Universidade de São Paulo

Instituto de Física

**Dinâmica Gaussiana de Sistemas Atômicos de
Bose-Einstein Frios**

Fabio Paolini

Tese de doutorado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção do
título de Doutor em Ciências

Comissão Examinadora:

- Prof. Dr. Antônio Fernando Ribeiro de Toledo Piza (Orientador-IFUSP)
- Prof. Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP)
- Prof. Dr. Nicim Zagury (UFRJ)
- Prof. Dr. Paulo Alberto Nussenzveig (IFUSP)
- Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato (IFSC-USP)

São Paulo

2005

Esse trabalho recebeu apoio financeiro da FAPESP.

Resumo

Estudamos as excitações de baixa energia, presentes em um gás de bosons homogêneo, de spin nulo, sujeitos a uma interação de dois corpos repulsiva e a temperatura zero, utilizando a aproximação gaussiana, que consiste num caso particular de aproximação de campo médio. As equações dinâmicas resultantes foram linearizadas ao redor da solução estática de Hartree-Fock-Bogoliubov. Obtivemos uma banda contínua e limitada inferiormente, além de um segundo ramo discreto, que define um limite inferior para as excitações e que, ao contrário do resultado proveniente do tratamento de Hartree-Fock-Bogoliubov, possui um comportamento linear sem gap com respeito ao momento da excitação no limite de grandes comprimentos de onda, ou seja, possui uma equação de dispersão do tipo fônon. Discutimos também a forma através da qual é possível gerar desvios do equilíbrio, vinculados aos estados excitados, e concluímos haver restrições sobre os possíveis desvios das grandezas características em campo médio gaussiano, quando tais desvios são gerados por transformações infinitesimais unitárias de um corpo tomadas até primeira ordem.

Abstract

We study low-lying excitations of a spinless, homogeneous bose gas, with repulsive interaction, at zero temperature, in terms of a gaussian mean field approximation. The dynamical equations of this approximation have been linearized in small displacements from the well known static Hartree-Fock-Bogoliubov solution. We obtain a gapped continuous band of excitations above a discrete branch with phonon behavior at large wavelengths. We also discuss the allowed forms of excitations and conclude that restrictions exist for the allowed deviations of the general set of gaussian mean field parameters, when they are generated in first orders by infinitesimal unitary transformations.

Sumário

1	Introdução	7
2	Descrição do Formalismo	12
2.1	Determinação do estado de menor energia	16
2.2	Matriz densidade reduzida	17
2.3	Dinâmica do sistema.	19
3	Cálculo do estado fundamental	21
3.1	Aproximação de Bogoliubov	25
4	Equações Dinâmicas em aproximação gaussiana.	27
4.1	Linearização ao redor do equilíbrio.	30
4.2	Separação em partes real e imaginária	34
4.3	Reformulação das equações	38
5	Características das equações linearizadas	45
5.1	Descrição formal da solução	45
5.2	Geradores unitários infinitesimais para as distorções	46
5.2.1	Implicações sobre a dinâmica linearizada	51
5.2.2	Interpretação das frequências de oscilação	51
5.3	Modo normal com energia de excitação nula	52
5.3.1	Estrutura da solução	54
5.3.2	Quebra da conservação do número de partículas	55
5.3.3	Operador $\hat{N}$ como gerador de uma transformação unitária	55
6	Resultados Numéricos	57
6.1	Características do potencial efetivo utilizado	57

6.2	Equações de Hartree-Fock-Bogoliubov	58
6.2.1	Procedimentos	58
6.2.2	Resultados	59
6.3	Ramos de excitação	61
6.3.1	Método utilizado	61
6.3.2	Resultados obtidos	61
6.4	Velocidade de som zero	63
7	Conclusão	67
A	Fatoração de valores médios.	70
A.1	Fatoração do valor médio de operadores de dois corpos em médias de operadores de um corpo.	70
A.2	Alguns estados quânticos geradores de médias fatoradas.	72
A.2.1	Matriz densidade gaussiana.	74
B	Condições para a invariância translacional de $\hat{F}_0(t)$.	77
B.1	Ansatz gaussiano em sistemas homogêneos.	77
B.1.1	Distribuição isotrópica no espaço de momentos.	80
C	Relações algébricas envolvendo o operador gaussiano	82
D	Expressão para a velocidade de som zero	84
D.0.2	Correções de primeira ordem	85
D.0.3	Correções de segunda ordem	85

Lista de Figuras

6.1	A curva em negrito representa a energia de Hartree-Fock-Bogoliubov $\mathcal{E}(q)$, a curva lisa a energia de Bogoliubov $\mathcal{E}_B(q)$ e a curva tracejada é o termo cinético puro q^2 correspondente à energia da partícula livre. A energia está descrita em unidades de $\frac{\hbar^2}{2M(8\pi a)^2}$, ao passo que q é descrito em unidades de $(8\pi a)^{-1}$. Sendo que a é o comprimento de espalhamento.	60
6.2	“Depleção efetiva” do sistema: $q^2 n^0(q)$, obtida para $\rho a^3 = \frac{10^{-2}}{(8\pi)^3}$	61
6.3	Os pontos maiores representam o contorno inferior do contínuo. A energia de Bogoliubov é dada pela linha contínua e os pontos menores mostram o ramo discreto de excitação. A energia é descrita em unidades de $\frac{\hbar^2}{2M(8\pi a)^2}$	62
6.4	A curva lisa representa duas vezes a energia de HFB, ao passo que os pontos são os valores obtidos pela rotina numérica (correspondentes à aproximação gaussiana) para o limiar inferior do espectro contínuo.	63
6.5	Plotamos os pontos obtidos para o ramo discreto, sobreposto a um ajuste linear (representado pela curva lisa). A curva tracejada representa a energia obtida em aproximação de Bogoliubov.	64
6.6	Logaritmo da velocidade do som pelo logaritmo da densidade total do sistema. A linha resulta da aproximação de Bogoliubov ao passo que os pontos provêm do cálculo completo em campo médio.	66

Capítulo 1

Introdução

No início do século XX foi possível pela primeira vez liqüefazer o hélio [London], efeito que ocorre a uma temperatura em torno de $T \sim 4.7K$. Porém, somente na década de 30 foram descobertas uma série de características peculiares que ocorrem abaixo de uma temperatura crítica $T_\lambda \sim 2.17K$, que define uma transição de fase do hélio, que vai de uma primeira fase líquida chamada He-I, que se comporta como um fluido usual, para uma segunda fase líquida chamada He-II e que possui algumas propriedades anômalas, como, por exemplo, a ausência de viscosidade e uma forma incomum de propagação de calor, que não obedece a equação de difusão.

Uma das primeiras tentativas de explicar os fenômenos recém descobertos naquela época, a respeito do He-II, veio de uma abordagem fenomenológica proposta por Landau no início da década de 40 [Landau41, Landau47]. Em seu trabalho, Landau concluiu, de hipóteses gerais sobre o comportamento de um líquido quântico, que as excitações elementares de menor energia consistem de um ramo cuja energia tem uma dependência linear com respeito ao momento da excitação, os fônons, e um ramo com gap que foi chamado de rotons. Partindo dessas considerações, ele foi capaz de determinar um critério para o fenômeno da superfluidez e explicar algumas outras propriedades do estado liqüefeito do hélio.

Após essa descrição fenomenológica, surgiram diversos outros tratamentos que procuraram obter um espectro para um gás de bosons a baixa temperatura de uma forma mais rigorosa que aquela sugerida por Landau. Desses tratamentos pode-se destacar três abordagens até certo ponto distintas, correspondendo aos trabalhos do Bogoliubov, Feynman e Yang [Bogoliubov, Feynman, Yang].

Feynman, baseado em argumentações físicas gerais, supôs um ansatz tanto para a função de onda do estado fundamental como para as excitações elementares e então obteve um espectro de energia, que aparece intimamente ligado ao chamado fator de

estrutura estático do líquido, que pode ser determinado através de experiências de espalhamento [Pines99].

Nos trabalhos de Yang o enfoque é voltado para as correções da energia do estado fundamental e de seus primeiros estados excitados, que resultam do potencial repulsivo de curto o alcance entre as partículas. Nesse trabalho são discutidas as dificuldades encontradas ao se tentar resolver um problema de muitos corpos, que envolve um potencial de interação de dois corpos de curto alcance e fortemente repulsivo, usando um tratamento perturbativo que tem como estados de base (não perturbados) ondas planas. Para contornar esse problema é introduzido um pseudo-potencial que fornece correções perturbativas para o espectro de energia em termos de potências de (ρa^3) onde ρ é a densidade do gás e a o comprimento de espalhamento do potencial de interação.

O tratamento de Bogoliubov é baseado na hipótese de que se está tratando com um gás diluído composto por um grande número de partículas e em temperatura zero. Então são aplicadas determinadas simplificações na hamiltoniana (descrita no espaço de Fock) que consistem, de maneira geral, em desprezar as interações entre partículas excitadas e não impor um estado com número de partículas bem definido. Com isso é possível aproximar a hamiltoniana do sistema por um operador de um corpo, proporcionando um tratamento analítico bastante simples. Deste procedimento se obtém um espectro de comportamento linear com respeito ao momento da excitação, no limite em que o valor do momento torna-se suficientemente pequeno se comparado a uma determinada grandeza proporcional a velocidade do som do sistema. Portanto o método de Bogoliubov fornece os fônons sugeridos anteriormente por Landau.

Do trabalho realizado por Bogoliubov, seguem algumas generalizações que procuraram estender sua região de validade a sistemas de temperatura finita e com densidades mais elevadas. De modo geral, se utiliza um ansatz para o estado fundamental, baseado no modelo de Bogoliubov e então os parâmetros livres são variacionalmente determinados de modo a fornecer um mínimo para a energia do sistema. Através de uma metodologia como essa é possível levar em consideração um número maior de termos da hamiltoniana. Dentre os trabalhos mais antigos a esse respeito, podemos citar [Girardeau, Kobe, Valatin58]. Alguns desses trabalhos apresentam problemas no espectro das excitações elementares, mais precisamente, o espectro apresenta um indesejável gap de energia para grandes comprimentos de onda, que é um resultado contrário não apenas às suposições originais feitas por Landau, no que diz respeito aos fônons, mas também à outros trabalhos, tal como [Pines59], onde o espectro de excitação é obtido através do desenvolvimento da função de Green do sistema. Em alguns casos, para viabilizar os procedimentos variacionais, no contexto

da aproximação de Bogoliubov, passou-se a eliminar das soluções o termo responsável pelo gap (que corresponde à densidade anômala ou densidade de emparelhamento), como podemos ver em trabalhos mais recentes tal como [Giorgini], esse procedimento em geral leva o nome de aproximação de Popov. Há também, generalizações do método de Bogoliubov, que apesar de levar em conta todos os termos presentes em aproximação de campo médio, fornecem um espectro sem gap de energia. Um desses trabalhos utiliza um tratamento com funções de Green [Griffin] e apresenta uma discussão sobre os limites de validade de algumas das aproximações usualmente encontradas na literatura. Há ainda um tratamento variacional apresentado por Kerman [Kerman97, Kerman97b], onde um funcional gaussiano faz o papel do ansatz para o estado do sistema, nesses trabalhos se obtém uma equação de dispersão sem gap. Uma diferença dos trabalhos do Kerman quando comparados aos anteriores, consiste em que as excitações são agora produzidas por pares de partículas (ou quasi-partículas) cujo momento total representa o momento da excitação ao passo que nos tratamentos anteriores procurava-se construir os estados excitados simplesmente aplicando um único operador de criação de quasi-partícula sobre o ansatz do estado fundamental.

As possibilidades experimentais de se estudar um gás de bosons, em temperaturas baixas, foram ampliadas com o uso, relativamente recente, de sistemas de armadilhamento magneto-ópticos. O primeiro trabalho onde se conseguiu esfriar um gás de bosons até se obter o chamado condensado de Bose-Einstein, foi realizado pelo grupo do JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics) [Anderson 95], onde o átomo em questão era o rubídio 87. A partir desta época o empenho do lado teórico ganhou novo impulso. Foram feitos, desde então, diversos estudos a respeito das propriedades de um gás de Bose confinado e em baixa temperatura, tais como, a temperatura de transição para a fase condensada, a fração condensada em função da temperatura, calor específico, estabilidade do estado fundamental (principalmente em sistemas com comprimento de espalhamento negativo) entre outras coisas. Um assunto de especial interesse, para o trabalho desenvolvido aqui, é o estudo da velocidade de propagação de pulsos de densidade no condensado. Existem duas escalas de particular importância para caracterizar a propagação de um pulso em gases armadilhados, a escala de tamanho do próprio gás armadilhado, que designaremos x_0 , e um comprimento característico $\xi = (8\pi \rho_0 a)^{-\frac{1}{2}}$ chamado comprimento de cicatrizaço, ou “healing length”, onde ρ_0 é a densidade da fração de partículas com momento nulo, e a , é o comprimento de espalhamento do sistema. Para a dimensão

da excitação λ_{ex} maior que ξ e menor que a dimensão da armadilha

$$\xi < \lambda_{ex} < x_0,$$

o espectro de energia é linear com respeito ao momento da excitação, conseqüentemente, um pulso de densidade dessas dimensões se propaga sem dispersão com a velocidade de Bogoliubov. Para $\lambda_{ex} \ll \xi$ (grandes momentos), o espectro retoma o aspecto cinético de partícula livre e, por fim, se as distorções atingem proporções da ordem do condensado $\lambda_{ex} \sim x_0$, há o surgimento de ondas estacionárias, com espectro de energia discreto, correspondendo a oscilações harmônicas [Ketterle99]. Alguns resultados experimentais sobre a velocidade do som em condensados de Bose-Einstein, podem ser vistos em [Ketterle97, Ketterle98], onde é mostrada a dependência da velocidade do som com a densidade do condensado e os resultados experimentais são comparados com a solução de Bogoliubov, onde a velocidade do som é proporcional à raiz quadrada da densidade. Há ainda outros trabalhos que procuraram fazer medidas da distribuição das excitações de quasi-partículas [Ketterle99b, Brunello].

Em nosso trabalho, nos dedicamos ao estudo das excitações elementares de um gás homogêneo de bósons de spin nulo. Lembramos que os resultados de um sistema homogêneo podem ser aplicados a sistemas realistas de gases armadilhados nos casos em que o potencial de confinamento permanece aproximadamente constante dentro das dimensões dos pulso de densidade vinculados às excitações. Utilizamos o método variacional de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), que generaliza o método de Bogoliubov, para obtermos uma aproximação autoconsistente para o estado fundamental do sistema. Em seguida, construímos as equações dinâmicas em aproximação de campo médio gaussiano e as linearizamos em torno da solução variacional. Tal procedimento nos leva a uma equação de autovalores que fornece o espectro de excitação do sistema e os correspondentes autovetores, num limite de baixas energias.

No próximo capítulo apresentamos um rápido resumo do formalismo teórico utilizado no trabalho. No capítulo 3 calculamos a solução estática de HFB. No capítulo 4 apresentamos as equações dinâmicas, que são derivadas da equação de Liouville-von Neumann para o operador densidade e do uso de regras de fatoraçoão de valores médios, que caracterizam a aproximação de campo médio gaussiana, que decorre de uma restrição sobre a dinâmica que pode ser implementada pelo uso de projetores. Em seguida, aplicamos distorções ao estado de equilíbrio, retendo os termos lineares, conseqüentemente obtemos uma típica equação de autovalores, sobre a qual aplicamos algumas transformações que serviram para desacoplar termos da equação. Após algumas suposições sobre a forma que deve ser atribuída às distorções, motivadas pela própria estrutura das equações, pudemos desprezar antecipadamente algumas

soluções. As equações restantes foram tratadas numericamente no capítulo 6 e fornecem um espectro discreto do tipo fônon, que define o ramo de menor energia para as excitações do sistema, somado a este ramo temos um espectro contínuo, cujo limiar inferior se mantém acima do ramo discreto para grandes comprimentos de onda.

Capítulo 2

Descrição do Formalismo

O problema de descrever o comportamento de sistemas de muitas partículas envolve sempre a aplicação de métodos aproximativos, que em geral se dividem em duas abordagens, as perturbativas e as variacionais. No primeiro caso é uma consequência da própria metodologia que a aproximação de ordem zero seja determinada pela solução exata de um termo particular da hamiltoniana (que em geral é um operador de um corpo) cuja solução é conhecida. Nos métodos variacionais, a estrutura da hamiltoniana também exerce forte influência sobre a escolha do ansatz adotado e, em muitos casos, se o termo perturbativo é desprezado, o ansatz variacional corresponde à solução de ordem zero na teoria perturbativa. Os tratamentos variacionais voltados a sistemas de muitos bósons utilizam da mesma forma, como ponto de partida, soluções conhecidas da componente de um corpo da hamiltoniana. No entanto no caso de gases interagentes, com um forte potencial repulsivo a curtas distâncias, é necessário levarmos em conta as correlações de curto alcance na função de onda, que vai a zero na medida em que a distância entre dois átomos se aproxima do tamanho dos mesmos. É dentro desse contexto que se introduz um potencial efetivo, que a baixas energias é parametrizado pelo comprimento de espalhamento do átomo em questão e que fornece as correções adequadas à energia do sistema, uma vez que contorna a “falha” da função de onda do tipo produto, com respeito a essas correlações. Um dos primeiros trabalhos voltados aos detalhes desses aspectos da teoria de muitos corpos foi publicado por Yang et al. [Yang], onde é utilizado o chamado pseudo-potencial de interação, que consiste numa ferramenta útil para produzir as condições de contorno adequadas nos casos em que as distâncias interatômicas são maiores do que a dimensão do átomo em questão.

Em nosso trabalho determinamos através do ansatz gaussiano ou aproximação de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), cujos detalhes iremos apresentar adiante, o estado

fundamental de um gás homogêneo de bosons sem spin. O método aplicado aqui equivale ao feito em [Tommasini95, Tommasini97].

Um sistema constituído por um gás de bosons, de spin zero, confinados em uma caixa de volume V e que interagem através de um potencial efetivo de dois corpos $U(r)$, dependente do módulo da distância entre as partículas, é adequadamente representado por um operador hamiltoniano $\hat{H}$ que descrevemos em segunda quantização [Landau 58], utilizando como estados base as autofunções do momento. Reescalamos a hamiltoniana pelo fator $\frac{2M}{\hbar^2}$, sendo M a massa da partícula e $\hbar$ a constante de Planck dividida por 2π , como resultado temos

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} k^2 \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}} v(k) \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{k}}, \quad (2.1)$$

onde $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$ e $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ são os operadores de criação e aniquilação de bosons associados ao estado de momento $\mathbf{k}$, descrito, na representação das configurações, pela onda plana

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}}.$$

No espaço de momentos o termo de interação de 2 corpos é dado por

$$v(k) = \frac{2M}{\hbar^2} \int U(r) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3r, \quad (2.2)$$

que é a transformada de Fourier do potencial de interação efetivo $U(r)$ representado no espaço de configurações e que, em se tratando de um sistema a baixas energias, é adequadamente parametrizado pelo comprimento de espalhamento característico do sistema.

Em um gás suficientemente diluído em que o alcance da interação é pequeno quando comparado à distância média entre as partículas, podemos tratar os efeitos do potencial de interação como sendo correções à aproximação de partícula independente. Uma grandeza adimensional importante para caracterizar o sistema como fracamente interagente é o produto da densidade do sistema ρ pela terceira potência do comprimento de espalhamento a

$$\rho a^3 \ll 1.$$

Nessas condições podemos assumir, como uma primeira aproximação para o estado fundamental, que todas as partículas se encontram no estado de momento nulo. Num segundo momento, supondo que o efeito da interação de dois corpos seja o de levar apenas uma pequena fração das partículas a estados excitados e conseqüentemente

tais excitações sofram apenas o efeito da interação com o condensado (que no caso homogêneo corresponde às partículas de momento nulo) e não entre elas, retemos somente os termos da interação que sejam lineares ou quadráticos no número de partículas do condensado N_0 , desprezando os termos de menor ordem. Para essa aproximação é também suposto que o número de partículas do sistema N seja grande quando comparado à unidade

$$N \gg 1$$

Esse método pode ser implementado de modo sistemático se abrirmos mão de estados com número de partículas bem definido, como foi feito por [Bogoliubov], e substituímos os operadores de criação e aniquilação de bosons com momento nulo por um número $\sqrt{N_0}$, que corresponde a raiz quadrada do valor médio do número de partículas presentes no estado condensado

$$\hat{a}_{\mathbf{k}=0} = \hat{a}_{\mathbf{k}=0}^\dagger = \sqrt{N_0}.$$

Aplicando essa transformação e posteriormente desprezando os termos de ordem menor que N_0 no potencial de interação reduzimos a hamiltoniana à forma quadrática, que naturalmente possui solução analítica. Esse procedimento nos fornece expressões tanto para a energia do estado fundamental como para o espectro de excitações elementares.

Como mostraremos a seguir, o método de Bogoliubov pode ser generalizado a um tratamento variacional, que leva o nome de aproximação de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) e que inclui alguns elementos adicionais da hamiltoniana [Tommasini95, Tommasini97], correspondentes às chamadas interações de quasi-partícula. A respeito desse método é razoável supor que, em princípio, seus resultados são mais próximos dos valores exatos, mesmo quando o número de parâmetros livres que definem o ansatz são os mesmos.

Na próxima secção apresentaremos uma outra generalização desse tratamento, porém voltada aos efeitos dinâmicos. Mostraremos as linhas gerais de um método baseado em aproximação de campo médio gaussiano que fornece uma dinâmica efetiva para sistemas de muitos corpos [Blaizot, Yong 91], que é descrita em termos de um conjunto de equações não lineares. Posteriormente, através do processo de linearização dessas equações, obtemos o espectro de excitação do sistema, cuja aproximação para o estado fundamental é extraída do tratamento variacional estático.

Iniciamos o desenvolvimento formal da aproximação de HFB definindo novos operadores $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ que são deslocados dos operadores originais $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ por um número complexo $\Gamma_{\mathbf{k}}$

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}} - \Gamma_{\mathbf{k}}. \quad (2.3)$$

A hamiltoniana quando descrita em termos desses operadores toma a forma

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1 + \hat{H}^2 + \hat{H}^3 + \hat{H}^4 \quad (2.4)$$

onde $\hat{H}^n$ são os termos da hamiltoniana que contêm n operadores dentre os tipos $\hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger$ ou $\hat{b}_{\mathbf{q}}$. Utilizando a hamiltoniana de um sistema homogêneo, expressa em 2.1, obtemos

$$\hat{H}^0 = \sum_{\mathbf{k}} k^2 |\Gamma_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} v(q) \Gamma_{\mathbf{k}_1}^* \Gamma_{\mathbf{k}_2}^* \Gamma_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \Gamma_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}^1 = & \sum_{\mathbf{k}} k^2 \left(\Gamma_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}} + \Gamma_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \right) + \\ & + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} v(q) \left\{ \Gamma_{\mathbf{k}_1}^* \Gamma_{\mathbf{k}_2}^* \Gamma_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} + \Gamma_{\mathbf{k}_1} \Gamma_{\mathbf{k}_2} \Gamma_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger \right\} \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 = & \sum_{\mathbf{k}} k^2 \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} v(q) \left\{ 2\Gamma_{\mathbf{k}_2}^* \Gamma_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} + \right. \\ & \left. + 2\Gamma_{\mathbf{k}_2}^* \Gamma_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} + \Gamma_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^* \Gamma_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^* \hat{b}_{\mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_2} + \Gamma_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \Gamma_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \right\} \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\hat{H}^3 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} v(q) \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \Gamma_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_2} \Gamma_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^* \right\} \quad (2.8)$$

$$\hat{H}^4 = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} v(q) \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \quad (2.9)$$

Em seguida definimos uma transformação genérica para operadores de quasi-partícula $\hat{\eta}_\mu$

$$\hat{b}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mu} (U_{\mathbf{q}\mu} \hat{\eta}_\mu - V_{\mathbf{q}\mu}^* \hat{\eta}_\mu^\dagger) \quad (2.10)$$

onde, conforme mostrado em [Yong 91], as matrizes $U_{\mathbf{q}\mu}$ e $V_{\mathbf{q}\mu}$ são sujeitas às restrições

$$UU^\dagger - V^*V^T = I, \quad (2.11)$$

$$V^*U^T - UV^\dagger = 0, \quad (2.12)$$

em decorrência das seguintes relações canônicas de comutação entre os operadores de quasi-partícula

$$[\hat{\eta}_\mu, \hat{\eta}_\nu^\dagger] = \delta_{\nu\mu},$$

$$[\hat{\eta}_\mu, \hat{\eta}_\nu] = 0. \quad (2.13)$$

Resulta ainda, como consequência das equações 2.11 e 2.12, as expressões

$$U^\dagger U - V^\dagger V = I, \quad (2.14)$$

$$V^T U - U^T V = 0, \quad (2.15)$$

de onde pode-se mostrar a seguinte relação de completeza

$$\hat{\eta}_\mu = \sum_{\mathbf{k}} \left(U_{\mathbf{k}\mu}^* \hat{b}_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}\mu}^* \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \right). \quad (2.16)$$

Voltando para a aproximação de Bogoliubov, temos que seu estado fundamental corresponde a fixar

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}} &= 0 & k &\neq 0 \\ \hat{H}^3 &= \hat{H}^4 = 0 \end{aligned}$$

2.1 Determinação do estado de menor energia

Para o estado fundamental do sistema é escolhido o vácuo do operador de quasi-partícula $|0\rangle$, que é definido pela equação

$$\hat{\eta}_j |0\rangle = 0, \quad \text{para todo } j$$

Essa metodologia equivale a supor que os termos mais relevantes na determinação do estado fundamental, e sua correspondente energia, resultam dos estados coerentes $\Gamma_{\mathbf{k}}$ e que, portanto, os operadores $\hat{H}^3$ e $\hat{H}^4$ podem, numa primeira aproximação, ser descartados, dando origem a uma hamiltoniana aproximada, quadrática nos operadores $b_{\mathbf{k}}$ e $b_{\mathbf{k}}^\dagger$, na forma

$$\hat{H}_{approx} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1 + \hat{H}^2 \quad (2.17)$$

Uma hamiltoniana como essa pode ser diagonalizada pelos operadores de quasi-partículas 2.16 e, conseqüentemente, ser reescrita como

$$\hat{H}_{approx} = E_{approx}^0 + \sum_j \epsilon(j) \hat{\eta}_j^\dagger \hat{\eta}_j \quad (2.18)$$

Nos casos em que $\epsilon(j) > 0$ (para todo j) o estado fundamental de $\hat{H}_{approx}$ corresponde ao vácuo dos operadores $\hat{\eta}_j$ e a correspondente energia do estado fundamental é E_{approx}^0 . Temos ainda, nessa aproximação, que $\epsilon(j)$ corresponde a energia de excitação do autoestado $\hat{\eta}_j^\dagger |0\rangle$.

Assim, num tratamento mais genérico, tomamos o valor médio da hamiltoniana completa 2.1 e a consideramos como a energia do estado fundamental

$$E_0 = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle.$$

Os parâmetros livres da transformação de quasi-partículas são, por fim, estabelecidos variacionalmente de modo a fornecer um mínimo para o valor da energia. No entanto, como o ansatz adotado é composto por uma combinação de estados com diferentes valores para o número de partículas, é necessário, durante o cálculo variacional, restringirmos a região de variação dos parâmetros de modo que o valor médio do operador número de partículas

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (2.19)$$

seja preservado.

2.2 Matriz densidade reduzida

A dinâmica do sistema tratada em aproximação de campo médio gaussiano é univocamente caracterizada pelos valores esperados de operadores de um corpo e pelos deslocamentos coerentes, ou seja, as médias dos operadores de criação e aniquilação de partículas. Portanto se o sistema em sua descrição exata é caracterizado pela matriz densidade $\hat{F}(t)$ então as quantidades a serem consideradas em aproximação de campo médio, quando descrita na representação de momentos são

$$\Gamma(\mathbf{q}, t) = \text{Tr}\{\hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{F}(t)\}, \quad (2.20)$$

$$e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) = \text{Tr}\{\hat{b}_{\mathbf{l}} \hat{b}_{\mathbf{m}} \hat{F}(t)\}, \quad (2.21)$$

$$n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) = \text{Tr}\{\hat{b}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{m}} \hat{F}(t)\}, \quad (2.22)$$

sendo que os operadores $\hat{b}_{\mathbf{q}}$ foram definidos em 2.3.

Assumimos que, sejam quais forem os valores das grandezas $e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ e $n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$, há sempre uma transformação para operadores de quasi-partículas $\hat{\eta}_\mu$, definidos em 2.10, cujas médias tomam a forma diagonal

$$\begin{aligned} \langle \hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\nu \rangle &= \text{Tr}\{\hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\nu \hat{F}(t)\} = \nu_\mu \delta_{\mu\nu}, \\ \langle \hat{\eta}_\mu \hat{\eta}_\nu \rangle &= \text{Tr}\{\hat{\eta}_\mu \hat{\eta}_\nu \hat{F}(t)\} = 0, \end{aligned} \quad (2.23)$$

sendo que os valores ν_μ , que são por construção sempre positivos, caracterizam o número de ocupação dos orbitais associados ao operador $\hat{\eta}_\mu$

$$|\eta_\mu\rangle \equiv \hat{\eta}_\mu^\dagger |0\rangle,$$

sendo $|0\rangle$ o estado de vácuo das quasi-partículas. As duas equações definidas em 2.23 equivalem a uma equação de autovalores, que pode ser descrita de forma esquemática através de uma equação matricial

$$RX = GXN \quad (2.24)$$

com

$$X = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

$$N = \begin{pmatrix} \nu & 0 \\ 0 & I + \nu \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

$$R = \begin{pmatrix} n & e \\ e^* & n^* + 1 \end{pmatrix} = R^\dagger,$$

onde I é a matriz identidade, U e V são as matrizes de transformação usadas em 2.10, ν é a matriz diagonal construída com os números de ocupação e n e m são matrizes definidas como

$$[n]_{\mathbf{l}\mathbf{m}}(t) = n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t),$$

$$[e]_{\mathbf{l}\mathbf{m}}(t) = e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t),$$

onde por simplicidade omitimos o índice temporal. Da equação 2.24 notamos que as colunas da matriz X correspondem a autovetores da matriz GR . Dentro dessa abordagem as equações 2.11, 2.12, 2.14 e 2.15 podem ser reescritas como

$$\begin{aligned} XGX^\dagger &= G \\ X^\dagger GX &= G \end{aligned} \quad (2.26)$$

Do resumo apresentado acima podemos concluir que dentro dos limites da aproximação de campo médio gaussiano o sistema é completamente definido pelas matrizes de rotação $U_{\mathbf{k}\mu}(t)$ e $V_{\mathbf{k}\mu}(t)$, pelos autovalores $\nu_\mu(t)$ e pelos coeficientes do deslocamento coerente $\Gamma(\mathbf{q}, t)$. Em aproximação de campo médio, a matriz densidade é adequadamente descrita pelo operador gaussiano

$$\hat{F}_0(t) = \prod_\mu \frac{1}{1 + \nu_\mu} \left(\frac{\nu_\mu}{1 + \nu_\mu} \right)^{\hat{\eta}_\mu^\dagger(t) \hat{\eta}_\mu(t)} \quad (2.27)$$

onde a dependência temporal dos operadores de quasi-partículas não resulta da aplicação do operador de evolução temporal unitário

$$\hat{\mathcal{U}}(t - t') = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')} \quad (2.28)$$

sobre $\hat{\eta}_\mu^\dagger$ e $\hat{\eta}_\mu$, mas provém dos parâmetros da transformação, como pode ser visualizado pela expressão abaixo

$$\hat{\eta}_\mu(t) = \sum_{\mathbf{k}} \left(U_{\mathbf{k}\mu}^*(t) (\hat{a}_{\mathbf{k}} - \Gamma(\mathbf{k}, t)) + V_{\mathbf{k}\mu}^*(t) (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger - \Gamma^*(\mathbf{k}, t)) \right). \quad (2.29)$$

sendo $\Gamma(\mathbf{k}, t)$, $U_{\mathbf{k}\mu}(t)$ e $V_{\mathbf{k}\mu}(t)$ as versões dependentes do tempo dos parâmetros $\Gamma_{\mathbf{k}}$, $U_{\mathbf{k}\mu}$ e $V_{\mathbf{k}\mu}$ definidos anteriormente em 2.3 e 2.10. A dinâmica exata desses parâmetros é definida pela equação de autovalores 2.24, que por sua vez depende da dinâmica exata do sistema. Discutiremos brevemente na próxima seção sobre uma maneira de se obter essas equações e as apresentamos do modo em que são obtidas em [Yong 91].

2.3 Dinâmica do sistema.

A dinâmica de uma matriz densidade que não comuta com o operador número de partícula é fornecida por uma generalização da equação de Liouville-von Neumann

$$\frac{\partial \hat{F}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{K}, \hat{F}(t)] \quad (2.30)$$

onde

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad (2.31)$$

e μ representa o potencial químico do sistema. Portanto, dado um operador qualquer $\hat{A}$, a evolução temporal de seu valor médio é determinada por

$$\frac{\partial \langle \hat{A} \rangle(t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \text{Tr} \left\{ \hat{A} \hat{F}(t) \right\} = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \hat{A} [\hat{K}, \hat{F}(t)] \right\} = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \hat{F}(t) [\hat{A}, \hat{K}] \right\}, \quad (2.32)$$

na última igualdade foi utilizada a propriedade transitiva do traço. Dessa expressão obtemos, por exemplo, a derivada temporal dos deslocamentos $\Gamma(\mathbf{k}, t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Gamma(\mathbf{k}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \text{Tr} \left\{ a_{\mathbf{k}} \hat{F}(t) \right\} = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ [\hat{K}, a_{\mathbf{k}}] \hat{F}(t) \right\} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ [\hat{K}, b_{\mathbf{k}}] \hat{F}(t) \right\} = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} U_{\mathbf{k}\mu} \text{Tr} \left\{ [\hat{K}, \hat{\eta}_\mu] \hat{F}(t) \right\} - \\ &- \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} V_{\mathbf{k}\mu}^* \text{Tr} \left\{ [\hat{K}, \hat{\eta}_\mu^\dagger] \hat{F}(t) \right\} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Por outro lado, a dinâmica das matrizes $U_{\mathbf{k}\mu}(t)$ e $V_{\mathbf{k}\mu}(t)$ e dos números de ocupação do operador gaussiano $\nu_\mu(t)$ pode ser obtida derivando a equação 2.24 com relação ao tempo. Após algumas manipulações, mostradas em [Yong 92, Yong 91], obtemos

$$i\dot{\nu}_\mu(t) = \text{Tr} \left\{ \left[\eta_\mu^\dagger \eta_\mu, \hat{K} \right] \hat{F}(t) \right\} \quad (2.34)$$

além de equações envolvendo as derivadas das matrizes $U_{\mathbf{q}\mu}(t)$ e $V_{\mathbf{q}\mu}(t)$

$$i(1 + \nu_\mu(t) + \nu_\gamma(t)) \left(V^\dagger(t) \dot{U}^*(t) - U^\dagger(t) \dot{V}^*(t) \right)_{\mu\gamma} = \text{Tr} \left\{ \left[\hat{\eta}_\gamma \hat{\eta}_\mu, \hat{K} \right] \hat{F}(t) \right\} \quad (2.35)$$

e

$$\begin{aligned} i(\nu_\mu(t) - \nu_\gamma(t)) \left(U^\dagger(t) \dot{U}(t) - V^\dagger(t) \dot{V}(t) \right)_{\gamma\mu} = \\ = \text{Tr} \left\{ \left[\hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\gamma, \hat{K} \right] \hat{F}(t) \right\}, \quad (\mu \neq \gamma) \end{aligned} \quad (2.36)$$

As equações 2.33, 2.34, 2.35 e 2.36 fornecem a dinâmica dos elementos envolvidos na construção dos operadores de quasi-partículas em função da dinâmica exata da matriz densidade $\hat{F}(t)$ e portanto não caracterizam uma dinâmica fechada, uma vez que a dinâmica da matriz $\hat{F}(t)$, em função da interação entre partículas, não pode ser definida somente em termos de médias de operadores de um corpo. A fim de estabelecermos uma dinâmica efetiva em campo médio, substituímos a matriz densidade exata $\hat{F}(t)$ pelo operador gaussiano $\hat{F}_0(t)$ nas equações 2.33, 2.34, 2.35 e 2.36. Como resultado se obtém equações não lineares estabelecendo a dinâmica efetiva.

Capítulo 3

Cálculo do estado fundamental

Para obtermos a aproximação do estado fundamental restringimos o operador $\hat{F}_0$ de modo que o comutador com o operador momento total [Tommasini95, Tommasini97]

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}$$

seja nulo e que o estado resultante seja isotrópico. Sob essas condições a transformação¹ mais geral possível é

$$\hat{\eta}_{\mathbf{k}} = \cosh(\sigma_k) \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sinh(\sigma_k) \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger - \delta_{0\mathbf{k}} \Gamma_0, \quad (3.1)$$

onde σ_k é um parâmetro a ser obtido variacionalmente como função do módulo do momento k . Dessa expressão obtemos uma forma parametrizada para a depleção $n^0(k)$, o emparelhamento $e^0(k)$ e o deslocamento coerente Γ_0

$$n^0(k) = \text{Tr} \left\{ \hat{F}_0 \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \right\} = \frac{1}{2} \cosh(2\sigma_k) (2\nu_k + 1) - \frac{1}{2}, \quad (3.2)$$

$$e^0(k) = \text{Tr} \left\{ \hat{F}_0 \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \right\} = -\frac{1}{2} \sinh(2\sigma_k) (2\nu_k + 1), \quad (3.3)$$

$$\Gamma_0 = \text{Tr} \left\{ \hat{F}_0 \hat{a}_{\mathbf{k}=0} \right\}, \quad (3.4)$$

onde ν_k é o valor médio do número de quasi-partículas de índice $\mathbf{k}$

$$\nu_k = \text{Tr} \left\{ \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\eta}_{\mathbf{k}} \hat{F}_0 \right\} \quad (3.5)$$

¹No apêndice B discutimos quais são as condições necessárias para que o operador gaussiano comute com o momento total

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{F}_0] = 0.$$

e

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}} - \delta_{0\mathbf{k}}\Gamma_0. \quad (3.6)$$

As grandezas $n^0(k)$, $e^0(k)$ e Γ_0 correspondem ao caso estático das já definidas em (2.20-2.22), aqui a depleção e o emparelhamento tomam a forma diagonal e o deslocamento coerente é diferente de zero somente no caso de momento nulo.

Em breve nos serão úteis as derivadas parciais das grandezas acima com respeito as variáveis σ_k e ν_k , as quais apresentamos abaixo

$$\frac{\partial n^0(k)}{\partial \sigma_k} = -2e^0(k), \quad \frac{\partial e^0(k)}{\partial \sigma_k} = -2n^0(k) - 1 \quad (3.7)$$

e

$$\frac{\partial n^0(k)}{\partial \nu_k} = \cosh(2\sigma_k), \quad \frac{\partial e^0(k)}{\partial \nu_k} = -\sinh(2\sigma_k) \quad (3.8)$$

Os valores da energia $U(T, N, V)$ e entropia $S(T, N, V)$ do sistema, assim como o valor de qualquer outra função termodinâmica, resultam (nessa aproximação) de construções envolvendo o operador gaussiano, por exemplo

$$U(T, N, V) = \text{Tr} \left\{ \hat{H} \hat{F}_0 \right\} \quad (3.9)$$

e

$$S(T, N, V) = -\kappa_b \text{Tr} \left\{ \hat{F}_0 \ln \hat{F}_0 \right\}, \quad (3.10)$$

onde T é a temperatura do sistema, V o volume e κ_b é a constante de Boltzmann. Os valores dos parâmetros livres de $\hat{F}_0$, ou seja σ_k e ν_k , são escolhidos de modo a fornecerem um mínimo da Energia Livre de Helmholtz do sistema, representada por

$$F(T, N, V) = U(T, N, V) - TS(T, N, V)$$

Como já dissemos anteriormente, a região de variação dos parâmetros, durante o processo de busca do valor mínimo de energia, deve se restringir a regiões onde o valor médio do número de partículas

$$N = \text{Tr} \left\{ \hat{F}_0 \hat{N} \right\} = \Gamma_0^2 + \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{(1 + 2\nu_q) \cosh(2\sigma_q) - 1}{2} \right] \quad (3.11)$$

seja fixo.

Um procedimento como esse nos fornece um limite superior para a Energia Livre de Helmholtz. Há dois métodos bastante usuais e equivalentes de efetuarmos o cálculo variacional responsável pela determinação do estado de equilíbrio. Um deles consiste em utilizar a equação acima para eliminar um dos parâmetros da expressão encontrada para a Energia Livre de Helmholtz e posteriormente buscar o extremo

dentro das variáveis remanescentes, esse será o método aqui empregado e, em particular, eliminaremos Γ_0 da expressão relativa a $F(T, N, V)$. O segundo método faz uso de um multiplicador de Lagrange e consiste em buscar o extremo do Potencial Termodinâmico $\Xi(T, \mu, V)$, descrito por

$$\begin{aligned}\Xi(T, \mu, V) &= F(T, N, V) - \mu N(T, \mu, V) = \\ &= U(T, N, V) - TS(T, N, V) - \mu N(T, \mu, V)\end{aligned}\quad (3.12)$$

Nesse caso o multiplicador de Lagrange μ é identificado como sendo o potencial químico do sistema, que por sua vez é definido em termodinâmica como

$$\mu(T, V, N) = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T, V} \quad (3.13)$$

ou

$$\mu(S, V, N) = \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S, V}.$$

A expressão para a Energia Livre de Helmholtz $F(T, N, V)$, fornecida por $\hat{F}_0$, segue abaixo, para a qual utilizamos 3.9, 3.10, a expressão para a hamiltoniana (2.1) e eliminamos Γ_0 por meio de 3.11

$$\begin{aligned}F(T, N, V) &= v(0) \frac{V}{2} \rho^2 + \sum_{\mathbf{k}} k^2 n^0(k) + \\ &+ \left(\rho - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} n^0(k) \right) \sum_{\mathbf{k}} v(k) (n^0(k) + e^0(k)) + \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} v(k_1) (n^0(k_2) n^0(|\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1|) + e^0(k_2) e^0(|\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1|)) - \\ &- T k_b \sum_{\mathbf{k}} \left(\ln(1 + \nu_k) + \nu_k \ln \left(\frac{1 + \nu_k}{\nu_k} \right) \right),\end{aligned}\quad (3.14)$$

onde

$$\rho = \frac{N}{V}$$

é a densidade do sistema.

A imposição de que a derivada de $F(T, N, V)$ com respeito a σ_k seja nula nos fornece uma equação integral não linear envolvendo os parâmetros σ_k e ν_k

$$\tanh(2\sigma_k) = \frac{\rho_0 v(k) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} v(q) e^0(|\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{k^2 + \rho_0 v(k) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} v(q) (e^0(q) - n^0(|\mathbf{k} + \mathbf{q}|) + n^0(q))} \quad (3.15)$$

sendo ρ_0 a densidade de partículas dentro do estado condensado

$$\rho_0 = \frac{\Gamma_0^2}{V} = \rho - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} n^0(q). \quad (3.16)$$

A equação 3.15 pode ser reescrita numa forma parametrizada

$$\mathcal{E}(k) \sinh(2\sigma_k) = \Delta(k) \quad \mathcal{E}(k) \cosh(2\sigma_k) = \Lambda(k) \quad (3.17)$$

com

$$\Delta(k) = \rho_0 v(k) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} v(k') e^0(|\mathbf{k} + \mathbf{k}'|), \quad (3.18)$$

$$\Lambda(k) = k^2 + \rho_0 v(k) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} v(k') (e^0(k') - n^0(|\mathbf{k} + \mathbf{k}'|) + n^0(k')) \quad (3.19)$$

e

$$\mathcal{E}(k) = \sqrt{\Lambda^2(k) - \Delta^2(k)}, \quad (3.20)$$

sendo que $\mathcal{E}(k)$ será posteriormente reconhecida como as energias de excitação do sistema dentro da aproximação de HFB.

A derivada de $F(T, N, V)$ com respeito a ν_k fornece

$$\frac{\partial F}{\partial \nu_k} = \mathcal{E}(k) - k_b T \ln \left(\frac{1 + \nu_k}{\nu_k} \right)$$

conseqüentemente no estado de equilíbrio vale a relação

$$\nu_k = \frac{1}{\exp(\beta \mathcal{E}(k)) - 1} \quad (3.21)$$

onde

$$\beta = \frac{1}{k_b T},$$

a equação 3.21 corresponde a uma distribuição estatística de Bose para o caso em que as energias dos estados de índice k correspondem a $\mathcal{E}(k)$.

As equações 3.15 e 3.21, juntas com as definições para $\mathcal{E}(k)$ e ρ_0 , formam um sistema de equações integrais não lineares para os parâmetros σ_k e ν_k , que podem ser resolvidas através de um processo iterativo, para o qual desprezamos as somatórias para obtermos a solução em ordem mais baixa. Essa solução de ordem zero coincide com a solução obtida dentro da aproximação de Bogoliubov, a qual consiste em desprezar as integrais duplas contidas na expressão da Energia Livre 3.14.

Esse sistema de equações (chamado de equações de Hartree-Fock-Bogoliubov HFB) será tratado numericamente no capítulo 6 para o caso de temperatura zero. Cálculos desse tipo já foram realizados em trabalhos anteriores como por exemplo em [Tommasini95, Kobe].

3.1 Aproximação de Bogoliubov

Dentro da aproximação de Bogoliubov desprezamos as interações entre estados fora do condensado e retemos somente termos da ordem de Γ_0^2 ou Γ_0^4 . Os termos proporcionais a Γ_0^2 representam a interação do condensado com partículas excitadas, ao passo que o termo da ordem de Γ_0^4 corresponde a energia de interação entre as partículas do condensado. Dentro dessa aproximação a Energia Livre de Helmholtz toma a forma

$$F(T, N, V) = v(0)\frac{V}{2}\rho^2 + \sum_{\mathbf{q}} q^2 n_q^0 + \rho \sum_{\mathbf{q}} v(q) (n_q^0 + e_q^0) - T k_b \sum_{\mathbf{q}} \left(\ln(1 + \nu_q) + \nu_q \ln \frac{1 + \nu_q}{\nu_q} \right) \quad (3.22)$$

enquanto as equações 3.15 e 3.21 se reduzem a

$$\tanh 2\sigma_k = \frac{\rho v(k)}{k^2 + \rho v(k)} \quad (3.23)$$

$$\nu_k = \frac{1}{\exp(\beta \mathcal{E}_b(k)) - 1} \quad (3.24)$$

onde $\mathcal{E}_b(k)$ é a energia de excitação de Bogoliubov

$$\mathcal{E}_b(k) = \sqrt{(k^2 + \rho v(k))^2 - (\rho v(k))^2}. \quad (3.25)$$

Uma comparação da energia livre obtida dentro da aproximação de Bogoliubov com aquela resultante do método de HFB mostra que em HFB é a densidade de partículas dentro do estado condensado ρ_0 a grandeza relevante aos efeitos da interação do condensado com a depleção, em outras palavras, o campo médio, proveniente do condensado, que age sobre as partículas envolvidas na depleção diminui conforme a depleção aumenta. Essa interação é a responsável pelo caráter linear da equação de dispersão (equação de dispersão tipo fônon) em baixas energias, que por sua vez pode ser considerada como responsável por diversos fenômenos restritos a baixas temperaturas, portanto esse é um resultado que de fato deve ser atenuado conforme a energia do sistema aumenta. Por outro lado na aproximação de Bogoliubov a densidade total ρ toma o lugar de ρ_0 fazendo com que a depleção invariavelmente sinta os efeitos produzidos por um condensado de densidade ρ independentemente da intensidade da depleção, resultado obviamente não realístico sendo uma boa aproximação somente quando a depleção é pequena.

Um resultado peculiar das equações de HFB pode ser visto se tomarmos o limite de grandes comprimentos de onda para a energia de excitação

$$\lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{E}(k) = 2 \sqrt{-\rho_0 v(0) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} v(k') e(k')}, \quad (3.26)$$

em primeiro lugar notamos haver um gap de energia na curva de energia $\times$ momento, um resultado que será comentado mais adiante. Por ora queremos frisar o fato de que para $\mathcal{E}(0)$ ser um número real (condição necessária para representar uma energia de excitação) é necessário que

$$\rho_0 v(0) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} v(k') e(k') \leq 0,$$

ou seja, a validade dessa desigualdade depende do potencial de interação. Para sistemas a baixas energias o parâmetro mais importante na caracterização do potencial é o seu comprimento de espalhamento a , que em aproximação de Born é descrito por

$$v(0) = 8\pi a$$

de acordo com a definição por nós usada em 2.2 para a transformada de Fourier do potencial de interação. Para que a desigualdade 3.26 seja satisfeita e mesmo para que a energia de Bogoliubov 3.25 seja real, é necessário que $a \geq 0$ (o que corresponde, grosseiramente falando, a uma interação repulsiva), precisamos também que as somatórias em 3.18 e 3.19 correspondam a apenas pequenas correções sobre a aproximação de Bogoliubov.

Nos cálculos de HFB não podemos supor um potencial tipo delta de Dirac no sistema de coordenadas, pois isso leva a uma transformada de Fourier constante, que por sua vez conduz a divergências das somatórias presentes em 3.18 e 3.19, para evitar esse inconveniente $v(k)$ deve ir a zero suficientemente rápido conforme o momento vai a infinito. Nos cálculos numéricos presentes no capítulo 6, nós supomos que $v(k)$ permanece aproximadamente constante na região em que a energia de excitação não se reduz ao termo cinético, isto é, assumimos que $v(k) \approx 8\pi a$ para $k^2 < 2\rho v(k)$.

Capítulo 4

Equações Dinâmicas em aproximação gaussiana.

A dinâmica de um sistema de muitos bósons, descrita dentro dos limites da aproximação gaussiana, pode ser apresentada de uma maneira compacta, ao menos no caso de temperatura zero¹, quando trabalhamos diretamente com os valores médios característicos dessa aproximação, isto é, os parâmetros relativos aos estados coerentes $\Gamma(\mathbf{l}, t)$ e as generalizações da depleção $n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ e emparelhamento $e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ já definidos em (2.20- 2.22) e que reescrevemos abaixo

$$n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) = \text{Tr} \left\{ \hat{b}_\mathbf{l}^\dagger \hat{b}_\mathbf{m} \hat{F}_0(t) \right\}, \quad (4.1)$$

$$e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) = \text{Tr} \left\{ \hat{b}_\mathbf{l} \hat{b}_\mathbf{m} \hat{F}_0(t) \right\}, \quad (4.2)$$

$$\Gamma(\mathbf{l}, t) = \text{Tr} \left\{ \hat{a}_\mathbf{l} \hat{F}_0(t) \right\}. \quad (4.3)$$

Nesse contexto nos livramos do trabalho de manipular explicitamente as matrizes de rotação $U_{\mathbf{k}\mu}$ e $V_{\mathbf{k}\mu}$, contidas em 2.10.

Mais adiante nos será útil lembrar que em função de suas definições $n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ e $e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ satisfazem as seguintes relações

$$\begin{aligned} n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= n^*(\mathbf{m}, \mathbf{l}, t), \\ e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= e(\mathbf{m}, \mathbf{l}, t). \end{aligned} \quad (4.4)$$

As equações dinâmicas efetivas em campo médio gaussiano resultam da equação de Liouville- von Neumann 2.30 aliada ao teorema de Wick (Regras de fatoração

¹Para sistemas em temperatura não nula, representados através do operador $\hat{F}$, o gerador de translação temporal é $\hat{H}_T = \hat{H} - \mu \hat{N} + k_b T \ln \hat{F}$. Nesse caso, até a obtenção das equações dinâmicas já torna-se muito mais trabalhosa.

para médias tomadas sobre operadores de dois corpos, válidas somente em casos particulares). Antes de prosseguirmos notamos que, em função da escala adotada para a hamiltoniana 2.1, surge um parâmetro adicional dado por $\frac{2M}{\hbar^2}$ ao lado da derivada temporal de cada equação, isto é, para a hamiltoniana adotada em 2.1 a equação dinâmica da matriz densidade é dada por

$$i\frac{2M}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}(t) = \left[\hat{F}(t), \hat{H} - \mu\hat{N}\right]. \quad (4.5)$$

Podemos eliminar o fator ao lado direito da equação acima através da seguinte mudança de variável

$$t' = \frac{\hbar}{2M}t, \quad (4.6)$$

é válido observar que num sistema de unidades onde o comprimento de espalhamento a do potencial de interação é fixado igual a 1 (como faremos adiante) a mudança de variável feita acima equivale a descrever o tempo em unidades de $\frac{2Ma^2}{\hbar}$. Tendo em mente essa nova escala para designar a variável temporal, mas utilizando ainda a letra t para representá-la (como será feito de agora em diante), a equação 4.7 toma a forma

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}(t) = \left[\hat{F}(t), \hat{H} - \mu\hat{N}\right]. \quad (4.7)$$

Através dessa equação e da aplicação do teorema de Wick obtemos a derivada de $n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ com respeito ao tempo

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= \text{Tr} \left\{ \left[\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_{\mathbf{m}}, \hat{H} - \mu\hat{N} \right] \hat{F}_0(t) \right\} = (m^2 - l^2) n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} v(k_2) \left\{ \Gamma^*(\mathbf{k}_1, t) \Gamma(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) (n(\mathbf{l}, \mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) - n(\mathbf{l} - \mathbf{k}_2, \mathbf{m}, t)) + \right. \\ &\quad + \Gamma^*(\mathbf{k}_1, t) \Gamma(\mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{l}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) - \\ &\quad - \Gamma^*(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) \Gamma(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{k}_1, \mathbf{m}, t) + \\ &\quad + \Gamma(\mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) \Gamma(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) e^*(\mathbf{l}, \mathbf{k}_1, t) - \\ &\quad \left. - \Gamma^*(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) \Gamma^*(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{m}, \mathbf{k}_1, t) \right\} + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} v(k_2) \left\{ e^*(\mathbf{l}, \mathbf{k}_1, t) e(\mathbf{m} + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) - \right. \\ &\quad - e^*(\mathbf{l} - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t) e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{m}, t) + \\ &\quad + n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) (n(\mathbf{l}, \mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) - n(\mathbf{l} - \mathbf{k}_2, \mathbf{m}, t)) + \\ &\quad \left. + n(\mathbf{l}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{k}_1, \mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) - n(\mathbf{l} - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{k}_1, \mathbf{m}, t) \right\}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Derivando o termo de emparelhamento $e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ obtemos

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) = & (l^2 + m^2 - 2\mu) e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} v(k_2) \times \\
& \times \{ \Gamma^*(\mathbf{k}_1, t) \Gamma(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) (e(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, \mathbf{m}, t) + e(\mathbf{m} + \mathbf{k}_2, \mathbf{l}, t)) + \\
& + \Gamma^*(\mathbf{k}_1, t) (\Gamma(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{m}, t) + \Gamma(\mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{l}, t)) + \\
& + \Gamma(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) (\Gamma(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{k}_1, \mathbf{m}, t) + \Gamma(\mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{k}_1, \mathbf{l}, t)) \} + \\
& + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_2} v(k_2) \Gamma(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) \Gamma(\mathbf{m} - \mathbf{k}_2, t) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} v(k_2) \times \\
& \times \{ n(\mathbf{k}_1, \mathbf{m}, t) e(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) + n(\mathbf{k}_1, \mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{m}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) + \\
& + n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{m}, \mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) + n(\mathbf{k}_1, \mathbf{l}, t) e(\mathbf{m} + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) + \\
& + n(\mathbf{k}_1, \mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{l}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) + n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{l}, \mathbf{m} + \mathbf{k}_2, t) \} + \\
& + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_2} v(k_2) e(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, \mathbf{m} - \mathbf{k}_2, t)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

e por último a derivada temporal do termo de deslocamento $\Gamma(\mathbf{l}, t)$ resulta em

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \Gamma(\mathbf{l}, t) = & (l^2 - \mu) \Gamma(\mathbf{l}, t) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} v(k_2) \Gamma(\mathbf{k}_1, t) \Gamma^*(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, t) \Gamma(\mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) + \\
& + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} v(k_2) \{ \Gamma(\mathbf{l} - \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, t) + \\
& + \Gamma(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) n(\mathbf{k}_1, \mathbf{l} + \mathbf{k}_2, t) + \Gamma^*(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, t) e(\mathbf{l} - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t) \}.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Estamos diante de um sistema de equações integro-diferenciais não lineares cujo tratamento exato não é interessante em uma primeira análise. Procuramos os modos normais em torno da solução estática resultante do método variacional de HFB apresentado no capítulo 3, que, como esperado, se encontra entre as possíveis soluções estacionárias desse sistema de equações dinâmicas. Para o método variacional do capítulo anterior foi suposto um ansatz gaussiano $\hat{F}_0$ que comuta com o momento total e é isotrópico, como pode ser mostrado através da equação 3.1, que define os operadores de quasi-partículas para o caso estático. No formalismo presente, tal hipótese implica em reduzir a correspondente solução estática à forma diagonal e isotrópica

$$n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) \rightarrow \delta_{\mathbf{l}\mathbf{m}} n^0(l),$$

$$e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) \rightarrow \delta_{\mathbf{l}, -\mathbf{m}} e^0(l),$$

além de expressá-las por meio de senos e cossenos hiperbólicos, como mostram as equações 3.2 e 3.3, o que implica numa relação de vínculo entre as duas grandezas,

que é simplificada quando trabalhamos com sistemas a temperatura zero, pois nesse caso os números de ocupação $\nu_{\mathbf{k}}$ são todos zero. Somada às restrições sobre a depleção e emparelhamento, temos que os coeficientes ligados aos deslocamentos coerentes são nulos, exceção feita somente ao estado de momento nulo

$$\Gamma(\mathbf{k}, t) \rightarrow \delta_{\mathbf{k}0} \Gamma_0.$$

Sob tais condições a solução estática da equação 4.8 é trivialmente satisfeita ao passo que as equações 4.9 e 4.10 recaem naquelas provenientes do cálculo variacional e obviamente definem os valores de $n^0(k)$, $e^0(k)$ e Γ_0 , uma vez fixado o número médio de partículas ou o potencial químico μ .

4.1 Linearização ao redor do equilíbrio.

Deslocamos a função $\Gamma(\mathbf{q}, t)$ do seu valor de equilíbrio fazendo

$$\Gamma(\mathbf{q}, t) = \Gamma_0(\delta_{0\mathbf{q}} + \chi(\mathbf{q}, t)) \quad (4.11)$$

e fizemos o mesmo para as funções $n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ e $e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$

$$\begin{aligned} n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= \delta_{\mathbf{l}\mathbf{m}} n^0(l) + \delta n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t), \\ e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= \delta_{\mathbf{l}, -\mathbf{m}} e^0(l) + \delta e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) \end{aligned} \quad (4.12)$$

e as inserimos nas equações dinâmicas, retendo apenas os desvios de primeira ordem, como resultado obtemos

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \delta n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= (\Lambda(m) - \Lambda(l)) \delta n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) + \Delta(m) \delta e^*(\mathbf{l}, -\mathbf{m}, t) - \\ &\quad - \Delta(l) \delta e(-\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) + \gamma_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \chi(\mathbf{m} - \mathbf{l}, t) - \gamma_{\mathbf{m}, \mathbf{l}} \chi^*(\mathbf{l} - \mathbf{m}, t) + \\ &\quad + (n^0(l) - n^0(m)) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} (v(\mathbf{l} - \mathbf{m}) \delta n(\mathbf{k}_1 - \mathbf{m}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{l}, t) + \\ &\quad + v(k_1) \delta n(\mathbf{l} + \mathbf{k}_1, \mathbf{m} + \mathbf{k}_1, t)) + \\ &\quad + \frac{e^0(l)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1) \delta e(\mathbf{m} + \mathbf{k}_1, -\mathbf{l} - \mathbf{k}_1, t) - \\ &\quad - \frac{e^0(m)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1) \delta e^*(\mathbf{l} - \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{m}, t), \end{aligned} \quad (4.13)$$

para a equação referente à depleção. A equação ligada ao emparelhamento fornece

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}\delta e(\mathbf{l}, -\mathbf{m}, t) &= (\Lambda(m) + \Lambda(l))\delta e(\mathbf{l}, -\mathbf{m}, t) + \Delta(l)\delta n(-\mathbf{l}, -\mathbf{m}, t) + \\
&+ \Delta(m)\delta n(\mathbf{m}, \mathbf{l}, t) + \xi_{\mathbf{l},\mathbf{m}}\chi(\mathbf{l} - \mathbf{m}, t) + \zeta_{\mathbf{l},\mathbf{m}}\chi^*(\mathbf{m} - \mathbf{l}, t) + \\
&+ \frac{n^0(m) + n^0(l) + 1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1)\delta e(\mathbf{l} + \mathbf{k}_1, -\mathbf{m} - \mathbf{k}_1, t) + \\
&+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1)(e^0(m)\delta n(\mathbf{m} + \mathbf{k}_1, \mathbf{l} + \mathbf{k}_1, t) + e^0(l)\delta n(\mathbf{k}_1 - \mathbf{l}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{m}, t)) + \\
&+ v(\mathbf{l} - \mathbf{m})\frac{e^0(l) + e^0(m)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \delta n(\mathbf{m} + \mathbf{k}_1, \mathbf{l} + \mathbf{k}_1, t),
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Ao passo que a equação linearizada para o termo de deslocamento é

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{q}, t) &= \Lambda(l)\chi(\mathbf{q}, t) + \Delta(l)\chi^*(-\mathbf{q}, t) + \\
&+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1)(\delta n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, t) + \delta e(\mathbf{q} - \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1, t)) + \\
&+ v(q)\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \delta n(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, t).
\end{aligned} \tag{4.15}$$

As funções $\Delta(k)$ e $\Lambda(k)$ foram definidas em 3.18 e 3.19, temos também $\gamma_{\mathbf{l},\mathbf{m}}$, $\xi_{\mathbf{l},\mathbf{m}}$ e $\zeta_{\mathbf{l},\mathbf{m}}$ que são funções dos parâmetros já estabelecidos durante o cálculo variacional do capítulo 3.

$$\gamma_{\mathbf{l},\mathbf{m}} = \frac{\Gamma_0^2}{V} \{ (v(\mathbf{l} - \mathbf{m}) + v(l))(n^0(l) - n^0(m)) + (v(l) + v(m))e^0(l) \}, \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
\xi_{\mathbf{l},\mathbf{m}} &= \frac{\Gamma_0^2}{V} \{ (n^0(l) + n^0(m) + 1)(v(m) + v(l)) + \\
&+ v(\mathbf{l} - \mathbf{m})(e^0(l) + e^0(m)) + v(m)e^0(m) + v(l)e^0(l) \},
\end{aligned} \tag{4.17}$$

$$\zeta_{\mathbf{l},\mathbf{m}} = \frac{\Gamma_0^2}{V} \{ v(\mathbf{l} - \mathbf{m})(e^0(l) + e^0(m)) + v(l)e^0(m) + v(m)e^0(l) \}. \tag{4.18}$$

Essas equações permitem soluções invariantes por inversão de momento

$$\begin{aligned}
n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= n(-\mathbf{l}, -\mathbf{m}, t), \\
e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t) &= e(-\mathbf{l}, -\mathbf{m}, t), \\
\Gamma(\mathbf{q}, t) &= \Gamma(-\mathbf{q}, t)
\end{aligned} \tag{4.19}$$

e assumiremos tal hipótese a fim de simplificarmos as equações.

Antes de continuarmos faremos uma análise das equações (4.13 - 4.15) com o intuito de esclarecer alguns aspectos gerais dos acoplamentos entre as funções

$\delta n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$, $\delta e(-\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ e $\chi(\mathbf{m} - \mathbf{l}, t)$. Conforme a equação 4.13, a evolução temporal de $\delta n(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ é determinada por $\chi(\mathbf{m} - \mathbf{l}, t)$, $\delta e(\bar{\mathbf{l}} - \mathbf{l}, \mathbf{m} - \bar{\mathbf{l}}, t)$ e $\delta n(\mathbf{l} + \bar{\mathbf{l}}, \bar{\mathbf{l}} + \mathbf{m}, t)$ (sendo que $\bar{\mathbf{l}}$ é uma variável de momento que pode assumir qualquer valor condizente com as condições de contorno estabelecidas) e também temos que incluir os correspondentes valores conjugados dessas quantidades. Algo similar acontece na determinação da evolução temporal de $\delta e(\mathbf{l}, \mathbf{m}, t)$ e $\chi(\mathbf{m} - \mathbf{l}, t)$ descritas em 4.14 e 4.15. Esses resultados, junto às definições (4.1 - 4.3), mostram que as equações dinâmicas acoplam somente operadores que modificam o momento total dos estados em que são aplicados por um quantia “ $\mathbf{l} - \mathbf{m}$ ”. Esse fato é diretamente ligado à invariância translacional da hamiltoniana. Em função da forma dos acoplamentos torna-se apropriado aplicarmos uma mudança de variáveis dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \mathbf{l} - \mathbf{m}, \\ \mathbf{k} &= \frac{\mathbf{l} + \mathbf{m}}{2}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Para uma interpretação dessas novas variáveis retornamos à equação 4.1 descrevendo-a na forma

$$n(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, t) = \text{Tr} \left\{ \hat{F}_0(t) \hat{b}_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}} \right\} \quad (4.21)$$

e vemos que o operador $\hat{b}_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}}$ corresponde de fato a um processo de aniquilação de uma partícula de momento $\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}$ e à criação de uma segunda partícula de momento $\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}$. Portanto fica claro que $\mathbf{q}$ representa o momento total transferido durante o processo.

De forma análoga podemos descrever 4.2 em função das novas coordenadas de momento

$$e(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, t) = \text{Tr} \left\{ \hat{F}_0(t) \hat{b}_{\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}} \hat{b}_{-\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}} \right\}, \quad (4.22)$$

nesse caso o operador envolvido é $\hat{b}_{\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}} \hat{b}_{-\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}}$ que equivale à aniquilação de duas partículas cujo momento relativo é $2\mathbf{k}$ e o total $-\mathbf{q}$. Portanto esse operador adiciona um momento $\mathbf{q}$ ao estado em que é aplicado.

Em acordo com a transformação de variáveis estabelecida em 4.20, definimos novas funções descritas por

$$\begin{aligned} \delta \bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= \delta n(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, t), \\ \delta \bar{e}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= \delta e(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, t). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Em seguida as inserimos nas equações linearizadas 4.13, 4.14 e 4.15, do que resulta,

após um rearranjo dos índices de soma, em

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \delta \bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= (\Lambda(m) - \Lambda(l)) \delta \bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) + \Delta(m) \delta \bar{e}^*(\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) - \\
&\quad - \Delta(l) \delta \bar{e}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) + \gamma_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \chi(\mathbf{q}, t) - \gamma_{\mathbf{m}, \mathbf{l}} \chi^*(-\mathbf{q}, t) + \\
&+ (n^0(l) - n^0(m)) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} (v(q) \delta \bar{n}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}, \mathbf{q}, t) + v(k_1) \delta \bar{n}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1, \mathbf{q}, t)) + \\
&+ \frac{e^0(l)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1) \delta \bar{e}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1, \mathbf{q}, t) - \frac{e^0(m)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1) \delta \bar{e}^*(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1, -\mathbf{q}, t),
\end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \delta \bar{e}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) &= (\Lambda(m) + \Lambda(l)) \delta \bar{e}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) + \\
&\quad + \Delta(l) \delta \bar{n}(-\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) + \Delta(m) \delta \bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) + \\
&\quad + \xi_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \chi(-\mathbf{q}, t) + \zeta_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \chi^*(\mathbf{q}, t) + \\
&+ \frac{n^0(m) + n^0(l) + 1}{V} \sum_{k_1} v(k_1) \delta \bar{e}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1, -\mathbf{q}, t) + \\
&+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1) (e^0(m) \delta \bar{n}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1, -\mathbf{q}, t) + e^0(l) \delta \bar{n}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}, \mathbf{q}, t)) + \\
&\quad + v(q) \frac{e^0(l) + e^0(m)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \delta \bar{n}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1, -\mathbf{q}, t)
\end{aligned} \tag{4.25}$$

e

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{q}, t) &= \Lambda(l) \chi(\mathbf{q}, t) + \Delta(l) \chi^*(-\mathbf{q}, t) + \\
&+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1) (\delta \bar{n}(\mathbf{k}_1 + \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{q}, t) + \delta \bar{e}(-\mathbf{k}_1 + \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{q}, t)) + \\
&\quad + v(q) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \delta \bar{n}(\mathbf{k}_1 + \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{q}, t).
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Nessas equações incluímos simultaneamente as duas notações usadas para as componentes vetoriais do momento, de modo que o significado dos vetores $\mathbf{l}$ e $\mathbf{m}$ é dado em 4.20.

Ao observarmos essas equações verificamos que o vetor $\mathbf{q}$ desempenha o papel de um parâmetro característico das equações ao invés de uma variável independente. Como já foi dito, esse resultado pode ser visto como um reflexo da conservação do momento linear presente na hamiltoniana.

4.2 Separação em partes real e imaginária

Como é usual no estudo de sistemas lineares estáveis, procuramos soluções cuja dependência temporal seja representada por modos de oscilação harmônica. Uma maneira comum de implementar tal método é impor uma dependência temporal da forma $e^{i\omega t}$ sobre as funções envolvidas. No caso de um sistema linear composto por funções reais a dependência temporal seria eliminada por corresponder a um fator comum a todos os termos. Porém, tal método não é aplicável às equações lineares mostradas no item anterior, uma vez que nelas estão presentes também o complexo conjugado das funções estudadas. A maneira por nós escolhida para contornar o problema foi, antes de procurar solucionar a dependência temporal, separar as funções relacionadas aos desvios lineares do deslocamento coerente, depleção e emparelhamento, mostradas em 4.11 e 4.23, em suas partes real e imaginária

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{q}, t) &= P(\mathbf{q}, t) + iQ(\mathbf{q}, t), \\ \delta\bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= x(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) + iy(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), \\ \delta\bar{e}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= u(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) + iw(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t),\end{aligned}\tag{4.27}$$

onde $x(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$, $y(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$, $u(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$, $w(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$, $P(\mathbf{q}, t)$ e $Q(\mathbf{q}, t)$ são todas funções reais. Acrescentamos que, em razão das propriedades 4.4 e 4.19, essas funções devem satisfazer as seguintes relações

$$\begin{aligned}x(-\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= x(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), & x(\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) &= x(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), \\ y(-\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= -y(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), & y(\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) &= -y(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), \\ u(-\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= u(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), & u(\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) &= u(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), \\ w(-\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= w(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t), & w(\mathbf{k}, -\mathbf{q}, t) &= w(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t).\end{aligned}\tag{4.28}$$

Inserindo as definições 4.27 nas equações 4.24, 4.25 e 4.26 obtemos um sistema de equações a coeficientes reais, que descrevemos em uma forma compacta agrupando as funções em dois vetores

$$\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) = \begin{pmatrix} x(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \\ y(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \\ u(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \\ w(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \end{pmatrix}\tag{4.29}$$

$$\vec{\beta}(\mathbf{q}, t) = \begin{pmatrix} P(\mathbf{q}, t) \\ Q(\mathbf{q}, t) \end{pmatrix}\tag{4.30}$$

Descritas através desses vetores as equações tomam a forma

$$(A_{\mathbf{kq}} + \frac{\partial}{\partial t})\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} [B_{\mathbf{kq}}^1 v(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) + B_{\mathbf{kq}}^2 v(q)] \vec{\alpha}(\mathbf{k}', \mathbf{q}, t) - C_{\mathbf{kq}} \vec{\beta}(\mathbf{q}, t) \quad (4.31)$$

$$(G_{\mathbf{q}} + \frac{\partial}{\partial t})\vec{\beta}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} [L^1 v(k') + L^2 v(q)] \vec{\alpha}(\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q}, t), \quad (4.32)$$

Sendo que $A_{\mathbf{kq}}$, $B_{\mathbf{kq}}^1$, $B_{\mathbf{kq}}^2$, $C_{\mathbf{kq}}$, $G_{\mathbf{q}}$, L^1 e L^2 são matrizes que iremos descrever através da seguinte notação

$$n_{\mathbf{k}}^{\pm} = n^0(|\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}|), \quad e_{\mathbf{k}}^{\pm} = e^0(|\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}|), \quad (4.33)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Delta(|\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}|), \quad \Lambda_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Lambda(|\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}|)$$

e

$$v^{\pm}(\mathbf{k}) = v(\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}).$$

Sendo que $n^0(k)$ e $e^0(k)$ são a depleção e o emparelhamento referentes ao estado fundamental, definidos em 3.2 e 3.3, ao passo que $\Delta(k)$ e $\Lambda(k)$ são definidos em 3.18 e 3.19, por fim $v(k)$ é a transformada de Fourier do potencial de interação.

Em termos dessas funções temos

$$A_{\mathbf{kq}} = \begin{pmatrix} 0 & \Lambda_{\mathbf{k}}^+ - \Lambda_{\mathbf{k}}^- & 0 & \Delta_{\mathbf{k}}^- + \Delta_{\mathbf{k}}^+ \\ \Lambda_{\mathbf{k}}^- - \Lambda_{\mathbf{k}}^+ & 0 & \Delta_{\mathbf{k}}^- - \Delta_{\mathbf{k}}^+ & 0 \\ 0 & \Delta_{\mathbf{k}}^- - \Delta_{\mathbf{k}}^+ & 0 & -\Lambda_{\mathbf{k}}^+ - \Lambda_{\mathbf{k}}^- \\ \Delta_{\mathbf{k}}^+ + \Delta_{\mathbf{k}}^- & 0 & \Lambda_{\mathbf{k}}^+ + \Lambda_{\mathbf{k}}^- & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.34)$$

$$B_{\mathbf{kq}}^1 = \begin{pmatrix} 0 & n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^- & 0 & e_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^- \\ n_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ & 0 & -e_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^- & 0 \\ 0 & -e_{\mathbf{k}}^- + e_{\mathbf{k}}^+ & 0 & n_{\mathbf{k}}^+ + n_{\mathbf{k}}^- + 1 \\ -e_{\mathbf{k}}^- - e_{\mathbf{k}}^+ & 0 & -n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^- - 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

$$B_{\mathbf{kq}}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ n_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -e_{\mathbf{k}}^- - e_{\mathbf{k}}^+ & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

e

$$C_{\mathbf{kq}} = \frac{\rho_0}{2} (v^+(\mathbf{k})C_{\mathbf{kq}}^+ + v^-(\mathbf{k})C_{\mathbf{kq}}^- + 2v(q)C_{\mathbf{kq}}^3), \quad (4.37)$$

sendo

$$C_{\mathbf{kq}}^+ = 2 \begin{pmatrix} 0 & n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^- + e_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^- \\ -e_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ + n_{\mathbf{k}}^- & 0 \\ 0 & n_{\mathbf{k}}^+ + n_{\mathbf{k}}^- + 1 + e_{\mathbf{k}}^+ - e_{\mathbf{k}}^- \\ -e_{\mathbf{k}}^+ - e_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^- - 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

$$C_{\mathbf{kq}}^- = 2 \begin{pmatrix} 0 & n_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^- \\ -e_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ + n_{\mathbf{k}}^- & 0 \\ 0 & n_{\mathbf{k}}^+ + n_{\mathbf{k}}^- + 1 - e_{\mathbf{k}}^+ + e_{\mathbf{k}}^- \\ -e_{\mathbf{k}}^+ - e_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^- - 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

$$C_{\mathbf{kq}}^3 = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ n_{\mathbf{k}}^- - n_{\mathbf{k}}^+ & 0 \\ 0 & 0 \\ -e_{\mathbf{k}}^+ - e_{\mathbf{k}}^- & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

Quanto a equação referente aos termos do deslocamento coerente, expressão 4.32, definimos as matrizes

$$G_q = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(q) - \Lambda(q) \\ \Delta(q) + \Lambda(q) & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.41)$$

$$L^1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

e também

$$L^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.43)$$

No caso em que a temperatura do sistema é nula os números de ocupação ν_k são todos zero e conseqüentemente, fazendo uso de 3.2 e 3.3, as matrizes $B_{\mathbf{kq}}^1$, $B_{\mathbf{kq}}^2$, $C_{\mathbf{kq}}^+$, $C_{\mathbf{kq}}^-$ e $C_{\mathbf{kq}}^3$ podem ser reescritas da seguinte forma

$$B_{\mathbf{kq}}^1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- & 0 & -s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- \\ c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ & 0 & s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- & 0 \\ 0 & s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ & 0 & c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- \\ s_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ & 0 & -c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.44)$$

$$B_{\mathbf{kq}}^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

e

$$C_{\mathbf{kq}}^+ = \begin{pmatrix} 0 & c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- \\ s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- & 0 \\ 0 & c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- \\ s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.46)$$

$$C_{\mathbf{kq}}^- = \begin{pmatrix} 0 & c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- \\ s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- & 0 \\ 0 & c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- \\ s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.47)$$

$$C_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ & 0 \\ 0 & 0 \\ s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

onde utilizamos as definições

$$c_{\mathbf{k}}^{\pm} = \cosh(2\sigma_{|\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}|}), \quad s_{\mathbf{k}}^{\pm} = \sinh(2\sigma_{|\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}|}), \quad (4.49)$$

sendo que as expressões para $\cosh(2\sigma_k)$ e $\sinh(2\sigma_k)$ (que resultam da solução variacional de HFB) estão presentes em 3.17.

Agora fixamos uma dependência temporal harmônica para as funções $\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$ e $\vec{\beta}(\mathbf{q}, t)$

$$\begin{aligned} \vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= \vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) e^{-i\omega t}, \\ \vec{\beta}(\mathbf{q}, t) &= \vec{\beta}(\mathbf{q}) e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Inserindo essas funções nas equações 4.31 e 4.32 obtemos

$$(A_{\mathbf{k}\mathbf{q}} - i\omega)\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} [B_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^1 v(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) + B_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^2 v(q)] \alpha(\mathbf{k}', \mathbf{q}) - C_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \vec{\beta}(\mathbf{q}), \quad (4.51)$$

$$(G_{\mathbf{q}} - i\omega)\vec{\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} [L^1 v(k') + L^2 v(q)] \vec{\alpha}(\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q}), \quad (4.52)$$

Essas são as equações linearizadas em sua forma mais geral. Para simplificá-las aplicamos uma transformação linear inversível sobre o vetor $\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$, o que torna a matriz $A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ diagonal.

4.3 Reformulação das equações

Verificamos que há uma transformação linear que simplifica consideravelmente a forma das equações desenvolvidas no item anterior. Mais precisamente tal transformação é aplicada sobre os termos ligados ao emparelhamento e à depleção e leva à base de autovetores da matriz $A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ (4.34). Através dessa transformação ocorre um desacoplamento de 2 dos auto-vetores, permitindo a redução do problema ao de 2 equações integrais acopladas.

A matriz $A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ possui somente autovalores imaginários puros, distribuídos simetricamente com respeito ao eixo real. São eles

$$-i\omega_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \mathcal{E}\left(\left|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}\right|\right) \pm \mathcal{E}\left(\left|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}\right|\right) \quad (4.53)$$

e o seus respectivos valores conjugados, onde $\mathcal{E}(k)$ é a energia de HFB expressa em 3.20.

Os autovetores correspondentes são

$$\omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \longrightarrow \vec{\alpha}_+(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 1 - c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \\ i(c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^-) \\ c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ \\ -i(s_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+) \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

$$-\omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \longrightarrow [\vec{\alpha}_+(\mathbf{k}, \mathbf{q})]^* = \begin{pmatrix} 1 - c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \\ -i(c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^-) \\ c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ \\ i(s_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+) \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

$$\omega_-(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \longrightarrow \vec{\alpha}_-(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \\ i(c_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^+) \\ -c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ \\ i(s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+) \end{pmatrix}, \quad (4.56)$$

$$-\omega_-(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \longrightarrow [\vec{\alpha}_-(\mathbf{k}, \mathbf{q})]^* = \begin{pmatrix} 1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \\ -i(c_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^+) \\ -c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ \\ -i(s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+) \end{pmatrix}, \quad (4.57)$$

Sendo que nenhuma normalização específica foi aplicada.

A matriz de transformação para os autovetores acima é

$$U(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 1 - c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- & 1 - c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- & 1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- & 1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \\ -i(c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+) & i(c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+) & i(c_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^+) & -i(c_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^+) \\ c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ & c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ & -c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ & -c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ \\ -i(s_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+) & i(s_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+) & i(s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+) & i(s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^-) \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

e sua inversa

$$U^{-1}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{4(c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+)} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ & i(s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^-) & 1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- & i(c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^-) \\ c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ & i(s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+) & 1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- & -i(c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^-) \\ c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ & -i(s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^-) & c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - 1 & i(c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+) \\ c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ & i(s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^-) & c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - 1 & i(c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^-) \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

A fim de descrevermos as equações 4.51 e 4.52 na base dos autovetores da matriz $A_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$, efetuamos a transformação

$$\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = U_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \vec{\phi}(\mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (4.60)$$

Substituindo essa equação em 4.51 e 4.52 e ainda multiplicando 4.51 por $U^{-1}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, pela esquerda, obtemos

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{-1}(A_{\mathbf{k}\mathbf{q}} - iI\omega)U_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \vec{\phi}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) =$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{-1} [B_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^1 v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + B_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^2 v(q)] U_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \phi(\mathbf{k}', \mathbf{q}, t) - U_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{-1} C_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \vec{\beta}(\mathbf{q}) \quad (4.61)$$

$$(G_{\mathbf{q}} - iI\omega) \vec{\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} [L^1 v(k') + L^2 v(q)] U_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \vec{\phi}(\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q}), \quad (4.62)$$

Descrevendo explicitamente essas equações chegamos em

$$(\omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \omega) \phi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \times$$

$$\times \left\{ \kappa_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + \kappa_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + \right.$$

$$+ \kappa_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + \kappa_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) \left. \right\} +$$

$$+ \frac{v(q)}{4V} \sum_{\mathbf{k}_1} \left\{ (1 - c_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^-) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + \right.$$

$$+ (1 + c_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- + s_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^-) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) \left. \right\} +$$

$$+ \chi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) P(\mathbf{q}) - i \chi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) Q(\mathbf{q}), \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned}
-(\omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \omega) \phi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \left\{ -\kappa_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \right. \\
&\quad \left. + \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \kappa_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) - \right. \\
&\quad \left. -\kappa_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + \kappa_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) \right\} - \quad (4.64) \\
&\quad -\frac{v(q)}{4V} \sum_{\mathbf{k}_1} \left((1 - c_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^-) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + \right. \\
&\quad \left. + (1 + c_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- + s_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^-) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) \right) - \\
&\quad -\chi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) P(\mathbf{q}) + i \chi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) Q(\mathbf{q}) ,
\end{aligned}$$

$$(\omega - \omega_-(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = 0 , \quad (4.65)$$

$$(\omega + \omega_-(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = 0 , \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned}
-\omega P(\mathbf{q}) - i(\gamma_q - \Lambda_q) Q(\mathbf{q}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2}) \left((c_{\mathbf{k}_1}^- - c_{\mathbf{k}_1}^+ - s_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+) \times \right. \\
&\quad \times (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + (s_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+ - c_{\mathbf{k}_1}^- - c_{\mathbf{k}_1}^+) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) \Big) , \quad (4.67)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\omega Q(\mathbf{q}) + (\gamma(q) + \Lambda(q)) P(\mathbf{q}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2}) \times \\
&\times \left\{ (c_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+ + s_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+ - 1 - s_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) + \right. \\
&\quad \left. + (s_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- + s_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+ - 1 - c_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+ - s_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) \right\} + \quad (4.68) \\
&\quad + \frac{v(q)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \left\{ (c_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+ + s_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+ - 1) (\phi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) - \right. \\
&\quad \left. - (1 + c_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+ + s_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+) (\phi_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \phi_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})) \right\} .
\end{aligned}$$

Sendo que $\phi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, $\phi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, $\phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ são as componentes do vetor $\vec{\phi}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ que define os desvios do emparelhamento e depleção, ao passo que $P(q)$ e $Q(q)$

correspondem às componentes do vetor $\vec{\beta}(q)$ ligado ao deslocamento coerente. Nessas equações utilizamos a notação

$$\kappa_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = 1 - c_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^- - \frac{(1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^-)(c_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^- + c_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+)}{(c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+)}, \quad (4.69)$$

$$\kappa_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = \frac{(s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+)(c_{\mathbf{k}_1}^+ - c_{\mathbf{k}_1}^-) - (s_{\mathbf{k}_1}^+ + s_{\mathbf{k}_1}^-)(c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^-)}{(c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+)}, \quad (4.70)$$

$$\kappa_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = 1 + c_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- + s_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^- - \frac{(1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^-)(c_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^- + c_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+)}{(c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+)}, \quad (4.71)$$

$$\kappa_4(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = \frac{(s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+)(c_{\mathbf{k}_1}^+ + c_{\mathbf{k}_1}^-) + (s_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+)(c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^-)}{(c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+)}, \quad (4.72)$$

$$\chi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{\rho_0}{4} \left\{ 2v(q) - \frac{(v^+(\mathbf{k}) + v^-(\mathbf{k}))(1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+)}{c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+} \right\}, \quad (4.73)$$

$$\chi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{\rho_0}{4(c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+)} \left\{ v^+(\mathbf{k}) (c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+) + \right. \\ \left. + v^-(\mathbf{k}) (c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^-) \right\}. \quad (4.74)$$

A forma dessas equações sugere ainda uma segunda transformação descrita por

$$\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \phi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \phi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (4.75)$$

$$\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \phi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \phi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (4.76)$$

$$\psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (4.77)$$

$$\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \quad (4.78)$$

e também

$$Q(\mathbf{q}) = -iQ'(\mathbf{q}), \quad (4.79)$$

Antes de prosseguirmos notamos das equações 4.65 e 4.66 que as funções $\phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ são determinadas independentemente das demais e são adequadamente descritas por

$$\phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = Z(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \delta(\omega_-(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \omega) \quad (4.80)$$

e

$$\phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = Z'(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \delta(\omega_-(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \omega), \quad (4.81)$$

sendo $Z(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $Z'(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ funções arbitrárias, exceto pelas restrições impostas pelas equações (4.4) e (4.19), onde estão incluídas relações de simetria necessárias ao emparelhamento e depleção. Dessas condições e com o auxílio das equações (4.56) e (4.57), que descrevem parte do emparelhamento e da depleção em função de $\phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, concluímos que

$$Z'(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = Z(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \quad (4.82)$$

e também

$$Z(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = Z(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) = Z(-\mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (4.83)$$

Mostraremos na seção 5.2.1 que as funções $\psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e conseqüentemente $\phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ são relacionadas a distorções do equilíbrio geradas por transformações não unitárias. Por outro lado, como estamos trabalhando com um sistema a temperatura zero, a matriz densidade que caracteriza o sistema deve ser pura, com apenas um autovalor diferente de zero [Landau 58] (se tratando da matriz densidade gaussiana $\hat{F}_0$ isso equivale a fixar todos os números de ocupação ν_k iguais a zero). Portanto as distorções devem ser relacionadas ao estado fundamental por transformações unitárias e portanto torna-se justificável fixarmos $\psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ iguais a zero.

Substituindo 4.75, 4.76 e 4.79 em 4.63, 4.64, 4.67 e 4.68 e usando o fato de que fixamos

$$\psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = 0 \quad (4.84)$$

obtemos

$$\begin{aligned} & \omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q})\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \omega\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \\ & = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \kappa_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \psi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - 2\chi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) Q'(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (4.85)$$

$$\begin{aligned} & \omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q})\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \omega\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \\ & = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \kappa_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \psi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \\ & + \frac{v(q)}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} (1 - c_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+ s_{\mathbf{k}_1}^-) \psi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + 2\chi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) P(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (4.86)$$

$$\begin{aligned} & -\omega P(\mathbf{q}) - (\Delta(q) - \Lambda(q)) Q'(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2}) \times \\ & \times (c_{\mathbf{k}_1}^- - c_{\mathbf{k}_1}^+ - s_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^+) \psi_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.87)$$

e

$$\begin{aligned}
-\omega Q'(\mathbf{q}) + (\Delta(q) + \Lambda(q))P(\mathbf{q}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}_1 - \frac{\mathbf{q}}{2}) \times \\
&\times (c_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+ + s_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+ - 1 - s_{\mathbf{k}_1}^+ c_{\mathbf{k}_1}^- - s_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+) \psi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \\
&+ \frac{v(q)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} (c_{\mathbf{k}_1}^- c_{\mathbf{k}_1}^+ + s_{\mathbf{k}_1}^- s_{\mathbf{k}_1}^+ - 1) \psi_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}).
\end{aligned} \tag{4.88}$$

Estamos agora diante de um sistema de equações para somente duas funções², que como veremos durante o desenvolvimento numérico, possui como limite inferior de energia um ramo discreto de excitação tipo fônon, ou seja, um ramo que tende a zero linearmente com o momento total, assim como os ramos encontrados em outros trabalhos como por exemplo [Kerman97, Kerman97b, Tommasini03]. Além deste ramo há um espectro contínuo que, como também será visto no tratamento numérico, é limitado inferiormente por um limiar sempre inferior a linha correspondente a duas vezes as excitações de quasipartículas de HFB ($2\mathcal{E}(q)$), tendendo a esse valor no limite de $q \rightarrow 0$.

²Nos referimos a $\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$. Precisamos também encontrar $P(\mathbf{q})$ e $Q'(\mathbf{q})$, mas, como $\mathbf{q}$ age como um parâmetro fixo em nossas equações, essas duas últimas funções se reduzem a números que podem ser eliminados das equações por manipulações algébricas elementares.

Capítulo 5

Características das equações linearizadas

5.1 Descrição formal da solução

As equações (4.75 - 4.78) descrevem as funções $\phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ em termos das funções $\psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, a equação (4.60) fornece as componentes independentes do tempo do vetor coluna $\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ em termos das funções $\phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ através da matriz de transformação $U(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ definida em (4.58). A equação (4.50) fornece o vetor coluna dependente do tempo $\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$ em termos do independente do tempo $\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e por fim as partes real imaginária dos desvios tanto da depleção como do emparelhamento, definidas em (4.27), são descritas pelo vetor coluna $\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$, através da definição (4.29). Portanto, supondo estabelecidas as soluções para $\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, $\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, $\psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, obtemos

$$4\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = 4 \begin{pmatrix} x(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ y(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ u(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ w(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \end{pmatrix} = \psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \quad (5.1)$$
$$-i\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + i\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$$

onde utilizamos as definições

$$\begin{aligned}\vec{\alpha}_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \begin{pmatrix} 1 - c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \\ 0 \\ c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- + c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{\alpha}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \begin{pmatrix} 0 \\ c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ \\ 0 \\ s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \\ \vec{\alpha}_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \begin{pmatrix} 1 + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- + s_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \\ 0 \\ -c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}^- \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{\alpha}_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \begin{pmatrix} 0 \\ c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- \\ 0 \\ s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{5.2}$$

sendo que $s_{\mathbf{k}}^{\pm}$ e $c_{\mathbf{k}}^{\pm}$ estão definidos em 4.49.

A solução dependente do tempo para as distorções é fornecida por

$$\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) = \vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) e^{-i\omega t},$$

que expandida nas partes real e imaginária resulta em

$$\begin{aligned}\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= (\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \cos(\omega t) + \\ &+ (\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \sin(\omega t) + \\ &+ i \left((\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \cos(\omega t) - \right. \\ &\left. - (\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \sin(\omega t) \right),\end{aligned}\tag{5.3}$$

A solução desejada pode ser extraída tanto da parte real como da imaginária de $\vec{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$ e é fácil verificar que as duas soluções equivalem. Portanto, escolhendo a parte real, obtemos

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} x(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \\ y(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \\ u(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \\ w(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) \end{pmatrix} &= (\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \cos(\omega t) + \\ &+ (\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})\vec{\alpha}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \sin(\omega t)\end{aligned}\tag{5.4}$$

5.2 Geradores unitários infinitesimais para as distorções

A seguir estudamos até que ponto as distorções sobre os valores médios, provenientes do estado de equilíbrio, aplicadas durante processo de linearização do item 4.1

podem ser relacionadas a uma transformação unitária infinitesimal gerada por um operador hermitiano $\hat{\theta}$. A conclusão que obtemos é de que nem toda distorção com respeito às médias do estado de equilíbrio pode ser gerada por uma transformação unitária infinitesimal cujo gerador $\hat{\theta}$ é um operador de um corpo. A razão para essa restrição está ligada ao fato de que alterações arbitrárias sobre as médias de operadores de um corpo implicam em alteração dos números de ocupação dos estados de quase partícula, que por sua vez correspondem aos autovalores da equação 2.24 ou aos parâmetros ν_j do operador gaussiano 2.27. Por outro lado, uma transformação unitária sobre o estado do sistema altera somente os autovetores da equação de quasi-partículas, preservando seus autovalores, conseqüentemente não pode gerar distorções arbitrárias [Blaizot, Yong 91].

Considere um estado $|\theta\rangle$ relacionado ao estado fundamental de HFB $|0\rangle$ (que consiste em um estado de vácuo de operadores de quasi-partículas) através de uma transformação infinitesimal unitária gerada por um operador hermitiano $\hat{\theta}$

$$|\theta\rangle = (1 + i\hat{\theta}) |0\rangle . \quad (5.5)$$

Então, o correspondente valor médio de um operador arbitrário $\hat{\mathcal{O}}$, calculado até primeira ordem em $\hat{\theta}$, tem a forma

$$\langle\theta| \hat{\mathcal{O}} |\theta\rangle = \langle 0| (\hat{\mathcal{O}} + i[\hat{\mathcal{O}}, \hat{\theta}]) |0\rangle . \quad (5.6)$$

Queremos, em particular, um gerador construído por uma combinação linear de operadores de até um corpo (uma vez que devemos nos restringir à aproximação de campo médio gaussiano) e que acrescente um momento $\mathbf{q}$ ao estado inicial. O operador mais geral dentro dessas características tem a forma

$$\begin{aligned} \hat{\theta}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \left(c_1(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} + \frac{1}{2} c_2(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger + \frac{1}{2} c_3(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} \right) + \\ + z_1 \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger + z_2 \hat{a}_{-\mathbf{q}} + \text{hermitiano conjugado}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

sendo $c_1(\mathbf{k})$, $c_2(\mathbf{k})$, $c_3(\mathbf{k})$, z_1 e z_2 números complexos, $\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger$ o operador de criação de partículas com momento $\mathbf{q}$ e $\hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger$ o operador deslocado do problema estático de HFB

$$\hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger = \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger - \delta_{\mathbf{k}0} \Gamma_0,$$

já definido em 3.6. Em função da arbitrariedade do operador $\hat{b}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger$, assim como de $\hat{b}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}$, com relação a inversão de $\mathbf{k}$, fixamos

$$c_2(\mathbf{k}) = c_2(-\mathbf{k}), \quad c_3(\mathbf{k}) = c_3(-\mathbf{k}).$$

Da expressão para $\hat{\theta}(\mathbf{q})$ se nota que todo operador hermitiano que acrescente um momento $\mathbf{q}$ irá acrescentar simetricamente um momento $-\mathbf{q}$.

Calculamos os desvios em primeira ordem produzidos pelo estado deslocado $|\theta\rangle$ sobre as generalizações da depleção e emparelhamento, definidas em 4.1 e 4.2

$$\begin{aligned} -i \delta n(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}) &= c_1(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|)) + \\ &+ c_2(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - c_3(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|), \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} -i \delta n(-\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}) &= c_1(-\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|)) + \\ &+ c_2(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - c_3(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|), \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} -i \delta e^*(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) &= -c_1(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - c_1(-\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - \\ &- c_3(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1), \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} -i \delta e(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, -\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}) &= c_1(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + c_1(-\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + \\ &+ c_2(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1), \end{aligned} \quad (5.11)$$

onde $n^0(k)$ e $e^0(k)$ são a depleção e o emparelhamento resultantes da solução estática de HFB (equações 3.2 e 3.3). Por outro lado, esses desvios, quando descritos pelas fuções do momento total $\mathbf{q}$ e “relativo” $\mathbf{k}$, definidas em 4.23, tomam a forma

$$\begin{aligned} -i \delta \bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= c_1^*(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|)) - \\ &- c_2^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + c_3^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|), \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} -i \delta \bar{n}(-\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= c_1^*(-\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|)) - \\ &- c_2^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + c_3^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|), \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} -i \delta \bar{e}^*(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) &= -c_1^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - c_1^*(-\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - \\ &- c_2^*(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1), \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} -i \delta \bar{e}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= c_1^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + c_1^*(-\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + \\ &+ c_3^*(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Por construção essas grandezas satisfazem

$$\delta\bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \delta\bar{n}^*(\mathbf{k}, -\mathbf{q}),$$

$$\delta\bar{e}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \delta\bar{e}(-\mathbf{k}, \mathbf{q}).$$

Contudo, a imposição feita em 4.19 implica ainda em

$$\delta\bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \delta\bar{n}(-\mathbf{k}, -\mathbf{q}),$$

$$\delta\bar{e}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \delta\bar{e}(-\mathbf{k}, -\mathbf{q}),$$

que são satisfeitas somente se

$$c_1(-\mathbf{k}) = c_1^*(\mathbf{k}), \quad c_3(\mathbf{k}) = c_2^*(\mathbf{k}). \quad (5.16)$$

Conseqüentemente esse sistema de equações se reduz a

$$\begin{aligned} -i \delta\bar{n}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) &= c_1(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|)) + \\ &+ c_2(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - c_2^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|), \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} -i \delta\bar{n}(-\mathbf{k}, -\mathbf{q}) &= c_1^*(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|)) + \\ &+ c_2(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - c_2^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|), \end{aligned} \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} -i \delta\bar{e}^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= -c_1(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - c_1^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - \\ &- c_2^*(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1), \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} -i \delta\bar{e}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) &= c_1(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + c_1^*(\mathbf{k}) e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + \\ &+ c_2(\mathbf{k}) (n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Separamos as partes real e imaginária do emparelhamento e da depleção conforme as definições já presentes em 4.27 (sendo que o modo como a dependência temporal foi eliminada pode ser visto em 4.29, 4.30 e 4.50) obtemos

$$\delta\bar{n}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) = x(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) + iy(\mathbf{k}, -\mathbf{q}), \quad (5.21)$$

$$\delta\bar{e}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) = u(\mathbf{k}, -\mathbf{q}) + iw(\mathbf{k}, -\mathbf{q}). \quad (5.22)$$

Descrevemos também os coeficientes $c_1(\mathbf{k})$ e $c_3(\mathbf{k})$ através das partes real e imaginária

$$c_1(\mathbf{k}) = a_1(\mathbf{k}) + ib_1(\mathbf{k}) \quad e \quad c_2(\mathbf{k}) = a_2(\mathbf{k}) + ib_2(\mathbf{k}). \quad (5.23)$$

Como resultado obtemos

$$\begin{aligned}
x(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= b_1(\mathbf{k}) \left(n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) \right) - b_2(\mathbf{k}) \left(e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) \right), \\
u(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= b_1(\mathbf{k}) \left(e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) - e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) \right) - b_2(\mathbf{k}) \left(n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1 \right), \\
y(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= a_1(\mathbf{k}) \left(n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) - n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) \right) + a_2(\mathbf{k}) \left(e^0_{|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|} - e^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) \right), \\
w(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= a_1(\mathbf{k}) \left(e^0_{|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|} + e^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) \right) + a_2(\mathbf{k}) \left(n^0(|\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}|) + n^0(|\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}|) + 1 \right).
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Utilizando as relações 3.2 e 3.3 para $\nu_k = 0$ podemos reescrever as expressões acima como

$$2 \begin{pmatrix} x(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ u(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ & s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- \\ s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- & -c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1(\mathbf{k}) \\ b_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{5.25}$$

e

$$2 \begin{pmatrix} y(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ w(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- & s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ \\ -s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ & c_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(\mathbf{k}) \\ a_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{5.26}$$

onde utilizamos as definições 4.49. Um cálculo direto mostra que os determinantes das matrizes de transformação descritas tanto em 5.25 como em 5.26 são nulos, logo podemos sem perda de generalidade fixar, por exemplo

$$a_2(\mathbf{k}) = b_2(\mathbf{k}) = 0$$

e obtemos

$$2 \begin{pmatrix} x(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ u(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^+ \\ s_{\mathbf{k}}^+ - s_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} b_1(\mathbf{k}) \tag{5.27}$$

e

$$2 \begin{pmatrix} y(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ w(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- \\ -s_{\mathbf{k}}^- - s_{\mathbf{k}}^+ \end{pmatrix} a_1(\mathbf{k}). \tag{5.28}$$

Conseqüentemente não é possível gerar desvios arbitrários da depleção e emparelhamento com relação à configuração de equilíbrio por meio de uma transformação unitária infinitesimal. Acrescentamos mais uma vez que uma transformação unitária

aplicada sobre o estado fundamental não equivale a uma alteração genérica do operador gaussiano, uma vez que este é representado não somente pelas transformações de quasi-partícula mas em sua construção estão envolvidos também os números de ocupação ν_j , que não são alterados por uma transformação unitária.

5.2.1 Implicações sobre a dinâmica linearizada

Podemos mostrar que os desvios produzidos acima pelo gerador $\hat{\theta}(\mathbf{q})$, definido em 5.7, correspondem exatamente aos vetores $\vec{\alpha}_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\vec{\alpha}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, definidos em 5.2, relacionados às funções $\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ de acordo com 5.1. Primeiro multiplicamos o vetor $\vec{\alpha}_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ por $c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+$ resultando em

$$\begin{pmatrix} 1 - c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ \\ c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+ + c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} (c_{\mathbf{k}}^+ s_{\mathbf{k}}^- - c_{\mathbf{k}}^- s_{\mathbf{k}}^+) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^+ - c_{\mathbf{k}}^- \\ s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^- \end{pmatrix} (s_{\mathbf{k}}^+ + s_{\mathbf{k}}^-),$$

que é proporcional ao vetor ao lado direito de 5.27. A proporcionalidade entre $\vec{\alpha}_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e o vetor ao lado direito de 5.28 é evidente. Portanto, desvios produzidos por transformações unitárias, ao menos até primeira ordem, não geram desvios proporcionais aos vetores $\vec{\alpha}_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\vec{\alpha}_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, mostrados em 5.2. Em função disso as funções $\psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, definidas em (4.77, 4.78), são mantidas iguais a zero e assim podem ser descartadas do conjunto de equações iniciado em 4.85, baseados na idéia de que não estamos trabalhando com sistema termalizado e conseqüentemente os estados devem ser representados por vetores no espaço de Fock e não por matrizes densidade que possuam mais de um autovalor diferente de zero.

5.2.2 Interpretação das freqüências de oscilação

Podemos aproveitar o que foi feito no início da seção 5.2 para fornecermos uma justificativa para a interpretação que relaciona as freqüências de oscilação provenientes das equações de campo médio linearizadas às energias de excitação do sistema. Seja $|\phi_j\rangle$ e E_j os respectivos autovetores e autovalores da hamiltoniana

$$\hat{H} |\phi_j\rangle = E_j |\phi_j\rangle, \quad (5.29)$$

sendo que consideramos $|\phi_0\rangle$ como sendo o estado fundamental. Em seguida construímos um estado que consiste de uma combinação linear entre o estado fundamental e um estado excitado

$$|\lambda; j\rangle = |\phi_0\rangle + i\lambda |\phi_j\rangle$$

sendo λ um número complexo. Sabemos que esse estado é de norma unitária em até primeira ordem em λ , uma vez que $\langle \phi_0 | \phi_j \rangle = \delta_{j0}$. Aplicando o operador de evolução temporal¹

$$U(t) = e^{-i\hat{H}t}$$

sobre esse estado obtemos

$$|\lambda; j; (t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}(|\phi_0\rangle + i\lambda |\phi_j\rangle) = e^{-iE_0t}(|\phi_0\rangle + i\lambda e^{-i(E_j-E_0)t} |\phi_j\rangle).$$

A média de um operador arbitrário $\hat{\mathcal{O}}$ fornecida por esse estado é

$$\begin{aligned} \langle \lambda; j; (t) | \hat{\mathcal{O}} | \lambda; j; (t) \rangle &= \\ &= \langle \phi_0 | \hat{\mathcal{O}} | \phi_0 \rangle + i\lambda (\langle 0 | \hat{\mathcal{O}} | \phi_j \rangle e^{-i\omega_{j0}t} - \langle \phi_j | \hat{\mathcal{O}} | 0 \rangle e^{i\omega_{j0}t}) = \\ &= \langle 0 | \hat{\mathcal{O}} | 0 \rangle - 2\lambda \text{Im}(\langle 0 | \hat{\mathcal{O}} | \phi_j \rangle e^{-i\omega_{j0}t}) \end{aligned} \quad (5.30)$$

onde $\text{Im}(z)$ significa a parte imaginária de z e a seguinte definição para as frequências de oscilação foi utilizada

$$\omega_{ij} = E_i - E_j. \quad (5.31)$$

Da equação 5.30 notamos que podemos associar os desvios do equilíbrio, utilizados durante a linearização das equações de movimento, a valores médios produzidos por uma combinação linear do estado fundamental e de um estado excitado de energia E_j , desse modo as frequências de oscilação descrevem as excitações de acordo com a equação 5.31.

5.3 Modo normal com energia de excitação nula

As equações integrais que definem os estados do sistema, mostradas (4.85 - 4.88), assumem uma estrutura bem mais simplificada no caso em que o momento total da excitação é nulo, inclusive em função da simetria esférica que as equações adquirem. Sob essa condição é possível mostrar analiticamente, recorrendo às equações do cálculo variacional de HFB, a existência de um modo normal com energia de excitação nula. Através dos resultados numéricos que obtivemos podemos inferir que o ramo discreto de excitação lá existente converge para este modo normal de oscilação conforme o momento da excitação tende a zero ² e que portanto não há gap nesse ramo.

¹Onde fixamos $\hbar = 1$.

²Os resultados numéricos das equações 4.85, 4.86, 4.87 e 4.88, mostram que os autovetores do ramo discreto convergem, conforme q se aproxima de zero, à solução analítica presente nesta seção.

Fixando as funções $\psi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\psi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ iguais a zero e deixando o momento total $\mathbf{q}$ ir também a zero as equações 4.85, 4.86, 4.87 e 4.88 assumem a seguinte forma

$$2\mathcal{E}(k)\psi_2(k) - \omega\psi_1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \frac{s_{k_1}}{s_k} \psi_2(k_1) - \frac{\rho_0 v(k)}{s_k} Q'(0), \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} 2\mathcal{E}(k)\psi_1(k) - \omega\psi_2(k) = & -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \frac{s_k s_{k_1}^2 + c_k c_{k_1} s_{k_1}}{s_k} \psi_1(k_1) - \\ & -\frac{v(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} s_{k_1}^2 \psi_1(k_1) + \frac{\rho_0 (s_k(v(k) + v(0)) - v(k)c_k)}{s_k} P(0), \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$-\omega P(0) - (\Delta(0) - \Lambda(0))Q'(0) = -2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}_1) s_{k_1} \psi_2(k_1), \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} & -\omega Q'(0) + (\Delta(0) + \Lambda(0))P(0) = \\ & = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1)(s_{k_1}^2 - c_{k_1} s_{k_1}) \psi_1(k_1) + \frac{2v(0)}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} s_{k_1}^2 \psi_1(k_1). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Sendo que utilizamos as definições

$$\psi_j(k) = \psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{q} = \mathbf{0}), \quad j = 1, 2, \quad (5.36)$$

$$s_k = \sinh(2\sigma_k) \quad \text{e} \quad c_k = \cosh(2\sigma_k). \quad (5.37)$$

Os senos e cossenos hiperbólicos mostrados acima e a energia de HFB $\mathcal{E}(k)$ foram definidos durante o cálculo variacional de HFB nas equações 3.17 e 3.20.

Para $\omega = 0$ o problema se torna parcialmente desacoplado, se reduzindo a dois pares de equações independentes. Inicialmente fixamos nossa atenção sobre o par de equações que acoplam $\psi_2(k)$ e $Q'(0)$. Com o auxílio de 3.17 e fixando ω igual a zero reescrevemos 5.32 e 5.34

$$2\Delta(k)\psi_2(k) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) s_{k_1} \psi_2(k_1) - \rho_0 v(k) Q'(0), \quad (5.38)$$

$$-(\Delta(0) - \Lambda(0))Q'(0) = -\frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} v(k_1) s_{k_1} \psi_2(k_1), \quad (5.39)$$

Retornando às equações 3.3 e 3.18 e lembrando que supomos o sistema em temperatura nula³, vemos que o par de equações acima possui como solução

$$Q'(0) = -2c$$

e

$$\psi_2(k) = c,$$

sendo c somente um parâmetro de normalização.

As funções $\psi_1(k)$ e $P(0)$ pertencem a um segundo par de equações e podemos assumi-las iguais a zero, $P(0) = \psi_1(k) = 0$. Portanto, para o caso do momento total da excitação ser nulo, encontramos uma solução analítica exata para as equações dinâmicas linearizadas, o que nos coloca numa situação mais próxima de verificarmos a existência de um ramo discreto de energia sem gap em nossas equações.

5.3.1 Estrutura da solução

De acordo com a solução obtida acima e com as definições 4.75, 4.76 e 4.79 temos

$$-\phi_2(k) = \phi_1(k),$$

$$2\phi_1(k) = c$$

e também

$$Q(0) = -iQ'(0) = i2c.$$

Agora, se deixarmos

$$c = \frac{1}{2i}c'$$

e utilizarmos as equações 4.54 e 4.55 (onde os desvios lineares tanto da depleção como do emparelhamento estão descritos em termos dos autovetores $\vec{\alpha}_j(\mathbf{k}, \mathbf{q})$) chegamos em

$$\vec{\alpha}(k, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -s_k \end{pmatrix} c'$$

e

$$Q(0) = c'$$

³Em temperatura zero temos $\nu_k = 0$, o que nos fornece

$$e^0(k) = -\frac{1}{2}s_k.$$

ou então, de acordo com as definições 4.11, 4.12, 4.23, 4.27, 4.29 e 4.30

$$e(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, t) = e^0(k) + \delta \bar{e}(\mathbf{k}, \mathbf{q} = \mathbf{0}, t) = e^0(k) - \imath c' s_k = e^0(k)(1 - 2\imath c'),$$

$$n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) = n^0(k) + \delta \bar{n}(\mathbf{k}, \mathbf{q} = \mathbf{0}, t) = n^0(k),$$

e

$$\Gamma(\mathbf{q} = \mathbf{0}, t) = \Gamma_0 + \imath \Gamma_0 c' = \Gamma_0(1 + \imath c').$$

Naturalmente esses modos não possuem dependência temporal, em virtude da frequência de excitação ser nula. Temos também que somente as partes imaginárias do emparelhamento e do deslocamento coerente sofrem correções com respeito ao estado inicial. Por fim, pode-se facilmente verificar que o valor médio do número de partículas deste estado equivale ao do estado fundamental. O que vem a ser uma condição importante para que o estado modificado possa ser interpretado como uma simples “distorção do estado fundamental”, não representando um sistema distinto com um número de partículas diferente.

Finalmente essa solução pode ser relacionada à “quebra de simetria” presente na escolha do operador densidade, com respeito ao operador número de partículas, em acordo com alguns teoremas relacionados a invariâncias do sistema [Tommasini03, Blaizot] e que comentaremos no próximo item.

5.3.2 Quebra da conservação do número de partículas

Podemos afirmar que, toda invariância da hamiltoniana, com relação a uma transformação unitária que altera o operador densidade adotado para representar os estados do sistema, está vinculada a alguma degenerescência dos níveis de energia fornecidos pelo referido operador (o que nem sempre implica numa verdadeira degenerescência do sistema). Veremos um exemplo a seguir, num caso particular de uma hamiltoniana que preserva o número de partículas do sistema.

5.3.3 Operador $\hat{N}$ como gerador de uma transformação unitária

Aqui, o mencionado gerador da transformação unitária é o operador número de partículas. A transformação é definida por

$$\hat{U}_{\hat{N}}(\lambda) = \exp(i \lambda \hat{N})$$

sendo λ um número real. Em função da invariância da hamiltoniana temos

$$\text{Tr} \left\{ e^{i\lambda\hat{N}} \hat{H} e^{-i\lambda\hat{N}} \hat{F}_0 \right\} = \text{Tr} \left\{ \hat{H} \hat{F}_0 \right\} . \quad (5.40)$$

Por outro lado

$$e^{i\lambda\hat{N}} \hat{F}_0 e^{-i\lambda\hat{N}} \neq \hat{F}_0 ,$$

conseqüentemente existem diversos estados distintos, determinados por um parâmetro contínuo e que possuem o mesmo valor para a energia.

Se aplicarmos $\hat{U}_{\hat{N}}(\lambda)$ no estado fundamental de HFB as correções resultantes em primeira ordem em λ para as grandezas relevantes em aproximação de campo médio são

$$\delta e(k) = i \lambda \sinh(2\sigma_k) ,$$

$$\delta n(k) = 0 ,$$

$$\delta \Gamma(0) = 2 i \lambda \Gamma(0) ,$$

coincidindo com a solução obtida, anteriormente no item 5.3.1, para a dinâmica linearizada.

Capítulo 6

Resultados Numéricos

6.1 Características do potencial efetivo utilizado

Para representar o potencial de interação de dois corpos descrito no espaço de momentos e reescalado por um fator $\frac{\hbar^2}{2M}$, em concordância com o que foi utilizado na equação 2.1, utilizamos a função gaussiana¹

$$v(k) = 8\pi a e^{-\frac{k^2}{\sigma^2}}, \quad (6.1)$$

sendo σ um parâmetro que descreve o alcance do potencial e que ao longo dos cálculos fixamos como

$$\sigma = \frac{20}{8\pi}.$$

A constante a fornece, em aproximação de Born, o comprimento de espalhamento do átomo envolvido, como veremos a seguir. A conexão entre $v(k)$ e o potencial de interação descrito no espaço de configurações $U(r)$ é fornecida por

$$v(k) = \frac{2M}{\hbar^2} \int U(r) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r. \quad (6.2)$$

Em virtude das duas expressões acima resulta

$$U(r) = \frac{4\pi a \hbar^2}{M} \frac{\sigma^3}{(2\sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{\sigma^2 r^2}{4}}.$$

Conforme mencionamos, o comprimento de espalhamento a desse potencial, dentro da aproximação de Born [Landau 58], é

$$a = \frac{M}{4\pi \hbar^2} \int U(r) d^3r.$$

¹Nota-se que nessas condições a função escolhida possui dimensão de comprimento.

que fixamos como

$$a = \frac{1}{8\pi},$$

conseqüentemente, ao longo desse capítulo, as variáveis de momento k são descritas em unidades de $(8\pi a)^{-1}$.

A validade do modelo que utilizamos é restrita a sistemas de baixa densidade que podem ser, em parte, caracterizados pela desigualdade

$$\rho a^3 \ll 1. \quad (6.3)$$

Calculamos o espectro de energia para valores da densidade total ρ , que variaram de

$$\rho a^3 = \frac{0.01}{(8\pi)^3} \simeq 6.3 \times 10^{-7}$$

até

$$\rho a^3 = \frac{10^{-6}}{(8\pi)^3} \simeq 6.3 \times 10^{-11}.$$

Conseqüentemente, para todos esses valores a condição 6.3 é satisfeita.

Detalhamos nas duas seções que seguem os resultados numéricos obtidos para $\rho a^3 = \frac{0.01}{(8\pi)^3}$, ao passo que para os demais valores da densidade extraímos somente o valor da velocidade do som do sistema e comparamos com a expressão referente a velocidade do som obtida na aproximação Bogoliubov

$$c_B(\rho) = \sqrt{2\rho v(0)},$$

obtida de 3.25.

6.2 Equações de Hartree-Fock-Bogoliubov

Calculamos numericamente a solução das equações de HFB mostradas em (3.16-3.20), para obtermos as funções que fazem o papel dos parâmetros de entrada das equações dinâmicas linearizadas.

6.2.1 Procedimentos

Inicialmente tomamos o limite do contínuo, levando somas a integrais e, trabalhando em coordenadas esféricas, integramos as coordenadas angulares, supondo o potencial descrito em 6.1. Dessa maneira, a equação 3.18 toma a forma

$$2\mathcal{E}(k)e^0(k) + \frac{\sigma^2}{(2\pi)^2}e^{-\frac{k^2}{\sigma^2}} \int_0^\infty e^{-\frac{k_1^2}{\sigma^2}} \frac{k_1}{k} \sinh\left(\frac{2kk_1}{\sigma^2}\right) e^0(k_1) dk_1 = -\rho_0 v(k) \quad (6.4)$$

As equações 3.2 e 3.3, no caso dos números de ocupação ν_k serem iguais a zero, fornecem uma relação algébrica simples entre $n^0(k)$ e $e^0(k)$

$$n^0(k) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{(2e^0(k))^2 + 1} - 1 \right).$$

Por outro lado, estabelecidos $n^0(k)$ e $e^0(k)$ podemos, através das equações 3.17, 3.18 e 3.19 determinar a energia de Hartree-Fock-Bogoliubov $\mathcal{E}(k)$. Numa primeira aproximação, desprezamos as integrais envolvidas em 3.18 e 3.19 (que ali estão ainda descritas em termos de somatórias), reduzindo a energia de excitação à aproximação de Bogoliubov, que detém uma forma analítica

$$\mathcal{E}_B^2(k) = (k^2 + \rho v(k))^2 - (\rho v(k))^2. \quad (6.5)$$

Introduzindo essa expressão na equação 6.4 chegamos a uma equação integral linear não homogênea para $e^0(k)$. Fixamos um limite superior k_m à integral, sendo que nos resultados apresentados abaixo foram utilizados

$$k_m = 5\sigma = \frac{100}{8\pi}.$$

Em seguida discretizamos a integral e construímos a matriz correspondente ao operador que age sobre $e^0(k)$. A solução resulta da aplicação da inversa dessa matriz sobre o termo não homogêneo da equação 6.4. Dessa forma chegamos a um valor corrigido de $e^0(k)$ que conseqüentemente fornece uma correção para $n^0(k)$, com os quais calculamos um novo valor da energia de HFB. Repetimos esse processo sucessivamente até a convergência dos resultados.

Para nos assegurarmos da confiabilidade tanto da discretização como do limite superior imposto às integrais, aumentamos gradativamente o limite superior e o número de pontos da discretização, até ocorrer a convergência. Em termos práticos não são necessárias mais de uma dezena de iterações para atingirmos um resultado estacionário.

6.2.2 Resultados

Plotamos na figura 6.1 a curva obtida para a energia de Hartree-Fock-Bogoliubov $\mathcal{E}(q)$ junto com a energia de excitação de Bogoliubov $\mathcal{E}_B(q)$, presente em 6.5, além de um termo cinético puro q^2 , por simples fim ilustrativo. Para valores da ordem de $q = 1$ as três curvas já tornam-se bastante próximas. Portanto, para observarmos as diferenças entre as três curvas deixamos o momento q variar somente de zero a 0.1 (em unidades de $\frac{\hbar}{8\pi a}$). Dessa figura observamos a presença do gap em $\mathcal{E}(q)$ e o

caráter linear de $\mathcal{E}_B(q)$ para baixos valores do momento $q^2 \ll 2\rho v(0)$. No que se refere aos parâmetros que geraram o gráfico 6.1 temos

$$2\rho v(0) = 0.02$$

Figura 6.1: A curva em negrito representa a energia de Hartree-Fock-Bogoliubov $\mathcal{E}(q)$, a curva lisa a energia de Bogoliubov $\mathcal{E}_B(q)$ e a curva tracejada é o termo cinético puro q^2 correspondente à energia da partícula livre. A energia está descrita em unidades de $\frac{\hbar^2}{2M(8\pi a)^2}$, ao passo que q é descrito em unidades de $(8\pi a)^{-1}$. Sendo que a é o comprimento de espalhamento.

A relação entre a densidade total e a densidade do condensado é fornecida pela expressão 3.16

$$\rho - \rho_0 = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty n^0(k) k^2 dk.$$

Inserindo o valor numérico obtido para a depleção na integral acima obtemos

$$(8\pi a)^3 (\rho - \rho_0) \approx 5.3 \times 10^{-6}.$$

Portanto

$$\rho \gg \rho - \rho_0,$$

uma vez que

$$(8\pi a)^3 \rho = 0.01.$$

Para finalizar plotamos, na figura 6.2, a função " $q^2 n^0(q)$ " que descreve a depleção efetiva do condensado e observamos que essa função possui uma variação rápida na região situada em $q < 0.1$, trazendo dificuldades para o tratamento numérico, e decai rapidamente a zero para $q > 1$.

Figura 6.2: “Depleção efetiva” do sistema: $q^2 n^0(q)$, obtida para $\rho a^3 = \frac{10^{-2}}{(8\pi)^3}$.

6.3 Ramos de excitação

Construímos uma rotina numérica para obtermos soluções das equações apresentadas em (4.85 - 4.88), que fornecem as excitações de baixa energia correspondentes ao ramo discreto assim como o limite inferior do espectro contínuo.

6.3.1 Método utilizado

Como no caso anterior levamos as equações ao limite do contínuo e integramos a coordenada polar, em torno da direção do momento de excitação. Dessa maneira eliminamos uma variável, reduzindo a dois o número de variáveis independentes, que são o módulo do “momento relativo” e o respectivo ângulo formado com o momento total da excitação. Fixamos um limite superior de integração para o módulo do momento relativo e discretizamos as integrais, obtendo, conseqüentemente, um problema de autovalores que resolvemos através de rotinas prontas, disponíveis no programa “Mathematica”.

6.3.2 Resultados obtidos

O espectro de excitação resultante das equações (4.85 - 4.88) se divide no ramo discreto, caracterizando excitações do tipo fonon (também conhecida como excitações de som zero) e no ramo contínuo que possui um limiar inferior bem definido caracterizado por uma curva sempre abaixo de duas vezes a energia de HFB $\mathcal{E}(k)$.

Plotamos na figura 6.3 os valores numéricos correspondentes tanto ao ramo dis-

Figura 6.3: Os pontos maiores representam o contorno inferior do contínuo. A energia de Bogoliubov é dada pela linha contínua e os pontos menores mostram o ramo discreto de excitação. A energia é descrita em unidades de $\frac{\hbar^2}{2M(8\pi a)^2}$.

creto como à fronteira do espectro contínuo, traçamos também a curva que descreve as excitações de Bogoliubov 3.25, que se mantém sempre acima dos pontos correspondentes à aproximação gaussiana, mostrando que um dos efeitos do tratamento completo em campo médio gaussiano é produzir um deslocamento para baixo da energia das excitações elementares. Em parte esse desvio reflete o fato de que no tratamento exato a velocidade do som de Bogoliubov deve depender da densidade do condensado ρ_0 e não da densidade total ρ como ocorre na aproximação de Bogoliubov onde a depleção é descartada. Da figura 6.3 vemos também que o ramo discreto intercepta o limiar contínuo para um momento total q da ordem da velocidade do som de Bogoliubov $\sqrt{2\rho v(0)}$, que para os parâmetros escolhidos $\rho(8\pi a)^3 = 0.01$ e $v(0) = 1$ resulta em $\sqrt{2\rho v(0)} \sim 0.15$, em unidades de $\frac{\hbar}{2M8\pi a}$.

Na figura 6.4 plotamos os pontos correspondentes ao espectro contínuo junto a curva correspondente a duas vezes a energia de HFB, mostrando que ambas as curvas se aproximam para pequenos valores do momento total.

Na figura 6.5 plotamos os pontos correspondentes ao ramo discreto, para pequenos valores de q (região onde a curva toma o aspecto linear), acompanhados de um ajuste linear da forma

$$\mathcal{E}(q) = v_s q + E_0 ,$$

sendo que os pontos responsáveis pelo ajuste foram restritos à região determinada

Figura 6.4: A curva lisa representa duas vezes a energia de HFB, ao passo que os pontos são os valores obtidos pela rotina numérica (correspondentes à aproximação gaussiana) para o limiar inferior do espectro contínuo.

por $q < 0.03$. A boa qualidade do ajuste, ao menos em termos qualitativos, evidencia o caráter linear da curva. Uma propriedade típica de sistemas bosônicos a baixa temperatura, que tem como um dos efeitos, por exemplo, a superfluidez [Landau 61]. Deve-se salientar, no entanto, que desprezamos, neste gráfico, alguns pontos dentre os obtidos para valores muito baixos de q , uma vez que estes apresentaram desvios significativos com respeito ao restante da curva e que podem ser atribuídos a problemas de precisão numérica.

Como esperávamos, os resultados aqui apresentados coincidem, ao menos qualitativamente, com trabalhos produzidos anteriormente, onde foram utilizadas diferentes abordagens [Kerman97, Kerman97b, Tommasini03].

6.4 Velocidade de som zero

O termo “velocidade de som zero” é utilizado para designar a velocidade do som proveniente do modelo de Bogoliubov c_B , que se refere a velocidade de propagação de um pulso de densidade, no caso específico de gases bosônicos diluídos e em baixas temperaturas, além disso o comprimento de onda do pulso λ_{ex} deve, também, estar localizado em uma região específica

$$\lambda_{ex} > \xi = (8\pi\rho_0 a)^{-\frac{1}{2}}$$

Seguindo um procedimento análogo ao utilizado na seção anterior obtivemos a

Figura 6.5: Plotamos os pontos obtidos para o ramo discreto, sobreposto a um ajuste linear (representado pela curva lisa). A curva tracejada representa a energia obtida em aproximação de Bogoliubov.

velocidade de som zero para diversos valores da densidade total. Plotamos na figura 6.6 um gráfico do logaritmo da velocidade do som em função do logaritmo da densidade total ρ , juntamente com a curva fornecida pela aproximação de Bogoliubov 6.5. Novamente notamos que o cálculo em campo médio gaussiano produz valores ligeiramente menores do que os provenientes da aproximação de Bogoliubov para a velocidade do som. Na tabela 6.1 apresentamos, para diversos valores da densidade total ρa^3 , valores da velocidade do som tanto em aproximação de Bogoliubov $c_b(\rho)$, como em aproximação gaussiana $c_G(\rho)$, além da expressão dada por

$$\frac{c_b(\rho) - c_G(\rho)}{c_b(\rho) + c_G(\rho)}.$$

Notamos que, apesar da enorme região de variação da densidade, a diferença relativa entre $c_G(\rho)$ e $c_b(\rho)$ se mantém aproximadamente constante.

No apêndice D mostramos uma tentativa de se obter uma expressão para a velocidade do som através de uma expansão perturbativa com respeito ao momento total aplicada às equações linearizadas. Porém chegamos somente em uma expressão que permite, numericamente, se obter a velocidade do som sem a necessidade de se aplicar o ajuste de reta que utilizamos em nossos cálculos. Nesse apêndice apresentamos apenas essas expressões, uma vez que esses cálculos não foram realizados.

Existem alguns trabalhos experimentais onde a velocidade do som foi medida em condensados de Bose-Einstein, por exemplo em 1997 foi medido por Ketterle et al. [Ketterle97, Ketterle98] a velocidade de propagação do som em condensados de sódio com densidades em torno de $\rho = 10^{14} \text{cm}^{-3}$ confinados em armadilhas magnéticas.

Tabela 6.1: Apresentamos os valores da velocidade do som zero em aproximação de Bogoliubov $c_b(\rho)$, a obtida em aproximação gaussiana $c_G(\rho)$, além da razão entre a diferença e a média. Apresentamos resultados para diversos valores dados pelo produto da densidade do gás e a terceira potência do comprimento de espalhamento ρa^3 . Os valores da velocidade do som são dados em unidades de $\frac{\hbar}{M 16\pi a}$.

$(8\pi)^3 \rho a^3$	$\frac{2(c_b(\rho)-c_G(\rho))}{c_b(\rho)+c_G(\rho)}$	$c_G(\rho) \times \frac{16\pi M a}{\hbar}$	$c_b(\rho) \times \frac{16\pi M a}{\hbar}$
1.10^{-6}	0.087	0.001296	0.00141
5.10^{-6}	0.095	0.002874	0.00316
0.00001	0.125	0.003945	0.00447
0.00005	0.114	0.008917	0.01
0.0001	0.084	0.012989	0.01414
0.001	0.098	0.040533	0.04472
0.005	0.087	0.091658	0.1
0.01	0.133	0.123753	0.14142

Considerando que o comprimento de espalhamento do sódio é da ordem de $a = 2.75 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$, temos que o parâmetro ρa^3 nesse sistema mede

$$\rho a^3 \approx 10^{-6}.$$

Nesse experimento os resultados experimentais obtidos para a velocidade do som confirmam, qualitativamente falando, as previsões teóricas. Deve-se notar que uma amostra de gás confinada em uma armadilha magnética não possui uma densidade homogênea, e então, para que um modelo de gás homogêneo seja aplicável a um sistema realístico, é necessário que o potencial externo não tenha uma variação apreciável quando comparado ao comprimento de onda da excitação. Em [Ketterle99, Dalfovo] se pode encontrar uma discussão mais detalhada a respeito das diferentes ordens de grandeza envolvidas em uma amostra de gás frio.

Figura 6.6: Logaritmo da velocidade do som pelo logaritmo da densidade total do sistema. A linha resulta da aproximação de Bogoliubov ao passo que os pontos provêm do cálculo completo em campo médio.

Capítulo 7

Conclusão

Extraímos da dinâmica em aproximação de campo médio gaussiano o espectro de excitações de baixa energia de um gás de bóson sem spin, com interação repulsiva, homogêneo e em temperatura zero. Descrevendo excitações do sistema que são simultaneamente autovetores do momento total obtivemos dois ramos de energia, um discreto com comportamento linear no limite assintótico de grandes comprimentos de onda e um segundo ramo contínuo e limitado inferiormente. Tanto o ramo contínuo como o discreto foram encontrados anteriormente, através do uso do funcional gaussiano para parametrizar os estados do sistema, em trabalhos como [Kerman97, Kerman97b]. Uma característica importante relativa ao ansatz que utilizamos é a inclusão de desvios do equilíbrio, tanto da depleção como do emparelhamento, que carregam o momento total da excitação e assim possam interagir com o desvio do estado coerente. Trabalhos em que os desvios da depleção e do emparelhamento não incluem o momento da excitação, em geral, apresentam um problema de gap de energia no ramo discreto [Girardeau].

As equações que obtivemos, correspondentes ao tratamento em aproximação gaussiana, parecem fornecer um número maior de soluções do que aquilo que seria esperado em vista dos resultados mostrados em [Kerman97]. Para tratar essa questão utilizamos a hipótese de que os desvios do estado de equilíbrio devem ser gerados por transformações unitárias infinitesimais. Dessa maneira conseguimos restringir os possíveis desvios em torno da solução estática, eliminando soluções adicionais admitidas pelo ansatz gaussiano que interpretamos como resultantes de variações sobre os números de ocupação envolvidos com o ansatz gaussiano.

A linearização das equações dinâmicas foi feita em torno da solução estática do sistema em temperatura zero, uma condição que conduz aos modos desacoplados presentes em 4.65 e 4.66 e ligados às funções $\phi_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\phi_4(\mathbf{k}, \mathbf{q})$. No caso da solução

estática em temperatura finita esses modos passam a se acoplar com os demais. Podemos verificar isso notando que no decorrer dos cálculos foram utilizadas as equações 3.2 e 3.3 com os números de ocupação ν_k sempre iguais a zero e essa situação não é válida em temperatura finita. Um caso similar pode ser observado no trabalho [Giorgini], no qual um dos principais objetivos é a obtenção de modos de excitação amortecidos¹, utilizando também equações linearizadas em teoria de campo médio. Lá encontramos um sistema de equações equivalente ao nosso, que em temperatura zero sofre o desacoplamento de modos cujas frequências não perturbadas são dadas, num sistema homogêneo, por

$$\pm \left(\mathcal{E} \left(\left| \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) - \mathcal{E} \left(\left| \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) \right),$$

como nas equações 4.65 e 4.66.

Nas soluções numéricas das equações linearizadas (4.63 - 4.68) que correspondem às configurações das excitações elementares, não foram encontradas excitações amortecidas. Porém, um modo de obtê-las, consiste em distorcer o sistema através de uma combinação linear de excitações de momento total fixo mas que correspondam a modos com diferentes energias (ou frequências) e nesse caso o termo de amortecimento decorre da dispersão do pacote de onda.

Com relação aos resultados numéricos, comparamos valores para a velocidade do som calculados numericamente em aproximação gaussiana $c_G(\rho a^3)$, com os provenientes da aproximação de Bogoliubov $c_b(\rho a^3)$, fizemos essa comparação para diversos valores do coeficiente dado pelo produto da densidade com a terceira potência do comprimento de espalhamento ρa^3 . Qualitativamente, os resultados confirmam o que esperávamos, com os valores fornecidos pela aproximação gaussiana sendo sempre ligeiramente inferiores aos resultantes da aproximação de Bogoliubov. Notamos ainda que a grandeza descrita por

$$\frac{c_b(\rho a^3) - c_G(\rho a^3)}{c_b(\rho a^3) + c_G(\rho a^3)}$$

apresentada na tabela 6.1, mostrou-se aproximadamente independente de ρa^3 .

Um tratamento como o desenvolvido aqui é, claramente, bastante trabalhoso quando comparado à aproximação de Bogoliubov, que despreza a interação entre partículas fora do condensado. Para baixa densidade e temperatura zero ambas abordagens fornecem, a grosso modo, resultados equivalentes. No entanto, um tratamento completo, quando estendido a densidades mais elevadas ou a temperatura

¹Em experimentos a temperatura finita se observa o amortecimento das excitações que em alguns casos é atribuído à interação com a nuvem térmica.

finita, como por exemplo em [Giorgini], pode trazer resultados não previstos por uma aproximação de quasi-partículas independentes como a de Bogoliubov. Uma alteração característica e bastante conhecida provocada pelo aumento da temperatura é a diminuição da densidade de partículas no estado condensado, fazendo com que, acima de uma certa temperatura crítica, o espectro retome o aspecto de partícula livre, uma vez que a velocidade do som de Bogoliubov (ou som zero) é proporcional a raiz quadrada da densidade do condensado, como podemos ver de 3.25, tomando o limite de grandes comprimentos de onda.

Um segundo interesse desse trabalho foi o de mostrar que o tratamento completo em campo médio gaussiano aplicado a bosons fornece, sem a necessidade de nenhum artifício complementar, um espectro de excitações elementares com comportamento do tipo fônon, para grandes comprimentos de onda. Sendo esta uma propriedade conhecida tanto do lado teórico [Pines59] como experimental [Ketterle97].

Apêndice A

Fatoração de valores médios.

A.1 Fatoração do valor médio de operadores de dois corpos em médias de operadores de um corpo.

Nesta seção analisamos os valores médio tomados, em aproximação de campo médio, sobre operadores de dois ou mais corpos descritos em segunda quantização com o intuito de demonstrar que a existência da fatoração em médias de operadores de um corpo, quando ocorre, é independente da base de operadores “bosônicos” utilizada. Para essa demonstração não é necessário explicitarmos as regras de comutação entre os operadores.

Supomos duas bases genéricas de operadores $\{\hat{A}_j\}$ e $\{\hat{B}_j\}$ relacionados por uma transformação linear inversível

$$\hat{A}_j = \sum_{\mu} \Lambda_{j\mu} \hat{B}_{\mu}. \quad (\text{A.1})$$

Inicialmente assumimos que médias tomadas sobre um operador $\hat{B}_j$ sejam sempre nulas

$$\langle \hat{B}_j \rangle = 0, \quad (\text{A.2})$$

como consequência direta temos

$$\langle \hat{A}_j \rangle = 0. \quad (\text{A.3})$$

A equação de transformação para a média do produto de dois operadores é

$$\langle \hat{A}_j \hat{A}_k \rangle = \sum_{\mu\nu} \Lambda_{j\mu} \Lambda_{k\nu} \langle \hat{B}_{\mu} \hat{B}_{\nu} \rangle, \quad (\text{A.4})$$

ao passo que o valor médio de um produto de quatro é dado por

$$\langle \hat{A}_i \hat{A}_j \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle = \sum_{\mu\nu\alpha\beta} \Lambda_{i\mu} \Lambda_{j\nu} \Lambda_{k\alpha} \Lambda_{l\beta} \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\nu \hat{B}_\alpha \hat{B}_\beta \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Assumimos que o valor médio presente ao lado direito da igualdade acima admite fatoração em médias de um corpo

$$\langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\nu \hat{B}_\alpha \hat{B}_\beta \rangle = : \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\nu \hat{B}_\alpha \hat{B}_\beta \rangle : , \quad (\text{A.6})$$

sendo que definimos¹

$$\begin{aligned} : \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\nu \hat{B}_\alpha \hat{B}_\beta \rangle : &= \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\nu \rangle \langle \hat{B}_\alpha \hat{B}_\beta \rangle + \\ &+ \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\alpha \rangle \langle \hat{B}_\nu \hat{B}_\beta \rangle + \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\beta \rangle \langle \hat{B}_\nu \hat{B}_\alpha \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Então, por substituição desta expressão em A.5 e com auxílio de A.4 verificamos que

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_i \hat{A}_j \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle &= \sum_{\mu\nu\alpha\beta} \Lambda_{i\mu} \Lambda_{j\nu} \Lambda_{k\alpha} \Lambda_{l\beta} \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\nu \hat{B}_\alpha \hat{B}_\beta \rangle = \sum_{\mu\nu\alpha\beta} \Lambda_{i\mu} \Lambda_{j\nu} \Lambda_{k\alpha} \Lambda_{l\beta} \times \\ &\times \left(\langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\nu \rangle \langle \hat{B}_\alpha \hat{B}_\beta \rangle + \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\alpha \rangle \langle \hat{B}_\nu \hat{B}_\beta \rangle + \langle \hat{B}_\mu \hat{B}_\beta \rangle \langle \hat{B}_\nu \hat{B}_\alpha \rangle \right) = (\text{A.8}) \\ &= \langle \hat{A}_i \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_i \hat{A}_k \rangle \langle \hat{A}_j \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_i \hat{A}_l \rangle \langle \hat{A}_j \hat{A}_k \rangle = : \langle \hat{A}_i \hat{A}_j \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle : . \end{aligned}$$

Portanto, mostramos para o caso particular referente a operadores de dois corpos que a propriedade de fatoração, quando existe, é independente da base utilizada. Pode-se facilmente estender tal resultado para médias tomadas sobre produtos de um número par qualquer desses operadores.

Também procuramos as condições em que a regra de fatoração é independente da ordem em que estão dispostos os operadores. Supomos que a média de uma produto de $2n$ operadores $\hat{A}_j$ arranjados em uma determinada ordem fature de acordo com a regra convencional.

$$\langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{2n} \rangle = : \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{2n} \rangle : . \quad (\text{A.9})$$

Então, utilizando a igualdade

$$\hat{A}_j \hat{A}_k = [\hat{A}_j, \hat{A}_k] + \hat{A}_k \hat{A}_j$$

¹Essa é a fatoração fornecida pelo operador gaussiano $\hat{F}_0$ no caso em que os operadores sobre os quais a média é tomada satisfaçam a equação A.2

invertemos a ordem entre $\hat{A}_m$ e $\hat{A}_{m+1}$, obtendo

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+1} \hat{A}_m \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle &= \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle + \\ + \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} [\hat{A}_{m+1}, \hat{A}_m] \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle &=: \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle : + \\ + \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} [\hat{A}_{m+1}, \hat{A}_m] \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

e utilizando que

$$\begin{aligned} : \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle &=: \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+1} \hat{A}_m \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle : - \\ - \langle [\hat{A}_{m+1}, \hat{A}_m] \rangle &: \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle : \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

obtemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+1} \hat{A}_m \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle &= \\ =: \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+1} \hat{A}_m \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle : &- \\ - \langle [\hat{A}_{m+1}, \hat{A}_m] \rangle : \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle : &+ \\ + \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} [\hat{A}_{m+1}, \hat{A}_m] \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Portanto para que a igualdade

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+1} \hat{A}_m \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle &= \\ =: \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+1} \hat{A}_m \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle : \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

seja verdadeira é necessário e suficiente que

$$\begin{aligned} \langle [\hat{A}_m, \hat{A}_{m+1}] \rangle &: \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle := \\ = \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dots \hat{A}_{m-1} [\hat{A}_m, \hat{A}_{m+1}] \hat{A}_{m+2} \dots \hat{A}_{2n-1} \hat{A}_{2n} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Para operadores de criação e aniquilação de bosons, cujos comutadores sempre fornecem números, essa expressão é sempre verdadeira. Vemos, pois, que a validade da fatoração, para tais operadores, não é influenciada pela ordem em que estão dispostos.

A.2 Alguns estados quânticos geradores de médias fatoradas.

Voltamos a trabalhar com os operadores bosônicos $\hat{a}_j$ e $\hat{a}_j^\dagger$ a fim de investigarmos algumas situações em que um operador de dois corpos sofre fatoração.

Podemos facilmente verificar que todo estado $|0\rangle$ que seja o vácuo de alguma base de operadores de quasi-partícula

$$\hat{a}_j |0\rangle = 0, \quad \text{para todo } j,$$

gera valores médios em acordo com as regras usuais de fatoração definidas em A.11. Supomos um operador $\hat{A}$ construído através de um produto envolvendo N operadores de aniquilação $\{\hat{a}_{\mu_j}\}$ e N operadores de criação $\{\hat{a}_{\nu_j}^\dagger\}$ numa ordem arbitrária e mostramos que caso a média desse operador no estado de vácuo seja fatorada então também serão as médias tomadas sobre os operadores $\hat{a}_\beta^\dagger \hat{A} \hat{a}_\alpha$ e $\hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger$, daí a prova geral da fatoração segue naturalmente.

O caso relativo a $\hat{a}_\beta^\dagger \hat{A} \hat{a}_\alpha$ é trivial, uma vez que

$$\langle 0 | \hat{a}_\beta^\dagger \hat{A} \hat{a}_\alpha | 0 \rangle = : \langle 0 | \hat{a}_\beta^\dagger \hat{A} \hat{a}_\alpha | 0 \rangle : = 0.$$

Com o objetivo de mostrarmos que também a média sobre o operador $\hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger$ satisfaz as regras de fatoração, o reescrevemos da seguinte forma

$$\hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger = \left[[\hat{a}_\alpha, \hat{A}], \hat{a}_\beta^\dagger \right] + \hat{A} \delta_{\alpha,\beta} + \hat{a}_\beta^\dagger [\hat{a}_\alpha, \hat{A}] + \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha. \quad (\text{A.15})$$

Ao tomarmos o valor médio no estado de vácuo obtemos

$$\langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \left[[\hat{a}_\alpha, \hat{A}], \hat{a}_\beta^\dagger \right] | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle \delta_{\alpha,\beta}. \quad (\text{A.16})$$

Por fim, utilizando

$$\begin{aligned} [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \dots \hat{a}_{n-1}^\dagger \hat{a}_n^\dagger] &= [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_1^\dagger] \hat{a}_2^\dagger \dots \hat{a}_{n-1}^\dagger \hat{a}_n^\dagger + \hat{a}_1^\dagger [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_2^\dagger] \hat{a}_3^\dagger \dots \hat{a}_{n-1}^\dagger \hat{a}_n^\dagger + \\ &+ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_3^\dagger] \hat{a}_4^\dagger \dots \hat{a}_{n-1}^\dagger \hat{a}_n^\dagger + \dots + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \dots + \hat{a}_{n-1}^\dagger [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_n^\dagger] \end{aligned}$$

e

$$\delta_{\beta\alpha} = [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^\dagger] = \langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle,$$

reescrevemos A.16 como

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle &= \sum_{jk} [\langle 0 | \hat{A}_{\mu_k}^{\nu_j} | 0 \rangle \delta_{\nu_j\alpha} \delta_{\mu_k\beta} + \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle \delta_{\beta\alpha}] = \\ &= \sum_{jk} [\langle 0 | \hat{A}_{\mu_k}^{\nu_j} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{a}_{\nu_j}^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | \hat{a}_{\mu_k} \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle] = \\ &=: \langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle :, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

onde $\hat{A}_{\mu_k}^{\nu_j}$ é o operador resultante da simples remoção dos operadores $\hat{a}_{\nu_j}^\dagger$ e $\hat{a}_{\mu_k}$ de $\hat{A}$. Portanto se

$$\langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle =: \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle :$$

então

$$\langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle =: \langle 0 | \hat{a}_\alpha \hat{A} \hat{a}_\beta^\dagger | 0 \rangle : .$$

Assim, está claro que em sistemas envolvendo bósons, estados de vácuo fornecem médias fatoradas. Entretanto vetores com número de ocupações definido e diferente de zero, tal como

$$|\psi\rangle = \prod_{\mu}^{\infty} (\hat{a}_{\mu}^{\dagger})^{n_{\mu}} |0\rangle, \quad \text{com} \quad \sum_{\mu}^{\infty} n_{\mu} \neq 0,$$

onde n_{μ} são inteiros, não geram médias de acordo com o teorema de Wick.

A.2.1 Matriz densidade gaussiana.

O ansatz gaussiano

$$\hat{F}_0 = \prod_j \frac{1}{1 + \nu_j} \left(\frac{\nu_j}{1 + \nu_j} \right)^{\hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_j},$$

geralmente é utilizado para representar estados não puros provenientes de sistemas abertos. Nesses casos o valor médio de um observável genérico $\hat{A}$ é obtido através do traço do produto de ambos os operadores

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \left\{ \hat{A} \hat{F}_0 \right\}.$$

O operador gaussiano carrega a propriedade de gerar valores médios fatorados de acordo com a aproximação de campo médio (ou teorema de Wick) para qualquer que seja o operador sobre o qual a média é tomada. Neste trabalho nós tratamos somente com operadores de 1 ou 2 corpos, nos quais a fatoração é facilmente observada em um cálculo explícito, no entanto por efeito ilustrativo apresentamos uma demonstração aplicável a um operador genérico.

Por sua estrutura $\hat{F}_0$ fornece valores médios não nulos somente se o operador em questão for uma função de produtos como

$$\hat{n}_j = \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_j$$

isto é, devem ser construídos por um número igual de operadores de criação e aniquilação correspondentes ao mesmo estado. Além disso, podemos nos ater ao estudo de médias das potências dos operadores $\hat{n}_j$ isoladamente, uma vez que a fatoração entre elementos de índices distintos é trivial.

Analisamos, abaixo, a média do operador

$$(\hat{a}_{\mu}^{\dagger})^n (\hat{a}_{\mu})^n,$$

sendo que, por simplicidade, seus índices serão omitidos ao longo dessa seção, onde passamos a utilizar a notação

$$\begin{aligned}\hat{a}_\mu &\longrightarrow \hat{a}, \\ \hat{a}_\mu^\dagger &\longrightarrow \hat{a}^\dagger.\end{aligned}$$

O valor médio tomado sobre o operador $(\hat{a}^\dagger)^n (\hat{a})^n$ fornece

$$\text{Tr}\{\hat{F}_0 (\hat{a}^\dagger)^n (\hat{a})^n\} = (1-p) \sum_m m(m-1)(m-2)\dots(m-n+1)p^m$$

onde

$$p = \frac{\nu}{1+\nu},$$

por outro lado, supondo verídica a hipótese da fatoração de Wick², obtemos

$$\text{Tr}\{\hat{F}_0 (\hat{a}^\dagger)^n (\hat{a})^n\} = n! \nu^n = n! \left(\frac{p}{1-p}\right)^n.$$

As duas expressões para $\text{Tr}\{\hat{F}_0 (\hat{a}^\dagger)^n (\hat{a})^n\}$ fornecem a relação

$$n! \frac{p^n}{(1-p)^{n+1}} = \sum_m m(m-1)(m-2)\dots(m-n+1)p^m,$$

que, em princípio, supomos ser válida para algum n . Ao tomar o traço sobre o operador $(\hat{a}^\dagger)^{n+1} (\hat{a})^{n+1}$ obtemos

$$\begin{aligned}\text{Tr}\{\hat{F}_0 (\hat{a}^\dagger)^{n+1} (\hat{a})^{n+1}\} &= (1-p) \sum_m m(m-1)(m-2)\dots(m-n)p^m = \\ &= (1-p) \sum_m m^2(m-1)(m-2)\dots(m+1-n)p^m - \\ &\quad - n(1-p) \sum_m m(m-1)(m-2)\dots(m+1-n)p^m = \\ &= (1-p)p \frac{d}{dp} \sum_m m(m-1)(m-2)\dots(m+1-n)p^m - nn! \left(\frac{p}{1-p}\right)^n.\end{aligned}\tag{A.18}$$

A última passagem provém da igualdade anterior, a qual pode também ser aplicada à somatória restante na equação acima, resultando em

$$\begin{aligned}\text{Tr}\{\hat{F}_0 (\hat{a}^\dagger)^{n+1} (\hat{a})^{n+1}\} &= n!(1-p)p \frac{d}{dp} \frac{p^n}{(1-p)^{n+1}} - nn! \left(\frac{p}{1-p}\right)^n = \\ &= (n+1)! \left(\frac{p}{1-p}\right)^{n+1} = (n+1)! \nu^{n+1}.\end{aligned}\tag{A.19}$$

²A verificação no caso em que $n = 1$ é óbvia.

Portanto mostramos que se

$$\mathrm{Tr}\{\hat{F}_0 (\hat{a}^\dagger)^n (\hat{a})^n\} = (n)! \nu^n \quad (\text{A.20})$$

é verdadeiro então vale

$$\mathrm{Tr}\{\hat{F}_0 (\hat{a}^\dagger)^{n+1} (\hat{a})^{n+1}\} = (n+1)! \nu^{n+1}. \quad (\text{A.21})$$

Apêndice B

Condições para a invariância translacional de $\hat{F}_0(t)$.

B.1 Ansatz gaussiano em sistemas homogêneos.

A hamiltoniana de uma gás de bose homogêneo comuta com o operador momento total

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{B.1})$$

Portanto, estados estacionários podem ser representados por matrizes densidade que comutam com o momento total. Em geral, o operador gaussiano $\hat{F}_0(t)$, definido em 2.27 e que aqui usaremos em sua versão estática, não comuta com $\hat{\mathbf{P}}$, para que o comutador dessas duas grandezas seja nulo os parâmetros que definem o operador gaussiano devem respeitar certas condições, que iremos procurar ao longo desse apêndice.

Para que

$$\left[\hat{F}_0, \hat{\mathbf{P}} \right] = 0 \quad (\text{B.2})$$

é suficiente que

$$\left[\hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\mu, \hat{\mathbf{P}} \right] = 0 \quad (\text{B.3})$$

para todo índice μ .

A equação de transformação para as quasi-partículas é

$$\hat{\eta}_\mu = \sum_{\mathbf{k}} \left(U_{\mathbf{k}\mu}^* (\hat{a}_{\mathbf{k}} - \Gamma_{\mathbf{k}}) + V_{\mathbf{k}\mu}^* (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger - \Gamma_{\mathbf{k}}) \right) \quad (\text{B.4})$$

sendo $U_{\mathbf{k}\mu}$, $V_{\mathbf{k}\mu}$ e $\Gamma_{\mathbf{k}}$ números complexos que devem ser escolhidos de tal modo que $\hat{\eta}_\mu^\dagger$ e $\hat{\eta}_\mu$ respeitem as regras de comutação de bosons. Através dessa equação podemos descrever o operador $\hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\mu$ em função de $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ e $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\mu = \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \left\{ (U_{\mathbf{k}_1, \mu} U_{\mathbf{k}_2, \mu}^* + V_{\mathbf{k}_2, \mu} V_{\mathbf{k}_1, \mu}^*) \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} + U_{\mathbf{k}_1, \mu} V_{\mathbf{k}_2, \mu}^* \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^\dagger + \right. \\ \left. + V_{\mathbf{k}_1, \mu} U_{\mathbf{k}_2, \mu}^* \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \right\} + \\ + \sum_{\mathbf{k}} \left\{ |V_{\mathbf{k}, \mu}|^2 + \left(\bar{\Gamma}_\mu^* U_{\mathbf{k}, \mu}^* + \bar{\Gamma}_\mu V_{\mathbf{k}, \mu} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}} + \left(\bar{\Gamma}_\mu^* V_{\mathbf{k}, \mu}^* + \bar{\Gamma}_\mu U_{\mathbf{k}, \mu} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

onde

$$\bar{\Gamma}_\mu = \sum_{\mathbf{k}} (U_{\mathbf{k}, \mu}^* \Gamma_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}, \mu}^* \Gamma_{\mathbf{k}}^*) . \quad (\text{B.6})$$

Utilizando as equações B.1 e B.5 junto com

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}] = -\mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (\text{B.7})$$

obtemos

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\mu] = \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \left\{ (U_{\mathbf{k}_1, \mu} U_{\mathbf{k}_2, \mu}^* + V_{\mathbf{k}_2, \mu} V_{\mathbf{k}_1, \mu}^*) (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (U_{\mathbf{k}_1, \mu} V_{\mathbf{k}_2, \mu}^* + U_{\mathbf{k}_2, \mu} V_{\mathbf{k}_1, \mu}^*) (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^\dagger - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} (V_{\mathbf{k}_1, \mu} U_{\mathbf{k}_2, \mu}^* + V_{\mathbf{k}_2, \mu} U_{\mathbf{k}_1, \mu}^*) (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \right\} + \\ + \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left(\bar{\Gamma}_\mu^* V_{\mathbf{k}, \mu}^* + \bar{\Gamma}_\mu U_{\mathbf{k}, \mu} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger - \left(\bar{\Gamma}_\mu^* U_{\mathbf{k}, \mu}^* + \bar{\Gamma}_\mu V_{\mathbf{k}, \mu} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}} \right\} \mathbf{k} . \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

A condição

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\eta}_\mu^\dagger \hat{\eta}_\mu] = 0$$

implica em três equações para os parâmetros $U_{\mathbf{k}, \mu}$, $V_{\mathbf{k}, \mu}$ e $\Gamma_{\mathbf{k}}$

$$(U_{\mathbf{k}_1, \mu} U_{\mathbf{k}_2, \mu}^* + V_{\mathbf{k}_2, \mu} V_{\mathbf{k}_1, \mu}^*) (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) = 0 , \quad (\text{B.9})$$

$$(U_{\mathbf{k}_1, \mu} V_{\mathbf{k}_2, \mu}^* + U_{\mathbf{k}_2, \mu} V_{\mathbf{k}_1, \mu}^*) (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) = 0 , \quad (\text{B.10})$$

$$\left(\bar{\Gamma}_\mu^* U_{\mathbf{k}, \mu}^* + \bar{\Gamma}_\mu V_{\mathbf{k}, \mu} \right) \mathbf{k} = 0 . \quad (\text{B.11})$$

Digamos que $U_{\mathbf{k}, \mu}$ seja diferente de zero para $\mathbf{k} = \mathbf{q}$, supondo inicialmente $q \neq 0$, então colocando $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = \mathbf{q}$ em B.10 obtemos

$$U_{\mathbf{q}, \mu} V_{\mathbf{q}, \mu}^* \mathbf{q} = 0 . \quad (\text{B.12})$$

Portanto $V_{\mathbf{q},\mu} = 0$, o que junto à equação B.10 leva a

$$V_{\mathbf{k},\mu} = 0, \quad \text{para todo } \mathbf{k} \neq -\mathbf{q} \quad (\text{B.13})$$

Deixando $\mathbf{k}_1 = \mathbf{q}$ em B.9 obtemos

$$(U_{\mathbf{q},\mu} U_{\mathbf{k}_2,\mu}^* + V_{\mathbf{k}_2,\mu} V_{\mathbf{q},\mu}^*) (\mathbf{q} - \mathbf{k}_2) = U_{\mathbf{q},\mu} U_{\mathbf{k}_2,\mu}^* (\mathbf{q} - \mathbf{k}_2) = 0 \quad (\text{B.14})$$

Portanto $U_{\mathbf{k},\mu} = 0$ se $\mathbf{k} \neq \mathbf{q}$. Falta ainda tratarmos o caso de momento nulo. Deixando $\mathbf{k}_1 = 0$ em B.9 e B.10, obtemos

$$(U_{0,\mu} U_{\mathbf{k},\mu}^* + V_{\mathbf{k},\mu} V_{0,\mu}^*) \mathbf{k} = 0 \quad (\text{B.15})$$

e

$$(U_{0,\mu} V_{\mathbf{k},\mu}^* + U_{\mathbf{k},\mu} V_{0,\mu}^*) \mathbf{k} = 0, \quad (\text{B.16})$$

de onde vem que

$$V_{\mathbf{k},\mu} = 0, \quad \text{para } \mathbf{k} \neq 0. \quad (\text{B.17})$$

Do que obtivemos sobre as matrizes $U_{\mathbf{k},\mu}$ e $V_{\mathbf{k},\mu}$ resulta ser mais apropriado indexá-las por vetores em ambos os índices

$$\begin{aligned} U_{\mathbf{k},\mu} &\longrightarrow U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_\mu} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_\mu} x_{\mathbf{k}_\mu}, \\ V_{-\mathbf{k},\mu} &\longrightarrow V_{-\mathbf{k},\mathbf{k}_\mu} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_\mu} y_{\mathbf{k}_\mu}, \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

com

$$|x_{\mathbf{k}_\mu}|^2 - |y_{\mathbf{k}_\mu}|^2 = 1. \quad (\text{B.19})$$

As restrições sobre os parâmetros de deslocamento $\Gamma_{\mathbf{k}}$ provêm da equação B.11, que junto com B.6 e B.18 fornecem

$$\left\{ (x_{\mathbf{k}_1} \Gamma_{\mathbf{k}_1}^* + y_{\mathbf{k}_1} \Gamma_{-\mathbf{k}_1}) \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} x_{\mathbf{k}_1} + (x_{\mathbf{k}_1}^* \Gamma_{\mathbf{k}_1} + y_{\mathbf{k}_1}^* \Gamma_{-\mathbf{k}_1}^*) \delta_{-\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} y_{\mathbf{k}_1} \right\} \mathbf{k}_2 = 0. \quad (\text{B.20})$$

Fixando $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$ obtemos

$$(x_{\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}}^* + y_{\mathbf{k}} \Gamma_{-\mathbf{k}}) \mathbf{k} = 0, \quad (\text{B.21})$$

onde usamos que $x_{\mathbf{k}}$ é diferente de zero. Levando $\mathbf{k} \longrightarrow -\mathbf{k}$ e tomando o complexo conjugado da equação acima obtemos uma nova equação que junto com a primeira mostram que

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = 0, \quad \text{para } \mathbf{k} \neq 0 \quad (\text{B.22})$$

e somente $\Gamma_{\mathbf{k}}|_{\mathbf{k}=0}$ pode ser diferente de zero.

Nessas circunstâncias os operadores de quasi-partícula adquirem a forma

$$\begin{aligned}\hat{\eta}_{\mathbf{k}} &= x_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} + y_{\mathbf{k}}\hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, & k \neq 0 \\ \hat{\eta}_0 &= x_0(\hat{a}_0 - \Gamma_0) + y_0(\hat{a}_0^{\dagger} - \Gamma_0^*) .\end{aligned}\tag{B.23}$$

ou

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = x_{\mathbf{k}}\hat{\eta}_{\mathbf{k}} - y_{\mathbf{k}}\hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \Gamma_{\mathbf{k}}\tag{B.24}$$

As relações de comutação entre $\hat{\eta}_{\mathbf{k}}$ e $\hat{\eta}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ estabelecem ainda que

$$\begin{aligned}|x_{\mathbf{k}}| &= |x_{-\mathbf{k}}|, \\ |y_{\mathbf{k}}| &= |y_{-\mathbf{k}}|\end{aligned}\tag{B.25}$$

e sendo

$$x_{\pm\mathbf{k}} = |x_{\mathbf{k}}| e^{i\phi_x^{\pm}}$$

e

$$y_{\pm\mathbf{k}} = |y_{\mathbf{k}}| e^{i\phi_y^{\pm}},$$

então

$$\phi_x^+ - \phi_y^+ = \phi_x^- - \phi_y^-.$$

B.1.1 Distribuição isotrópica no espaço de momentos.

Dentro de determinadas condições a matriz densidade gaussiana pode, além de comutar com o operador momento, conter uma distribuição isotrópica dentro desse espaço, o que é uma condição razoável para sistemas em equilíbrio termodinâmico. Um requisito necessário à isotropia é o de que o valor médio do operador número de partículas com momento $\mathbf{k}$ seja independente da direção do vetor. Ao descrevermos tal operador, que chamamos $\hat{N}_{\mathbf{k}}$, em termos das quasi-partículas, expostas em B.23, obtemos

$$\begin{aligned}\hat{N}_{\mathbf{k}} &= \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{k}} = |x_{\mathbf{k}}|^2 \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{\eta}_{\mathbf{k}} + |y_{-\mathbf{k}}|^2 \hat{\eta}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{\eta}_{-\mathbf{k}} - x_{\mathbf{k}}^* y_{-\mathbf{k}}^* \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{\eta}_{-\mathbf{k}} - x_{\mathbf{k}} y_{-\mathbf{k}} \hat{\eta}_{\mathbf{k}}\hat{\eta}_{-\mathbf{k}} + \\ &+ \delta_{k0} \left(\Gamma_0 \left(x_{\mathbf{k}}^* \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} - y_{-\mathbf{k}} \hat{\eta}_{-\mathbf{k}} \right) + \Gamma_0^* \left(x_{\mathbf{k}} \hat{\eta}_{\mathbf{k}} - y_{-\mathbf{k}}^* \hat{\eta}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right) + |y_{-\mathbf{k}}|^2 + |\Gamma_0|^2 \delta_{k0} .\end{aligned}\tag{B.26}$$

Seu valor médio em $\hat{F}_0$ é

$$\text{Tr} \hat{N}_{\mathbf{k}} \hat{F}_0 = |x_{\mathbf{k}}|^2 \nu_{\mathbf{k}} + |y_{\mathbf{k}}|^2 (\nu_{-\mathbf{k}} + 1) + |\Gamma_0|^2 \delta_{k0} .\tag{B.27}$$

Conseqüentemente para que a matriz $\hat{F}_0$ possua invariância rotacional é necessário que sejam adicionadas as seguintes condições

$$\begin{aligned}|x_{\mathbf{k}}| &\longrightarrow |x_k|, \\ |y_{\mathbf{k}}| &\longrightarrow |y_k|\end{aligned}$$

e

$$\nu_{\mathbf{k}} \longrightarrow \nu_k .$$

Apêndice C

Relações algébricas envolvendo o operador gaussiano

Considerando um conjunto de operadores de criação e aniquilação de bósons $\hat{a}_j$ e $\hat{a}_j^\dagger$, apresentamos aqui algumas relações algébricas importantes.

As relações de comutação são

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \delta_{jk} \quad (\text{C.1})$$

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k] = 0 \quad (\text{C.2})$$

De onde obtemos

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_k = \hat{a}_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - 1)$$

e

$$(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)^n \hat{a}_k = \hat{a}_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - 1)^n$$

Seguem, dessas expressões

$$\left[\hat{a}_k, e^{-\lambda \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k} \right] = \hat{a}_k e^{-\lambda \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k} (1 - e^\lambda)$$

e

$$\left[\hat{a}_k^\dagger, e^{-\lambda \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k} \right] = \hat{a}_k^\dagger e^{-\lambda \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k} (1 - e^{-\lambda})$$

O operador gaussiano construído através dos operadores $\hat{a}_j$ e $\hat{a}_j^\dagger$ toma a forma

$$\hat{F}_0 = \prod_j \frac{1}{1 + \nu_j} \left(\frac{\nu_j}{1 + \nu_j} \right)^{\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j}$$

A relação entre o coeficiente λ_k e o número de ocupação ν_k é

$$e^{-\lambda_k} = \frac{\nu_k}{1 + \nu_k}$$

ou

$$\nu_k = \frac{1}{e^{\lambda_k} - 1}$$

Por fim as relações de comutação entre o operador gaussiano e os operadores de criação e aniquilação são

$$\left[\hat{a}_j, \hat{F}_0 \right] = -\frac{\hat{a}_j \hat{F}_0}{\nu_j}$$

$$\left[\hat{a}_j^\dagger, \hat{F}_0 \right] = \frac{\hat{a}_j^\dagger \hat{F}_0}{1 + \nu_j}$$

Temos também

$$\left[\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k, \hat{F}_0 \right] = \frac{\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{F}_0 (\nu_k - \nu_j)}{\nu_k (1 + \nu_j)}$$

e

$$\left[\hat{a}_j \hat{a}_k, \hat{F}_0 \right] = -\frac{\hat{a}_j \hat{a}_k \hat{F}_0 (\nu_k + \nu_j + 1)}{\nu_k \nu_j}$$

Apêndice D

Expressão para a velocidade de som zero

No capítulo 6 apresentamos alguns resultados numéricos e mostramos a curva referente ao ramo discreto de excitação onde se verifica o caráter linear, isto é do tipo fonon, no limite de grandes comprimentos de onda. Neste apêndice desenvolvemos perturbativamente a correção de primeira ordem do ramo discreto de energia com respeito ao momento total, para tentarmos chegar mais perto de uma expressão analítica.

Para darmos andamento aos cálculos utilizamos as equações expostas em 4.85, 4.86, 4.87 e 4.88, que expandimos em até segunda ordem no momento total. Dentro dessas equações toda dependência com respeito ao momento total resulta do módulo descrito pelas funções

$$\varphi_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \left| \mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2} \right|.$$

A correspondente expansão até segunda ordem fornece

$$\varphi_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = k \pm \cos(\theta) \frac{q}{2} + \frac{\sin^2(\theta)}{k} \frac{q^2}{8} + \mathcal{O}(q^3), \quad (\text{D.1})$$

sendo que θ é o ângulo compreendido entre os vetores $\mathbf{q}$ e $\mathbf{k}$. De uma forma geral, a expansão até segunda ordem de uma função composta do tipo

$$g(\mathbf{k}, \pm \mathbf{q}) = g(\varphi_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{q})),$$

resulta em

$$\begin{aligned} g(\varphi_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{q})) &= g(k) \pm \frac{\cos(\theta)}{2} \dot{g}(k) q + \\ &+ \left(\frac{\sin^2(\theta)}{k} \dot{g}(k) + \ddot{g}(k) \cos^2(\theta) \right) \frac{q^2}{8} + \mathcal{O}(q^3). \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Antes de prosseguirmos notamos das equações (4.85) à (4.88) que as funções $\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $P(\mathbf{q})$ são ímpares no momento total $\mathbf{q}$, ao passo que as funções $\psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $Q'(\mathbf{q})$ são pares. Portanto as correções de primeira ordem resultam das equações (4.86) e (4.88), enquanto as equações (4.85) e (4.87) fornecem as correções de segunda ordem.

D.0.2 Correções de primeira ordem

As equações (4.86) e (4.88) após expansão até segunda ordem resultam em

$$\begin{aligned} 2\Delta(k)\psi_1^{(1)}(k) - \omega^{(1)}(q) s_k \psi_2^{(0)}(k) = \\ = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} v(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) (s_{k'}^2 s_k - s_{k'} c_{k'} s_k) \psi_1^{(1)}(k') - \\ - \frac{v(0)}{V} s_k \sum_{\mathbf{k}'} s_{k'}^2 \psi_1^{(1)}(k') + \rho_0 \left(s_k v(0) + v(k)(s_k - c_k) \right) P^{(1)}(q) \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

e

$$\begin{aligned} (\Delta(0) - \Lambda(0)) P^1(q) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}'} v(k') s'_k (s_{k'} - c_{k'}) \psi_1^{(1)}(k') + \\ + \frac{2}{V} v(0) \sum_{\mathbf{k}'} s_{k'}^2 \psi_1^{(1)}(k') + \omega Q'^{(0)}(q). \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Sendo que c_k e s_k estão definidas em 5.37 e definimos $\psi_1^{(1)}(k)$, $\omega^{(1)}(q)$ e $P^1(q)$ como as correções de primeira ordem de $\psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, $\omega(q)$ e $P(q)$ com respeito ao momento total.

Das duas equações acima podemos eliminar $P^{(1)}(q)$, restando uma equação para definir $\psi_1^{(1)}(k)$ e $\omega^{(1)}(q)$. Desse modo podemos, em princípio, descrever $\psi_1^{(1)}(k)$ em função de $\omega^{(1)}(q)$. A definição do valor de $\omega^{(1)}(q)$ é fornecida pelas equações envolvendo os termos de segunda ordem.

D.0.3 Correções de segunda ordem

As correções de segunda ordem resultam das funções 4.86 e 4.88. Antes de apresentarmos as equações correspondentes mostramos algumas definições utilizadas ao expandir alguns parâmetros ali presentes e que dependem do momento total. As funções a serem expandidas são a frequência $\omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e as funções $\kappa_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ e $\chi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ mostradas respectivamente em 4.53, 4.70 e 4.74. Desenvolvemos essas funções através da notação

$$\omega_+(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \omega_+^{(0)}(k) + \omega_+^{(2)}(k, \theta) q^2 + \mathcal{O}(q^4)$$

e

$$\chi_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \chi_2^{(0)}(k) + \chi_2^{(2)}(k, \theta) q^2 + \mathcal{O}(q^4),$$

onde θ é o ângulo formado entre o momento total e o relativo. As funções $\omega_+^{(0)}(k)$, $\omega_+^{(2)}(k, \theta)$, $\chi_2^{(0)}(k)$ e $\chi_2^{(2)}(k, \theta)$ são dadas por

$$\omega_+^{(0)}(k) = 2\mathcal{E}(k), \quad (\text{D.5})$$

$$\omega_+^{(2)}(k, \theta) = \frac{1}{4} \left(\dot{\mathcal{E}}(k) \frac{\sin^2(\theta)}{k} + \ddot{\mathcal{E}}(k) \cos^2(\theta) \right), \quad (\text{D.6})$$

$$\chi_2^0(k) = \frac{\rho_0 v(k)}{2 s_k}, \quad (\text{D.7})$$

e

$$\begin{aligned} \chi_2^{(2)}(k)(k, \theta) = & \frac{\rho_0}{16 s_k} \left(\frac{\sin^2(\theta)}{k} \left(\dot{v}(k) - \frac{\dot{s}_k v(k)}{s_k} \right) + \right. \\ & \left. + \cos^2(\theta) \left(\ddot{v}(k) - \frac{2 \dot{v}(k) \dot{s}_k}{c_k} - \frac{v(k) \ddot{s}_k}{s_k} + \frac{2v(k) \dot{c}_k \dot{s}_k}{c_k s_k} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Temos também

$$\kappa_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \kappa_2^0(k, k') + \kappa_2^{(2)}(k, \theta, k', \theta') q^2 + \mathcal{O}(q^4) \quad (\text{D.9})$$

onde θ e θ' são respectivamente os ângulos entre o momento total e os vetores $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$, sendo

$$\kappa_2^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -2 \frac{s_{k'}}{s_k}, \quad (\text{D.10})$$

$$\begin{aligned} \kappa_2^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = & \frac{1}{4 s_k c_k} \left(-2 \cos(\theta) \cos(\theta') \dot{s}_k \dot{c}_{k'} - c_k \left(\frac{\dot{s}_{k'} \sin^2(\theta')}{k'} + \ddot{s}_{k'} \cos^2(\theta') \right) + \right. \\ & \left. \frac{1}{s_k} \left(\frac{\sin^2(\theta) s_{k'} c_k \dot{s}_k}{k} + \cos^2(\theta) s_{k'} c_k \ddot{s}_k - 2 \cos^2(\theta) s_{k'} \dot{c}_k \dot{s}_k \right) \right), \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Agora estamos aptos a descrever a expansão perturbativa de segunda ordem da equação 4.86

$$\begin{aligned} & \omega_+^0(k) \psi_2^{(2)}(k, \theta) - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} v(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \kappa_2^0(k, k') \psi_2^{(2)}(k', \theta') + 2\chi_2^0(k) Q'^{(2)} = \\ & = \omega^1(q) \psi_1^{(1)}(k) - \omega_+^{(2)}(k, \theta) \psi_2^{(0)}(k) + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} v(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \kappa_2^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \psi_2^{(0)}(k') - \\ & \quad - 2\chi_2^{(2)}(k, \theta) Q'^{(0)} \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Precisamos igualmente da expressão correspondente a equação 4.88 expandida em até segunda ordem

$$\begin{aligned}
& (\Lambda(0) - \Delta(0))Q'^{(2)} + \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} v(k)s_k \psi_2^{(2)}(k, \theta) = \\
& \omega^{(1)}P^{(1)} - (\Lambda_q^{(2)} - \Delta_q^{(2)})Q'^{(0)} + \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\cos^2(\theta)(2v(k)c_k - \right. \\
& \left. - \ddot{v}(k)s_k - \ddot{s}_k v(k)) - \frac{\text{sen}^2(\theta)}{k} (\dot{v}(k)s_k + v(k)\dot{s}_k) \right) \psi_2^{(0)}(k, \theta),
\end{aligned} \tag{D.13}$$

sendo que

$$\Lambda_q^{(2)} - \Delta_q^{(2)} = 1 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} v(k) \left(\frac{\text{sen}^2(\theta)}{k} (\dot{m}^0(k) + \dot{n}^0(k)) + \cos^2(\theta) (\ddot{n}^0(k) + \ddot{m}^0(k)) \right) \tag{D.14}$$

e as funções $n^0(k)$ e $m^0(k)$ estão definidas em 3.2 e 3.3.

Conforme vimos na seção 5.3, onde mostramos a solução do caso particular em que o momento total é nulo, o operador que age sobre $\psi_2^{(2)}(k, \theta)$ na equação acima é singular, ou seja, não inversível. Portanto $\omega^{(1)}$ deve ser escolhido adequadamente de forma a permitir uma solução para $\psi_2^{(2)}(k, \theta)$.

De um modo esquemático podemos descrever esse problema por meio de uma equação que determine um estado $|\psi\rangle$ na forma

$$\hat{P}|\psi\rangle = |f\rangle - \omega |g\rangle,$$

sendo $\hat{P}$ um operador não inversível, $|f\rangle$ e $|g\rangle$ vetores conhecidos e ω um parâmetro a ser determinado. Aplicando pela esquerda um estado do espaço dual $\langle\phi|$ tal que

$$\langle\phi|\hat{P} = 0.$$

Temos uma equação determinando o valor de ω

$$\langle\phi|f\rangle = \omega \langle\phi|g\rangle,$$

cujas soluções existem somente se

$$\langle\phi|g\rangle \neq 0.$$

ou

$$\langle\phi|f\rangle = 0.$$

Referências Bibliográficas

- [Anderson 95] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [Bogoliubov] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. (USSR)* **11**, 23 (1947).
- [Blaizot] G. Ripka, J. Blaizot, "Quantum theory of finite systems", Cambridge, Mass. MIT Press (1986).
- [Brunello] A. Brunello, F. Dalfovo, L. Pitaevskii, S. Stringari, *Phys. Rev. Letters*, **85**, 4422, (2000).
- [Dalfovo] F. Dalfovo, Stefano Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, LANL arxiv: cond-mat/9806038 (Oct. 1998).
- [Feynman] R. P. Feynman and Michael Cohen, *Phys. Rev.* **102**, 1189 (1956).
- [Gardiner] C. W. Gardiner, *Phys. Rev. A* **56**, 1414 (1997).
- [Giorgini] S. Giorgini, LANL arxiv: cond-mat/9709259 (Sep. 1997).
Phys. Rev. A **57**, 2949 (1998).
- [Girardeau] M. Girardeau, R. Arnowitt, *Phys. Rev.* **113**, 755, (1959).
- [Griffin] A. Griffin, *Phys. Rev. B*, **53**, 9341, (1996).
- [Kerman97] A. K. Kerman, P. Tommasini, *Ann. Phys.* **260**, 250-274 (1997).
- [Kerman97b] A. K. Kerman, P. Tommasini, *Phys. Rev. B* **56**, 14733 (1997).
- [Ketterle97] W. Ketterle, M. R. Andrews, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 553 (1997).
- [Ketterle98] W. Ketterle, M. R. Andrews, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2967 (1998).
- [Ketterle99] W. Ketterle, D. S. Durfee, D. M. Stamper-Kurn, LANL arxiv: cond-mat/9904034 (April 1997).

- [Ketterle99b] W. Ketterle, A. P. Chikkatur, A. Görlitz, S. Gupta, D. E. Pritchard, D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. Letters*, **83**, 2876, (1999).
- [Kobe] Donald H. Kobe, *Annals of Physics*, **47**, 15-39, (1968).
- [Landau41] L. Landau, *J. Phys. (U.S.S.R)* **5**, 71 (1941).
- [Landau47] L. Landau, *J. Phys. (U.S.S.R)* **11**, 91 (1941).
- [Landau 58] L. D. Landau, “Quantum mechanics, non-relativistic theory”, Pergamon Press, 1958.
- [Landau 61] L. D. Landau, “Statistical physics”, Pergamon Press, 1961.
- [London] London F., 1954, “Superfluids II: Macroscopic Theory of Superfluid Helium”, (Wiley, New York).
- [Pines59] D. Pines, N. M. Hugenholtz, *Phys. Rev.* **116**, 489 (1959).
- [Pines99] D. Pines, P. Nozières, “The Theory of Quantum Liquids”, Perseus Books, (1999).
- [Piza] A. F. R. de Toledo Piza, Notas de aula para a primeira Escola de pós-graduação em Física no Nordeste, Publicação IFUSP/P-659, Agosto 1987.
- [Tommasini95] Paolo R. I. Tommasini, *Aproximação gaussiana para um sistema não-ideal de muitos bósons*, Tese de doutorado (1995).
- [Tommasini97] Paolo R. I. Tommasini, A.F.R. de Toledo Piza, *Ann. Phys.* **253**, 198-218 (1997).
- [Tommasini03] Paolo Tommasini, E. J. V. de Passos, M. O. C. Pires, A. F. R. de Toledo Piza, LANL arxiv: cond-mat/0307745 (07/2003).
- [Valatin58] J. G. Valatin, D. Butler *IL NUOVO CIMENTO*, **10**, 37 (1958).
- [Yang] C. N. Yang and Kerson Huang, *Phys. Rev.* **105**, 767 (1957).
- [Yong 91] L. C. Yong, *Aproximação cinética para o problema de condição inicial na teoria quântica de campo*. Tese de Doutorado, U.S.P (1991).
- [Yong 92] L. C. Yong, A.F.R. de Toledo Piza, *Phys. Rev. D* **46**, 742 (1992).