lett. **95**, 190405 (2005).
- [42] J. Catani, L. De Sarlo, G. Barontini, F. Minardi and M. Inguscio, Phys. Rev. A **77**, 011603(R) (2008).
- [43] A. Ramanathan, K. C. Wright, S. R. Muniz, M. Zelan, W. T. Hill III, C. J. Lobb, K. Helmerson, W. D. Phillips and G. K. Campbell, Phys. Rev. Lett. **106**, 130401 (2011).
- [44] L. Amico, A. Osterloh and F. Cataliotti, Phys. Rev. Lett. **95**, 063201 (2005).
- [45] Um livro introdutório sobre a Teoria das Catástrofes é P. T. Saunders, An Introduction to Catastrophe Theory (Cambridge University Press, 1995)
- [46] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni and S. R. Shenoy, Phys. Rev. A **59**, 620 (1999).
- [47] P. Tommasini, E. J. V. de Passos, A. F. R. de Toledo Piza, M. S. Hussein and E. Timmermans, Phys. Rev. A **67**, 023606 (2003).
- [48] E. J. Mueller, Phys. Rev. A **66**, 063603 (2002).

- [49] E. T. D. Matsushita and E. J. V. de Passos, arXiv:0909.0920v1 (2009).
- [50] N. N. Bogoliubov, J. Phys, (USSR), 11:23 (1947).
- [51] M. Rodriguez, S. R. Clark and D. Jaksch, Phys. Rev. A **77**, 043613 (2008).
- [52] M. Maik, P. Buonsante, A. Vezzani and J. Zakrzewski, Phys. Rev. A **84**, 053615 (2011).
- [53] A. F. R. de Toledo Piza, Braz. J. Phys. **35**, 122 (2005).
- [54] M. Greiner, Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials (Dissertação apresentada ao Departamento de Física da Ludwig-Maximilians-Universität München, 2003).
- [55] W. Jones and N. H. March, Theoretical Solid State Physics, Volume 1 (Dover, 1973).
- [56] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976).
- [57] J. P. Blaizot and G. Ripka, Quantum Theory of Finite Systems (Cambridge, MA: MIT Press, 1986).
- [58] D. S. Rokhsar and B. G. Kotliar, Phys. Rev. B **44**, 10328 (1991).